

FLÁVIO RENÊ MIRANDA PAVAN

**Independência estatística e diagonalização de matrizes de
cumulantes em separação cega de fontes**

São Paulo
2020

FLÁVIO RENÊ MIRANDA PAVAN

**Independência estatística e diagonalização de matrizes de
cumulantes em separação cega de fontes**

Tese apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para obtenção do
título de Doutor em Ciências.

São Paulo
2020

FLÁVIO RENÊ MIRANDA PAVAN

**Independência estatística e diagonalização de matrizes de
cumulantes em separação cega de fontes**

(versão corrigida)

Tese apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para obtenção do
título de Doutor em Ciências.

Área de Concentração: Sistemas Eletrônicos

Orientadora: Prof.^a Dr.^a Maria D. Miranda

São Paulo

2020

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, _____ de _____ de _____

Assinatura do autor: _____

Assinatura do orientador: _____

Catálogo-na-publicação

Pavan, Flávio Renê Miranda

Independência estatística e diagonalização de matrizes de cumulantes em separação cega de fontes / F. R. M. Pavan -- versão corr. -- São Paulo, 2020.
252 p.

Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
Departamento de Engenharia de Telecomunicações e Controle.

1.Processamento digital de sinais 2.Estatística e probabilidade
I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de
Engenharia de Telecomunicações e Controle II.t.

Aos meus pais, Eloiza e Flávio, a quem sou grato pelo apoio incondicional e constante.

AGRADECIMENTOS

À professora Maria Miranda, responsável por grande parte do meu aprendizado formal, desenvolvimento profissional e também humano. Agradeço a dedicação, preocupação e seriedade com que me orientou desde a graduação. Sem suas contribuições, ideias e conselhos, este trabalho não teria se concretizado. Sou especialmente grato por sua generosidade constante ao compartilhar o conhecimento, pela inspiração que suas aulas me trouxeram e por todas as oportunidades de colaboração a mim oferecidas.

À Escola Politécnica da USP, onde tive o privilégio de realizar toda a minha formação superior, pela excelência no ensino público de engenharia. Devo muito aos professores que tive na Escola, que além de contribuírem para meu aprendizado, estimularam minha dedicação à vida acadêmica. Em particular, agradeço aos professores Guido Stolfi, Jacyntho Angerami, Luiz Monteiro, Miguel Ramírez e Phillip Burt, cujas aulas me marcaram positivamente; e aos professores André Kohn, Flávio Cipparrone, Magno Silva e Plínio Rodrigues, que me supervisionaram em estágios docentes, pelo exemplo de ensino e pela confiança. Agradeço também aos servidores técnico-administrativos da Escola, pela correção na prestação de informações; em especial, à Elisabete Melo pelo atendimento atencioso e à Léia Sicília pela disponibilização da sala para a defesa.

Aos professores Charles Cavalcante, Leonardo Duarte, Marcio Eisencraft e Romis Attux, membros da banca examinadora, pelas críticas e sugestões visando ao aprimoramento da tese e pelas ideias compartilhadas.

Aos meus pais, Eloiza e Flávio, cuja ajuda ao longo dos anos foi fundamental para que eu chegasse até aqui. Obrigado por estarem presentes e pela preocupação com minha realização profissional.

A todos os meus amigos, pela companhia e consideração. Em especial, agradeço aos amigos Dilma Alves, Estela Basso, Fabrício Puppi (*in memoriam*), Fábio Correia, Isadora Pouza, Luana de Abreu, Luís Gonçalves, Marília Taboada, Paula Garcia, Paulo de Andrade, Pedro Russo e Ricardo Souza. Também sou grato aos colegas de pós-graduação Diana Rincón, Lucas Massaroppe e Pedro Rodrigues, tanto pelas conversas técnicas quanto pelos momentos de descontração.

Finalmente, agradeço à CAPES pelo auxílio financeiro prestado para a realização deste trabalho.

RESUMO

Em diversos contextos práticos, surge a necessidade de recuperar individualmente sinais desconhecidos a partir apenas da observação de combinações desses sinais. Esse problema, denominado separação cega de fontes (BSS), passou a atrair considerável interesse da comunidade científica a partir da constatação empírica de que era possível resolvê-lo. Desde então, esforços foram feitos no sentido de formalizar, compreender e propor soluções consistentes para o problema de BSS. Historicamente, conceitos teóricos foram sendo paulatinamente revisitados e emprestados de áreas como estatística e matemática aplicada à medida que métodos de separação precisavam ser melhor compreendidos. Estatísticas de ordem superior — em especial cumulantes e suas representações matriciais — passaram a ser exitosamente empregadas em soluções de BSS com a proposição do conjunto de técnicas coletivamente conhecido como análise de componentes independentes (ICA). Lançando-se mão de valioso ferramental teórico, também puderam-se abordar questões acerca da separabilidade das fontes e da identificabilidade do sistema misturador. Apesar de ter havido uma evolução do sentido da compreensão dessas questões, esta tese permite comprovar que elas reservam interpretações e relações a serem ainda exploradas.

Nesta tese, segue-se um caminho alternativo àquele historicamente traçado na literatura de BSS. Primeiramente, trazem-se à tona e revisitam-se conceitos teóricos fundamentais. Apenas depois, trata-se do problema de separação e de suas soluções envolvendo métodos algébricos. Por meio de uma abordagem original unicamente baseada na estrutura algébrica de cumulantes, evidencia-se a relação entre a completude da representação matricial e as condições de identificabilidade na separação. Além disso, ao formular a diagonalização de matrizes de cumulantes como um problema de otimização, obtém-se uma conexão importante entre a validade do critério de separação e as questões de completude e identificabilidade. Essa interpretação, pouco comentada e destacada na literatura, reforça a consistência das contribuições da tese. O percurso seguido ao longo deste trabalho incentiva, sob diferentes aspectos, a sua continuidade.

Palavras-chave: Independência estatística. Separabilidade de fontes. Estatísticas de ordem superior. Matrizes de cumulantes. Métodos algébricos em separação cega de fontes. Condições de identificabilidade.

ABSTRACT

In several practical situations, one may come across the need to individually recover unobserved signals solely on the basis of the observation of their combinations. This problem, known as blind source separation (BSS), began to attract considerable interest from the scientific community when it was empirically shown that its solution was possible. Since then, efforts have been made in order to formalize, comprehend and propose consistent solutions to the BSS problem. Historically, theoretical concepts were progressively revisited and borrowed from areas such as statistics and applied mathematics as a better understanding of separation methods became necessary. Higher-order statistics—especially cumulants and their matrix representations—started to be successfully employed in BSS solutions with the proposal of the set of techniques collectively known as independent component analysis (ICA). By making use of valuable mathematical tools, issues such as source separability and mixing system identifiability could be addressed. In spite of the progress made in comprehending these matters, this thesis provides evidence to the fact that they have yet to be further interpreted, and their relations better understood.

In this thesis, an alternative to the path historically followed in the BSS literature is taken. First, fundamental theoretical concepts are brought to light and revisited. Only afterwards are the separation problem and its solutions involving algebraic methods presented and addressed. By means of an original approach uniquely based on the algebraic structure of cumulants, the relations between completeness of the matrix representation and identifiability in separation are highlighted. In addition, by formulating the diagonalization of cumulant matrices as an optimization problem, an important connection between the validity of the separation criterion and the issues of completeness and identifiability is obtained. This interpretation, to which little reference is made in the literature, supports the consistency of the contributions of this thesis. The path followed throughout this work encourages its continuation in many respects.

Keywords: Statistical independence. Source separability. Higher-order statistics. Cumulant matrices. Algebraic methods in blind source separation. Identifiability conditions.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Disposição dos elementos do tensor de cumulantes de ordem três $\mathcal{C}_{\mathbf{a},3}$ para $N = 2$	67
Figura 2 – Projeção da disposição dos elementos do tensor de cumulantes de ordem quatro $\mathcal{C}_{\mathbf{a},4}$, para $N = 2$, no espaço tridimensional.	76
Figura 3 – Esquema simplificado do caminho percorrido na Seção 3.4 para a obtenção de uma representação matricial para cumulantes de ordem quatro.	87
Figura 4 – Esquema simplificado dos principais elementos envolvidos no problema de separação cega de fontes, em que se deseja separar N_y fontes a partir apenas da observação de N_x misturas.	90
Figura 5 – Esquema simplificado dos principais elementos envolvidos no problema de separação cega de fontes para o modelo de sistema misturador linear e instantâneo com fontes iid.	97
Figura 6 – Esquema simplificado dos principais elementos envolvidos no problema de separação cega de fontes para o modelo de sistema misturador linear e instantâneo, com duas fontes iid e mutuamente independentes no espaço.	111
Figura 7 – Esquema simplificado dos principais elementos envolvidos no problema de BSS igualmente determinado, com sistema misturador linear e instantâneo, fontes iid e independentes no espaço.	117
Figura 8 – Esquema simplificado da etapa de branqueamento das misturas no pré-processamento.	118
Figura 9 – Esquema simplificado da relação entre misturas branqueadas e fontes independentes normalizadas.	120
Figura 10 – (a) Esquema simplificado da relação entre fontes estimadas e fontes independentes normalizadas na separação cega de fontes, (b) esquema simplificado equivalente com sistema separador ortogonal.	121
Figura 11 – Diagramas de dispersão de observações das fontes independentes, misturas e misturas branqueadas para $N = 2$ e (a) fontes com distribuição uniforme, (b) fontes com distribuições distintas e (c) fontes conjuntamente gaussianas.	123
Figura 12 – i. Observações ao longo do tempo e ii. diagramas de dispersão de (a) fontes discretas de mesma distribuição, (b) misturas e (c) misturas branqueadas.	128
Figura 13 – i. Observações ao longo do tempo e ii. diagramas de dispersão das fontes e fontes estimadas obtidas a partir da diagonalização das matrizes (a) $\mathbf{Q}_{\mathbf{x}}(\mathbf{V}_a)$ e (b) $\mathbf{Q}_{\mathbf{x}}(\mathbf{V}_b)$	129
Figura 14 – i. Observações ao longo do tempo e ii. diagramas de dispersão com 10^3 observações de (a) fontes contínuas com autocumulantes de ordem quatro distintos, (b) misturas e (c) misturas branqueadas.	130

Figura 15 – i. Observações ao longo do tempo e ii. diagramas de dispersão das fontes e fontes estimadas obtidas a partir da diagonalização das matrizes (a) $\mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a)$ e (b) $\mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_b)$	130
Figura 16 – Diferença entre os autovalores da matriz de quadricovariância para diferentes matrizes de pesos com fontes independentes tais que (a) $\mathcal{C}_{\hat{s}_1,4} = \mathcal{C}_{\hat{s}_2,4} = -2$ e (b) $\mathcal{C}_{\hat{s}_1,4} = 1,2$ e $\mathcal{C}_{\hat{s}_2,4} = 3$	134
Figura 17 – Esquema resumido dos espaços vetoriais associados ao operador de quadricovariância; (a) $\mathcal{C}_{\hat{s}_i,4} \neq 0$ para todas as fontes e (b) $\mathcal{C}_{\hat{s}_i,4} = 0$ apenas para a i -ésima fonte.	137
Figura 18 – Esquema resumido dos espaços vetoriais considerados na Proposição 6.7.	139
Figura 19 – Diferença entre os autovalores da matriz de quadricovariância para escolha alternativa de matrizes de pesos com fontes independentes tais que (a) $\mathcal{C}_{\hat{s}_1,4} = \mathcal{C}_{\hat{s}_2,4} = -2$ e (b) $\mathcal{C}_{\hat{s}_1,4} = 1,2$ e $\mathcal{C}_{\hat{s}_2,4} = 3$	143
Figura 20 – Duas fontes independentes, ambas com distribuição arco seno: (a) Curvas de ϕ_1^o , ϕ_2^o , ϕ_3^o e ϕ_4^o , (b)–(f) diagramas de dispersão da saída do sistema separador para diferentes ângulos de rotação e 1000 realizações independentes.	154
Figura 21 – Duas fontes independentes, uma com distribuição arco seno e a outra com distribuição gaussiana: (a) Curvas de ϕ_1^o , ϕ_2^o , ϕ_3^o e ϕ_4^o , (b)–(f) diagramas de dispersão da saída do sistema separador para diferentes ângulos de rotação e 1000 realizações independentes.	155
Figura 22 – Duas fontes independentes e conjuntamente gaussianas: (a) Curvas de ϕ_1^o , ϕ_2^o , ϕ_3^o e ϕ_4^o , (b)–(f) diagramas de dispersão da saída do sistema separador para diferentes ângulos de rotação e 1000 realizações independentes.	155
Figura 23 – Esquemas simplificados de (a) modelo exato de mistura e (b) modelo hipotético de mistura.	157
Figura 24 – Esquema simplificado da aplicação de uma não linearidade à saída do sistema separador para a descrição do critério infomax.	162
Figura 25 – Relações entre contrastes entrópicos baseados em independência e suas expressões; H, K, I e J denotam, respectivamente, a entropia diferencial, a divergência K-L, a informação mútua e a negentropia, cujas definições são apresentadas na Seção 2.2.	169
Figura 26 – Relações entre contrastes entrópicos baseados em independência e suas versões aproximadas com cumulantes; K, I e J denotam, respectivamente, a divergência K-L, a informação mútua e a negentropia, cujas definições são apresentadas na Seção 2.2.	177

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Resumo da notação utilizada nos modelos abordados para sistemas misturadores e fontes.	99
Tabela 2 – Passos principais do método de Jacobi por rotações internas para uma matriz simétrica 2×2	240
Tabela 3 – Passos principais do método de Jacobi por rotações internas e cíclico por linhas para uma matriz simétrica $N \times N$	243
Tabela 4 – Passos principais do método de Jacobi estendido por rotações internas e cíclico por linhas para $L = 2$ matrizes simétricas $N \times N$	251
Tabela 5 – Passos principais do método de Jacobi estendido por rotações internas e cíclico por linhas para $L > 1$ matrizes simétricas $N \times N$	252

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AJD	<i>Approximate joint diagonalization</i> (diagonalização conjunta aproximada)
BSS	<i>Blind Source Separation</i> (separação cega de fontes)
FOBI	<i>Fourth-order blind identification</i> (identificação cega de quarta ordem)
ICA	<i>Independent component analysis</i> (análise de componentes independentes)
iid	Independente e identicamente distribuído
JADE	<i>Joint approximate diagonalization of eigenmatrices</i> (diagonalização conjunta aproximada de automatrizes)
MIMO	<i>Multiple-input and multiple-output</i> (múltiplas entradas e múltiplas saídas)
PCA	<i>Principal component analysis</i> (análise de componentes principais)
SISO	<i>Single-input and single-output</i> (uma entrada e uma saída)
SVD	<i>Singular value decomposition</i> (decomposição em valores singulares)

LISTA DE SÍMBOLOS GERAIS

\emptyset	conjunto vazio
\setminus	complemento relativo
\mathbb{Z}	conjunto dos números inteiros
\mathbb{R}	conjunto dos números reais
\mathbb{C}	conjunto dos números complexos
\mathbb{R}^N	conjunto dos vetores com N elementos reais
$\mathbb{R}^{N_1 \times N_2}$	conjunto das matrizes $N_1 \times N_2$ com elementos reais
$\mathbb{R}^{N_1 \times N_2 \times \dots \times N_M}$	conjunto dos tensores $N_1 \times N_2 \times \dots \times N_M$ com elementos reais
$\mathbf{0}_N$	vetor nulo com N elementos
$\mathbf{0}_{N_1 \times N_2}$	matriz $N_1 \times N_2$ com elementos nulos
\mathbf{I}_N	matriz identidade $N \times N$
\mathbf{A}	matriz diagonal
\mathbf{P}	matriz de permutação
$\mathbf{\Theta}$	matriz ortogonal
$(\cdot)^*$	conjugado de número complexo
exp	exponencial
log	logaritmo em base real maior do que um
ln	logaritmo natural
grau	grau de um polinômio
$(\cdot)^\top$	transposto de um vetor ou matriz
$[\cdot]_{i_1, i_2, \dots, i_M}$	elemento da posição (i_1, i_2, \dots, i_M) de uma grandeza vetorial
:	indicador de índice livre de uma grandeza vetorial
\circ	produto externo de vetores
\otimes	produto de Kronecker de matrizes
\odot	produto de Khatri–Rao de matrizes
diag(\cdot)	matriz diagonal com elementos (\cdot) na ordem dada
tr	traço de uma matriz
det	determinante de uma matriz
$[\![\cdot]\!]$	subespaço vetorial gerado por (\cdot)
$\ \cdot\ _F$	norma de Frobenius de uma matriz

off	soma dos quadrados dos elementos fora da diagonal principal de uma matriz
ddiag	soma dos quadrados dos elementos da diagonal principal de uma matriz
$\Pr\{\cdot\}$	probabilidade do evento $\{\cdot\}$
F	função distribuição de probabilidade
\sim	distribuído conforme
$\mathcal{U}(a, b)$	distribuição uniforme no intervalo (a, b)
$\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$	distribuição gaussiana com média μ e variância σ^2
g	índice sinalizador de grandeza aleatória gaussiana
Φ	função característica
Ψ	função log-característica
E, \mathcal{E}	esperança matemática ou momento
var	variância
cov	covariância
cum, \mathcal{C}	cumulante
\mathcal{S}	suporte de uma função densidade de probabilidade
H	entropia diferencial
K	divergência de Kullback–Leibler (<i>i.e.</i> , divergência K-L)
I	informação mútua
J	negentropia
ϕ	função contraste
\mathcal{L}	função de verossimilhança

SOBRE A NOTAÇÃO DA TESE

Nesta tese, optou-se por escolher uma notação que enfatize a diferença entre grandezas escalares, vetoriais, aleatórias e não aleatórias, bem como a diferença entre grandezas aleatórias e realizações dessas grandezas. Distinções similares a essas são usuais em livros didáticos de teoria das probabilidades como, por exemplo, Feller (1968–1971), Breiman (1992), Papoulis e Pillai (2002). Acredita-se que a compreensão dos princípios teóricos do problema de separação de fontes e das soluções para esse problema sejam consideravelmente facilitados com a adoção dessa notação. A seguir, os principais elementos da notação são apenas introduzidos; quando necessário, definições para explicitar seus significados são apresentadas no decorrer da tese.

Escalares são representados em fonte itálica, tanto em letras maiúsculas quanto minúsculas; por exemplo, $a \in \mathbb{R}$ ou $A \in \mathbb{R}$. Grandezas vetoriais são representadas em ambos itálico e negrito. Dessas grandezas, faz-se distinção entre vetores (de coordenadas), matrizes e tensores de ordem $M > 2$, respectivamente com um, dois ou M índices livres para representar seus elementos. Vetores, matrizes e tensores são representados em letra minúscula, maiúscula e fonte caligráfica conforme $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^N$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N_1 \times N_2}$ e $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{N_1 \times N_2 \times \dots \times N_M}$, respectivamente. Como regra geral, os vetores são dispostos como colunas.

Grandezas aleatórias são representadas em fonte itálica sublinhada. Nesta tese, são consideradas apenas grandezas aleatórias reais. Dessas grandezas, faz-se distinção entre variáveis aleatórias, vetores aleatórios, processos estocásticos escalares e processos estocásticos vetoriais, denotados respectivamente por \underline{a} , $\underline{\mathbf{a}}$, $\{\underline{a}(n)\}$ e $\{\underline{\mathbf{a}}(n)\}$. Neste trabalho, somente consideram-se processos aleatórios de tempo discreto — portanto, com $n \in \mathbb{Z}$. Quando a variável temporal de um processo estocástico é fixada, ele se reduz a uma variável ou vetor aleatório (PAPOULIS; PILLAI, 2002). Por exemplo, se o processo escalar $\{\underline{a}(n)\}$ for tomado em um inteiro qualquer $n = n_0$, obtém-se a variável aleatória $\underline{a}(n_0)$. Utilizam-se chaves na representação de um processo estocástico a fim de diferenciá-lo da variável aleatória obtida quando tomado para um instante de tempo fixo; *e.g.*, $\{\underline{\mathbf{a}}(n)\}$ denota um processo estocástico vetorial e $\underline{\mathbf{a}}(n)$ denota o vetor aleatório obtido ao tomar o processo em um instante fixo n .

As realizações ou sorteios de uma grandeza aleatória são representados sem o sublinhado e, eventualmente, indexados com números sobrescritos entre parênteses. Por serem não aleatórias, *i.e.*, deterministas, as realizações de uma grandeza aleatória não são sublinhadas (FELLER, 1968–1971; BREIMAN, 1992). Por exemplo, sorteios distintos da variável aleatória \underline{a} correspondem a escalares que podem ser denotados por $a^{(0)}$ e $a^{(1)}$, e sorteios distintos do vetor aleatório $\underline{\mathbf{a}}$ correspondem a vetores que podem ser denotados por $\mathbf{a}^{(0)}$ e $\mathbf{a}^{(1)}$. No caso de processos estocásticos, sorteios distintos do processo escalar $\{\underline{a}(n)\}$ podem ser denotados por $\{a^{(0)}(n)\}$ e $\{a^{(1)}(n)\}$ e correspondem a funções escalares do tempo, enquanto sorteios distintos do processo vetorial $\{\underline{\mathbf{a}}(n)\}$ podem ser denotados por

$\{\mathbf{a}^{(0)}(n)\}$ e $\{\mathbf{a}^{(1)}(n)\}$ e correspondem a funções vetoriais do tempo. Recorda-se que uma realização de um processo estocástico é uma função não aleatória do tempo (PAPOULIS; PILLAI, 2002). A notação adotada permite explicitar esse fato adequadamente.

Por fim, funções que dependem de distribuições de probabilidade de grandezas aleatórias são sinalizadas escrevendo-se seus argumentos aleatórios entre colchetes. Como exemplos dessas funções, destacam-se a esperança matemática e o cumulante de uma variável aleatória \underline{a} , denotados respectivamente por $E[\underline{a}]$ e $\text{cum}[\underline{a}]$. Além disso, medidas entrópicas de informação também podem ser denotadas dessa forma. É o caso, por exemplo, da entropia diferencial de \underline{a} — representada como $H[\underline{a}]$. Quando for necessário explicitar a dependência dessas funções em relação à distribuição da variável aleatória considerada, utilizam-se parênteses. Por exemplo, a entropia diferencial de \underline{a} pode ser equivalentemente representada como $H(f_{\underline{a}})$, em que $f_{\underline{a}}$ denota a função densidade de probabilidade de \underline{a} .

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	27
1.1	Motivação e justificativa	27
1.2	Objetivos	29
1.3	Contribuições	30
1.4	Publicações	31
1.5	Estrutura da tese	32
2	INDEPENDÊNCIA ESTATÍSTICA E SEUS QUANTIFICADORES	37
2.1	Independência e definições associadas	37
2.1.1	Independência para variáveis aleatórias.....	37
2.1.2	Independência para vetores aleatórios	40
2.1.3	Independência temporal para processos estocásticos	41
2.2	Medidas entrópicas de informação	44
2.3	Cumulantes	48
2.4	Independência e gaussianidade	52
2.5	Conclusões	55
3	ABORDAGEM TENSORIAL PARA REPRESENTAÇÃO DE CUMULANTES	57
3.1	Considerações preliminares sobre tensores	57
3.1.1	Produto externo estendido.....	58
3.1.2	Propriedade da multilinearidade.....	59
3.2	Representações para cumulantes de ordem dois	60
3.2.1	Matriz de covariância	60
3.2.2	Funcional linear de ordem dois	62
3.2.3	Mudança de base e diagonalização em ordem dois	64
3.3	Representações para cumulantes de ordem três	66
3.3.1	Representação tensorial em ordem três	66
3.3.2	Funcional linear de ordem três	68
3.3.3	Matriz de tricovariância.....	69
3.3.4	Diagonalização do tensor de cumulantes de ordem três.....	71
3.4	Representações para cumulantes de ordem quatro	74
3.4.1	Representação tensorial em ordem quatro	75
3.4.2	Funcional linear em ordem quatro	77
3.4.3	Matriz de quadricovariância	78
3.4.4	Generalização do operador de quadricovariância.....	79
3.4.5	Completude da representação matricial em ordem quatro e propriedades	81
3.4.6	Diagonalização do tensor de cumulantes de ordem quatro.....	84

3.5	Conclusões	85
4	FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DE SEPARAÇÃO DE FONTES	89
4.1	Formulação geral do problema	89
4.2	Misturas lineares e instantâneas	91
4.3	Modelo estocástico para as fontes	94
4.3.1	Fontes independentes e identicamente distribuídas no tempo	95
4.3.2	Fontes mutuamente independentes no espaço	98
4.4	Considerações sobre os modelos estocásticos de mistura	99
4.5	Conclusões	100
5	SEPARABILIDADE E O TEOREMA DE DARMOIS–SKITOVICH	103
5.1	Teoremas preliminares	103
5.2	Teorema de Darmois–Skitovich	107
5.3	Teorema de separabilidade das fontes	113
5.4	Conclusões	115
6	SEPARAÇÃO DE FONTES E A MATRIZ DE QUADRICOVARIÂNCIA	117
6.1	Pré-processamento	117
6.2	Efeito do pré-processamento na separação	120
6.3	Branqueamento e separabilidade	122
6.4	Separação cega baseada em cumulantes de ordem quatro	124
6.5	Identificabilidade da matriz ortogonal de mistura	126
6.6	Completude da representação matricial no contexto de separação	131
6.6.1	Ampliando as condições de identificabilidade	132
6.6.2	Espaços vetoriais associados ao operador de quadricovariância	135
6.6.3	Representações completas alternativas	138
6.7	Conclusões	143
7	CRITÉRIOS DE SEPARAÇÃO BASEADOS EM INDEPENDÊNCIA	147
7.1	Definições de contrastes baseados em independência	147
7.1.1	Definições preliminares	148
7.1.2	Contrastes ortogonais	151
7.1.3	Contrastes não simétricos	152
7.1.4	Exemplos simples de contrastes	153
7.2	Contrastes entrópicos	156
7.2.1	Máxima verossimilhança	156
7.2.2	Maximização de entropia diferencial (infomax)	162
7.2.3	Máxima informação mútua	164
7.2.4	Máxima negentropia e mínima entropia marginal	166

7.2.5	Relações entre os contrastes entrópicos	169
7.3	Contrastes aproximados	171
7.3.1	Expansão de Edgeworth	171
7.3.2	Aproximações baseadas em cumulantes.....	173
7.4	Contrastes ortogonais de diagonalização	177
7.4.1	Diagonalização da matriz de quadricovariância via otimização.....	177
7.4.2	Remetendo o problema às fontes estimadas.....	179
7.4.3	Contrastes de diagonalização simples.....	180
7.4.4	Contrastes para o FOBI.....	181
7.4.5	Contrastes de diagonalização simultânea	184
7.4.6	Contraste para o JADE	185
7.5	Conclusões	188
8	CONCLUSÃO	191
8.1	Conclusões e contribuições	191
8.2	Perspectivas de trabalhos futuros	195
	REFERÊNCIAS	199
	APÊNDICE A – DEMONSTRAÇÕES.....	207
A.1	Demonstrações do Capítulo 2	207
A.2	Demonstrações do Capítulo 3	209
A.3	Demonstrações do Capítulo 6	210
A.4	Demonstrações do Capítulo 7	215
	APÊNDICE B – ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS.....	219
B.1	Componentes principais: caso exato	220
B.1.1	Definição de componentes principais.....	220
B.1.2	Decomposição em autovalores e autovetores da matriz de covariância.....	221
B.2	Componentes principais: caso amostral	225
B.2.1	Definição de componentes principais amostrais	225
B.2.2	Decomposição em autovalores e autovetores da matriz de covariância estimada	227
B.2.3	Decomposição em valores singulares da matriz de dados.....	229
B.2.4	Relação com aproximações de posto inferior.....	233
B.3	Relações com outras técnicas de decomposição de variáveis aleatórias.....	234
	APÊNDICE C – MÉTODOS NUMÉRICOS DE DIAGONALIZAÇÃO.....	237
C.1	Método de Jacobi clássico	237
C.1.1	Caso 2×2	237
C.1.2	Caso $N \times N$	241

C.2 Método de Jacobi estendido	242
C.2.1 Diagonalização simultânea de matrizes	243
C.2.2 Caso $L = 2$	246
C.2.3 Caso L qualquer.....	250

1 INTRODUÇÃO

Na Seção 1.1, apresentam-se a motivação e a justificativa deste trabalho. Na Seção 1.2, abordam-se os objetivos da tese e, na Seção 1.3, suas contribuições. Na Seção 1.4, listam-se as publicações feitas durante o período do Doutorado. Na Seção 1.5, introduz-se a estrutura da tese com comentários sobre cada capítulo.

1.1 Motivação e justificativa

Técnicas de processamento estatístico de sinais têm um papel relevante em diversas áreas do conhecimento como, por exemplo, engenharia, estatística e ciência da computação. Parte dessas técnicas é baseada em estatísticas de ordem dois, as quais permitem quantificar e identificar a existência de relações lineares entre variáveis aleatórias. Essas estatísticas possuem um papel central em problemas como regressão linear, filtragem de Wiener, filtragem adaptativa e estimação espectral (PICINBONO, 1993; HAYKIN, 2014).

Em problemas multivariados, estatísticas de ordem dois são comumente representadas por meio de uma matriz de covariância. A decomposição em autovalores e autovetores dessa matriz permite encontrar uma transformação linear que torna variáveis aleatórias não correlacionadas (PICINBONO, 1993). Dependendo do modelo estatístico considerado para os sinais envolvidos em cada problema, diferentes aplicações podem decorrer da diagonalização da matriz de covariância. Alguns exemplos são identificação de senoides em ruído pelo método de Pisarenko, e compressão de sinais e redução de dimensionalidade pela análise de componentes principais (PCA, do inglês *principal component analysis*) (JOLLIFFE; CADIMA, 2016; ZHANG, 2017) ou métodos similares (AHMED; RAO, 1975; GERBRANDS, 1981).

Abordagens baseadas em estatísticas de ordem dois, porém, nem sempre são suficientes. Isso ocorre, por exemplo, em problemas cuja resolução envolve quantificar a correlação de variáveis aleatórias em ordens superiores e, eventualmente, sua independência estatística (BRILLINGER, 1991; MENDEL, 1991). Nesse caso, faz-se necessário o emprego de estatísticas de ordem superior a dois, comumente descritas por meio de parâmetros conhecidos como cumulantes (MCCULLAGH, 2018; PICINBONO, 1993; LACOUME; AMBLARD; COMON, 1997).

Em virtude de suas inúmeras aplicações, estatísticas de ordem superior são objeto de estudo em áreas como matemática aplicada, estatística e processamento estatístico de sinais (OULD-BABA; ROBIN; ANTONI, 2015; MIETTINEN et al., 2015; GOUÉDARD; LOUBATON, 2017; DOMINO; GAWRON; PAWELA, 2018). Particularmente, o uso implícito ou explícito dessas estatísticas tem atraído interesse em aprendizado de máquina, principalmente para extração de características de dados (LEE; LEWICKI; SEJNOWSKI, 2000; CAO et al., 2003; SUBASI; GURSOY, 2010; HYVÄRINEN, 2013;

MARTÍN-CLEMENTE; ZARZOSO, 2017; LOW; TEOH; NG, 2019). Além disso, é inegável a relevância de estatísticas de ordem superior na abordagem do problema conhecido como separação cega de fontes (BSS, do inglês *blind source separation*), desde suas origens (HÉRAULT; JUTTEN; ANS, 1985; COMON, 1994; DE LATHAUWER, 1997; CARDOSO, 1999) até os dias atuais (MIETTINEN et al., 2015; VIRTÁ et al., 2018).

Basicamente, o problema de BSS consiste na recuperação individual de sinais desconhecidos a partir apenas da observação de combinações desses sinais (CARDOSO, 1998; HYVÄRINEN; OJA, 2000; CAVALCANTE, 2004). Trata-se de um problema que surge em diversos contextos práticos, e cuja solução, durante muitos anos, foi dada como impossível (COMON; JUTTEN, 2010). A possibilidade de resolver esse problema foi comprovada pela primeira vez no celebrado trabalho de Hérault, Jutten e Ans (1985), que consistiu na proposição de um método de separação baseado em estruturas não lineares. Esse trabalho motivou a comunidade científica a investigar limitações teóricas e condições de funcionamento dos métodos e princípios de separação conhecidos até então (COMON; JUTTEN, 2010). A partir do final da década de 1980, com base na adoção de modelos estatísticos para as misturas dos sinais não observados — *i.e.*, fontes —, diferentes soluções para o problema de BSS passaram a ser propostas (COMON, 1992; CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; BELL; SEJNOWSKI, 1995). Desde então, o interesse por esse problema passou a crescer devido à generalidade de sua formulação e à ampla aplicabilidade de suas soluções (CARDOSO, 1998; HYVÄRINEN; OJA, 2000).

No início dos anos 1990, P. Comon abordou teoricamente a questão da separabilidade das fontes ao introduzir um conjunto de técnicas de BSS, para misturas lineares e instantâneas, coletivamente conhecido como análise de componentes independentes (ICA, do inglês *independent component analysis*) (COMON, 1992; COMON, 1994). Essencialmente, essas técnicas são baseadas na recuperação da independência das fontes a partir do uso implícito ou explícito de estatísticas de ordem superior. A independência é usualmente quantificada a partir de funções objetivo denominadas contrastes, as quais são otimizadas a fim de obter a separação adequada das fontes.

Ao mesmo tempo, J.-F. Cardoso propôs uma abordagem de separação baseada em representações matriciais de cumulantes de ordem superior, também no contexto de ICA (CARDOSO, 1989; CARDOSO, 1990; CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). Essa abordagem, eminentemente algébrica, remetia às técnicas de PCA — mas, agora, generalizadas para estatísticas de ordem superior. A recuperação da independência era feita a partir da diagonalização de matrizes de cumulantes de ordem quatro, denominadas matrizes de quadricovariância. As técnicas de separação decorrentes dessa abordagem passaram a ser conhecidas, na literatura de BSS, como métodos baseados em propriedades algébricas de cumulantes, ou apenas métodos algébricos (CARDOSO, 1999). O interesse no estudo desses métodos cresceu ao longo dos anos (DE LATHAUWER, 1997; VAN EEGHEM; SØRENSEN; DE LATHAUWER, 2017; VAN EEGHEM et al., 2018), principalmente por

não necessitem de escolhas arbitrárias de funções não lineares ou critérios heurísticos para realizar a separação. A compreensão aprofundada dos métodos algébricos, no entanto, requer o domínio de conceitos teóricos de áreas do conhecimento relativamente sofisticadas como, por exemplo, álgebra multilinear, álgebra tensorial e métodos tensoriais em estatística (MCCULLAGH, 2018; LANDSBERG, 2012).

O êxito de BSS como área de pesquisa se deve, em grande parte, aos esforços para o desenvolvimento de uma compreensão teórica acerca do problema de separação e de suas soluções (COMON, 1994; CARDOSO, 1999). Ao longo de décadas, conceitos teóricos de áreas como estatística e matemática aplicada foram sendo paulatinamente revisitados e emprestados a fim de responder às importantes questões de como, por que e sob quais condições as técnicas de separação funcionam (COMON; JUTTEN, 2010). Com base nessa compreensão teórica, puderam-se abordar problemas de separação mais sofisticados e que continuam atraindo interesse científico até a atualidade (LI et al., 2014; VINCENT et al., 2014; RIVET et al., 2014). Apesar de ter havido uma evolução no sentido dessa compreensão, ainda há muito a ser feito em termos de interpretações e relações visando ao aprimoramento das técnicas existentes e à proposição de novas soluções. Nesta tese, segue-se um caminho alternativo àquele historicamente traçado na literatura de BSS. Primeiramente, trazem-se à tona e revisitam-se conceitos teóricos fundamentais. Apenas depois, trata-se do problema de separação e de suas soluções baseadas em métodos algébricos. Com isso, vislumbram-se a interpretação e o entendimento consistentes dos princípios de funcionamento dos métodos de separação.

1.2 **Objetivos**

O objetivo deste trabalho é abordar, revisar e interpretar duas questões teóricas fundamentais ao problema de separação cega de fontes: a separabilidade das fontes e a identificabilidade do sistema misturador. Essas questões são revisitadas por meio de uma abordagem própria, relacionando conceitos e apresentando exemplos a fim de obter novas interpretações e explicitar relações que ainda precisam ser melhor compreendidas.

Desde o final da década de 1980, quando o problema de BSS foi inicialmente proposto para o modelo de mistura linear e instantânea, problemas de separação cada vez mais sofisticados e complexos passaram a ser abordados na literatura (YELLIN; WEINSTEIN, 1994; NGUYEN THI; JUTTEN, 1995; BABAIE-ZADEH, 2002; VIELVA et al., 2002; COMON; RAJIH, 2006; LI et al., 2014; EWERT et al., 2014). Muitas das questões teóricas relativas a esses problemas, no entanto, estão relacionadas às questões de separabilidade e identificabilidade consideradas inicialmente para o modelo clássico de sistema misturador (COMON, 1994). Isso justifica a relevância da consideração desse modelo no estudo dos princípios teóricos de funcionamento dos métodos de separação.

Particularmente, a *separabilidade das fontes* é um conceito amplo relativo às condições

que um modelo de mistura deve satisfazer para que seja possível garantir a separação cega das fontes (COMON, 1994; ERIKSSON; KOIVUNEN, 2004). O estabelecimento das condições de separabilidade em ICA foi extremamente relevante à proposição de soluções em BSS e à compreensão de seus limites de funcionamento (COMON, 1994). Com base nas condições de separabilidade para o modelo clássico de mistura, extensões puderam ser obtidas para modelos mais elaborados (TALEB; JUTTEN, 1999; ERIKSSON; KOIVUNEN, 2006; GUTCH; THEIS, 2012). Neste trabalho, revisitam-se as condições de separabilidade para o modelo clássico de mistura considerado por Comon (1994) no contexto de análise de componentes independentes.

Por sua vez, a *identificabilidade do sistema misturador* é um conceito relacionado ao método de separação utilizado e às suas limitações na obtenção cega dos coeficientes do sistema misturador (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; ERIKSSON; KOIVUNEN, 2004). Neste trabalho, enfoque é dado a métodos algébricos de separação por imposição de independência baseados em cumulantes (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; LACOUME; AMBLARD; COMON, 1997; CARDOSO, 1999). Para tanto, os métodos algébricos de separação são revisitados a fim de auxiliar a sua compreensão, ressaltar sua importância e consistência teórica, e propor novas interpretações sob um ponto de vista original.

1.3 Contribuições

A seguir, são elencadas as contribuições desta tese:

- ◇ *Abordagem dos conceitos relacionados à independência estatística e a seus quantificadores, fundamentais à compreensão do problema de separação cega de fontes por imposição de independência.* Os conceitos são apresentados, comentados e exemplificados, explicitando-se sua consistência teórica. Por um lado, as interpretações e relações destacadas ao longo da tese sustentam teoricamente a compreensão do problema clássico de BSS baseado em imposição de independência. Por outro, elas ensinam a aplicação dos conceitos teóricos abordados a outros tipos de problemas de estimação cega e, até mesmo, a problemas mais gerais de processamento estatístico de sinais.
- ◇ *Abordagem teórica de cumulantes e de suas representações tensoriais e matriciais, de maneira geral e sem restringi-los a uma aplicação específica.* Destaca-se que a representação tensorial é extremamente útil à compreensão de propriedades algébricas de cumulantes, bem como à obtenção de representações simplificadas consistentes e convenientes do ponto de vista prático. Trata-se de um assunto que envolve conceitos avançados de álgebra multilinear e estatística, mas que é abordado na tese partindo-se de conceitos clássicos e exemplos simples.

- ◇ *Interpretação do teorema de separabilidade das fontes com base no teorema de Darmois–Skitovich aplicado ao contexto de separação por imposição de independência.* A compreensão do teorema de separabilidade das fontes envolve conceitos teóricos relativamente avançados, que são revisitados e interpretados na tese por meio de exemplos simples.
- ◇ *Abordagem de métodos de separação cega de fontes baseados em propriedades algébricas de cumulantes e suas representações matriciais.* Embora se trate de um assunto já abordado na literatura de BSS, ele ainda possui questões teóricas em aberto e interpretações a serem feitas. Os conceitos teóricos necessários à compreensão dos métodos algébricos de separação podem parecer complicados e pouco acessíveis, o que pode desencorajar a sua utilização. Acredita-se que a abordagem adotada na tese, focada na exposição clara de conceitos fundamentais e de suas relações, facilite a aplicação desses métodos a problemas de estimação cega que eventualmente ainda não tenham sido tratados dessa forma.
- ◇ *Interpretação dos métodos algébricos de separação, revisitados do ponto de vista algébrico e relacionados a abordagens de separação por otimização de critérios baseados em independência.* Evidencia-se a relação que existe entre a completude da representação matricial utilizada nos métodos algébricos, as condições de identificabilidade do sistema misturador e as condições de validade de critérios de otimização. Ressalta-se que as condições de identificabilidade podem ser obtidas verificando-se a validade de funções objetivo equivalentes aos métodos algébricos. Porém, mostra-se neste trabalho que esse não é o único caminho para obter essas condições.

1.4 Publicações

A seguir, são listadas em ordem cronológica as publicações feitas no período do Doutorado. As publicações (ii) e (v), redigidas e submetidas durante o Doutorado, decorrem da dissertação de Mestrado do autor (PAVAN, 2016). Em particular, nessa dissertação foram propostas e analisadas soluções numericamente robustas e de tempo real para o problema de desconvolução cega multiusuário. Como esse problema pode ser compreendido como um caso particular de separação cega de fontes (COMON; JUTTEN, 2010), as publicações decorrentes do Mestrado estão relacionadas ao conteúdo da tese de maneira implícita. Por sua vez, as publicações (i), (iii) e (iv) correspondem a resultados preliminares relacionados ao conteúdo da tese de maneira explícita.

- (i) PAVAN, F. R. M.; MIRANDA, M. D. O teorema de Darmois–Skitovich e a separação cega de fontes. In: SIMPÓSIO DE INSTRUMENTAÇÃO E IMAGENS MÉDICAS, 8.; SIMPÓSIO DE PROCESSAMENTO DE SINAIS, 7., 2017, São Bernardo do Campo. *Anais [...]*. Santo André: UFABC, 2017. p. 1–4.

- (ii) PAVAN, F. R. M.; SILVA, M. T. M.; MIRANDA, M. D. A numerically robust blind equalization scheme applied to MIMO communication systems. *Journal of the Franklin Institute*, v. 355, n. 1, p. 596–624, 2018.
- (iii) PAVAN, F. R. M.; MIRANDA, M. D. On the Darmois–Skitovich theorem and spatial independence in blind source separation. *Journal of Communication and Information Systems*, v. 33, n. 1, p. 146–157, 2018.
- (iv) PAVAN, F. R. M.; MIRANDA, M. D. Sobre a matriz de quadricovariância: definição, propriedades e aplicação. In: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE TELECOMUNICAÇÕES E PROCESSAMENTO DE SINAIS, 37., 2019, Petrópolis. *Anais [...]*. Rio de Janeiro: SBrT, 2019. p. 1–5.
- (v) PAVAN, F. R. M.; SILVA, M. T. M.; MIRANDA, M. D. Performance analysis of the multiuser Shalvi–Weinstein algorithm. *Signal Processing*, v. 163, p. 153–165, 2019.

1.5 Estrutura da tese

Este trabalho é constituído por oito capítulos e três apêndices, cujos conteúdos são resumidos a seguir:

◇ **Capítulo 2: Independência estatística e seus quantificadores.**

Nesse capítulo, apresenta-se um material introdutório com conceitos teóricos fundamentais necessários à formulação de inúmeros problemas de processamento estatístico de sinais, dentre os quais se destaca a separação cega de fontes. Especificamente, abordam-se conceitos relacionados à independência estatística e ferramentas matemáticas úteis para quantificá-la. Embora amplamente utilizados e discutidos na literatura de teoria das probabilidades e teoria da informação, esses conceitos são organizados, relacionados e exemplificados com o intuito de embasar teoricamente o conteúdo dos capítulos subsequentes.

◇ **Capítulo 3: Abordagem tensorial para representação de cumulantes.**

Nesse capítulo, aborda-se a representação de cumulantes com base em ferramentas da álgebra multilinear conhecidas como tensores. Devido à sua relevância em processamento estatístico de sinais, os cumulantes são abordados do ponto de vista conceitual. A inspiração desse capítulo veio da necessidade de entender a própria definição da matriz de quadricovariância, cuja diagonalização permeia os métodos algébricos de separação abordados no Capítulo 6. A partir da abordagem tensorial e de representações equivalentes por meio de funcionais lineares, representações matriciais consistentes de cumulantes de ordem superior são obtidas. Com base nas

interpretações apresentadas, representações tensoriais de cumulantes são relacionadas a representações matriciais de maneira natural. Destaca-se que esse capítulo foi redigido sem ter em mente uma aplicação específica das ferramentas apresentadas. Isso foi feito a fim de que ele possa servir como referência para o estudo de tensores e cumulantes, independentemente da aplicação específica da tese, *i.e.*, o problema de separação cega de fontes. A relevância desse capítulo é reforçada pelo interesse crescente na teoria de tensores em processamento estatístico de sinais, bem como pela considerável importância e aplicabilidade de estatísticas de ordem superior em problemas dessa área.

Esse capítulo faz uso de definições e propriedades de cumulantes apresentadas no Capítulo 2.

◇ **Capítulo 4: Formulação do problema de separação de fontes.**

Nesse capítulo, aborda-se a formulação do problema de BSS. Enfoque é dado ao modelo de sistema misturador linear e instantâneo, para o qual as soluções do problema foram inicialmente estudadas na literatura. Considera-se, tanto nesse capítulo quanto nos que o seguem, uma formulação do problema de BSS baseada em sinais reais. Isso é feito principalmente em virtude da ampla aplicabilidade prática dessa formulação. A partir da utilização de uma notação consistente e que evidencie detalhes comumente deixados de lado, o intuito é possibilitar a posterior compreensão teórica de princípios de separação e de soluções a eles relacionadas. O conteúdo desse capítulo, embora voltado ao problema clássico de BSS, também é especialmente útil para a compreensão de problemas de separação envolvendo outros tipos de modelos de mistura.

Esse capítulo faz uso de conceitos relacionados à independência estatística abordados no Capítulo 2.

◇ **Capítulo 5: Separabilidade e o teorema de Darmois–Skitovich.**

Nesse capítulo, apresenta-se e interpreta-se a demonstração das condições de separabilidade das fontes segundo o caminho historicamente traçado na literatura de BSS. Parte-se de teoremas preliminares da área de estatística que culminaram no teorema de Darmois–Skitovich, para então revisar as condições de separabilidade para misturas lineares e instantâneas com fontes independentes e identicamente distribuídas no tempo e mutuamente independentes no espaço.

Esse capítulo faz uso de conceitos relacionados à independência estatística abordados no Capítulo 2, bem como da formulação do problema de BSS considerada no Capítulo 4.

◇ **Capítulo 6: Separação de fontes e a matriz de quadricovariância.**

Nesse capítulo, abordam-se métodos algébricos de separação por imposição de independência baseados em cumulantes. Trata-se de fundamentos clássicos da literatura de BSS, mas que são revisitados e reinterpretados com base no arcabouço teórico considerado nos Capítulos 2, 3 e 5. Apesar de esse assunto já ter sido considerado de variadas formas na literatura de separação de fontes, ele reserva questões teóricas e interpretações a serem ainda exploradas. A exposição feita nesse capítulo busca tornar mais acessíveis os conceitos teóricos necessários à compreensão dos métodos algébricos de separação. Além disso, essa exposição enseja a aplicação de métodos algébricos a problemas de estimação cega que eventualmente ainda não tenham sido abordados dessa forma.

Esse capítulo faz uso de definições e propriedades de cumulantes apresentadas no Capítulo 2, de conceitos relacionados à representação matricial de cumulantes abordados no Capítulo 3, da formulação do problema de BSS considerada no Capítulo 4 e das condições de separabilidade abordadas no Capítulo 5.

◇ **Capítulo 7: Critérios de separação baseados em independência.**

Nesse capítulo, abordam-se critérios clássicos de separação por imposição de independência e evidenciam-se suas relações. Busca-se, com isso, complementar sob um ponto de vista de otimização a interpretação dos métodos considerados no Capítulo 6. Além de a abordagem de separação via otimização permitir a obtenção de uma grande variedade de métodos de separação, a partir dela esses métodos podem ser relacionados entre si. Em particular, os métodos algébricos abordados no Capítulo 6 também são colocados sob uma roupagem de otimização, proporcionando uma maneira alternativa de interpretá-los e relacioná-los com outras estratégias de separação.

Esse capítulo faz uso de definições e propriedades de medidas entrópicas de informação apresentadas no Capítulo 2, da formulação do problema de BSS considerada no Capítulo 4, das condições de separabilidade abordadas no Capítulo 5 e de métodos algébricos de separação baseados em cumulantes considerados no Capítulo 6.

◇ **Capítulo 8: Conclusão.**

Nesse capítulo, apresentam-se as conclusões da tese e retomam-se as suas contribuições. Além disso, elencam-se sugestões de trabalhos futuros.

◇ **Apêndice A: Demonstrações.**

Nesse apêndice, apresentam-se demonstrações de proposições enunciadas durante o desenvolvimento teórico feito ao longo dos capítulos da tese. Embora algumas dessas demonstrações possam ser encontradas na literatura de teoria das probabilidades e

separação cega de fontes, sua compilação é feita com o intuito principal de auxiliar a leitura do trabalho.

O conteúdo desse apêndice complementa os Capítulos 2, 3, 6 e 7.

◇ **Apêndice B: Análise de componentes principais.**

Com base em Jolliffe (2002), nesse apêndice abordam-se técnicas de processamento estatístico de sinais coletivamente conhecidas como análise de componentes principais. Particularmente, apresentam-se definições básicas e métodos de obtenção das componentes principais, tanto para o caso exato quanto para o caso amostral. Além disso, comenta-se sobre as relações entre a análise de componentes principais e outras técnicas de decomposição de variáveis aleatórias.

O conteúdo desse apêndice complementa os Capítulos 3 e 6.

◇ **Apêndice C: Métodos numéricos de diagonalização.**

Nesse apêndice, abordam-se métodos numéricos de diagonalização de matrizes simétricas com base em Haykin (2014), Bunse-Gerstner, Byers e Mehrmann (1993), Cardoso e Souloumiac (1996). Trata-se de técnicas importantes à implementação dos métodos de separação cega de fontes baseados em propriedades algébricas de cumulantes.

O conteúdo desse apêndice complementa o Capítulo 6.

2 INDEPENDÊNCIA ESTATÍSTICA E SEUS QUANTIFICADORES

Neste capítulo, apresenta-se um material introdutório com conceitos teóricos fundamentais necessários à abordagem do problema de separação cega de fontes (BSS) baseado em imposição de independência. Especificamente, abordam-se conceitos relacionados à independência estatística e ferramentas matemáticas úteis para quantificá-la. Embora amplamente utilizados e discutidos na literatura de teoria das probabilidades e teoria da informação, aqui esses conceitos são organizados, apresentados e exemplificados com o intuito de embasar teoricamente o conteúdo dos capítulos subsequentes.

Na Seção 2.1, revisitam-se definições relacionadas ao conceito de independência estatística para diferentes tipos de grandezas aleatórias. Na Seção 2.2, abordam-se medidas entrópicas de informação, úteis para a quantificação teórica de independência estatística. Na Seção 2.3, introduzem-se parâmetros estatísticos importantes para a quantificação aproximada de independência até uma determinada ordem, conhecidos como cumulantes. Na Seção 2.4, abordam-se relações entre a independência estatística e a gaussianidade de grandezas aleatórias. Na Seção 2.5, conclui-se o capítulo destacando-se os pontos da tese em que os conceitos abordados são utilizados.

2.1 Independência e definições associadas

A independência estatística é um dos conceitos centrais da teoria das probabilidades (BREIMAN, 1992). Esse conceito — ou alguma versão aproximada dele — é o que constitui a base teórica de modelos estatísticos que permitem resolver uma grande quantidade de problemas de processamento estatístico de sinais (MENDEL, 1991; KAY, 1993; HAYKIN, 2014). Em problemas inversos como separação cega de fontes, a independência estatística consiste em uma hipótese central para viabilizar a obtenção de soluções (COMON, 1994).

Na Subseção 2.1.1, enuncia-se a definição de independência estatística para uma sequência de variáveis aleatórias. Na Subseção 2.1.2, faz-se a extensão desse conceito para vetores aleatórios e introduzem-se conceitos auxiliares para, na Subseção 2.1.3, abordar-se a independência temporal no contexto de processos estocásticos. As definições e proposições a seguir são adaptadas de Feller (1968–1971), Breiman (1992).

2.1.1 Independência para variáveis aleatórias

Definição 2.1. As variáveis aleatórias a_1, a_2, \dots, a_N , com $N \geq 2$, são mutuamente independentes, ou apenas independentes se, e somente se, a função distribuição de probabilidade conjunta

$$F_{a_1, a_2, \dots, a_N}(a_1, a_2, \dots, a_N) = \Pr\{a_1 \leq a_1, a_2 \leq a_2, \dots, a_N \leq a_N\} \quad (2.1)$$

puder ser fatorada conforme

$$\boxed{F_{\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N}(a_1, a_2, \dots, a_N) = \prod_{i=1}^N F_{\underline{a}_i}(a_i)}, \quad (2.2)$$

em que $F_{\underline{a}_i}(a_i) = \Pr\{\underline{a}_i \leq a_i\}$ é a função distribuição de probabilidade de \underline{a}_i , com $i = 1, 2, \dots, N$. \triangleleft

Definição 2.2. As variáveis aleatórias $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N$, com $N \geq 2$, são independentes em pares se, e somente se, \underline{a}_i for independente de \underline{a}_ℓ para quaisquer $i, \ell = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq \ell$. Isso equivale a considerar que a função distribuição de probabilidade conjunta

$$F_{\underline{a}_i, \underline{a}_\ell}(a_i, a_\ell) = \Pr\{\underline{a}_i \leq a_i, \underline{a}_\ell \leq a_\ell\}, \quad (2.3)$$

para quaisquer $i, \ell = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq \ell$, pode ser fatorada conforme

$$\boxed{F_{\underline{a}_i, \underline{a}_\ell}(a_i, a_\ell) = F_{\underline{a}_i}(a_i) F_{\underline{a}_\ell}(a_\ell)}, \quad (2.4)$$

em que $F_{\underline{a}_i}(a_i) = \Pr\{\underline{a}_i \leq a_i\}$ e $F_{\underline{a}_\ell}(a_\ell) = \Pr\{\underline{a}_\ell \leq a_\ell\}$ são as funções distribuição de probabilidade de \underline{a}_i e \underline{a}_ℓ , respectivamente. \triangleleft

Conforme as Definições 2.1 e 2.2, a independência mútua equivale à independência em pares. Para $N > 2$, no entanto, apenas a independência mútua implica a independência em pares, de acordo com a proposição e o exemplo apresentados a seguir. Em geral, portanto, a independência mútua é uma condição mais forte do que a independência em pares (FELLER, 1968–1971).

Proposição 2.1. *Se as variáveis aleatórias $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N$ forem mutuamente independentes, então essas variáveis são independentes em pares.*

Demonstração. Veja a Seção A.1 do Apêndice A.

Exemplo 2.1. Sejam b_1 e b_2 variáveis aleatórias independentes, ambas com distribuição de Bernoulli de probabilidade $p = 1/2$. Essas variáveis podem ser descritas conforme

$$b_1 = \begin{cases} 1, & \text{com prob. } 1/2 \\ 0, & \text{com prob. } 1/2 \end{cases} \quad \text{e} \quad b_2 = \begin{cases} 1, & \text{com prob. } 1/2 \\ 0, & \text{com prob. } 1/2. \end{cases}$$

Caracterizando-se as variáveis por suas respectivas funções massa de probabilidade, obtêm-se

$$f_{b_1}(b_1) = \frac{1}{2} \delta(b_1) + \frac{1}{2} \delta(b_1 - 1) \quad \text{e} \quad f_{b_2}(b_2) = \frac{1}{2} \delta(b_2) + \frac{1}{2} \delta(b_2 - 1),$$

em que $\delta(\cdot)$ denota o delta de Kronecker, definido como

$$\delta(k) = \begin{cases} 1, & \text{se } k = 0 \\ 0, & \text{se } k \neq 0. \end{cases} \quad (2.5)$$

Agora, considera-se uma terceira variável aleatória b_3 dada por

$$b_3 = \lfloor b_1 + b_2 \rfloor_2,$$

em que $\lfloor \alpha \rfloor_2$ denota o resto da divisão de α por 2. A variável b_3 possui a seguinte função massa de probabilidade:

$$f_{b_3}(b_3) = \frac{1}{2} \delta(b_3) + \frac{1}{2} \delta(b_3 - 1).$$

A função massa de probabilidade conjunta das três variáveis consideradas é dada por

$$\begin{aligned} f_{b_1, b_2, b_3}(b_1, b_2, b_3) &= \frac{1}{4} \delta(b_1) \delta(b_2) \delta(b_3) + \frac{1}{4} \delta(b_1) \delta(b_2 - 1) \delta(b_3 - 1) \\ &+ \frac{1}{4} \delta(b_1 - 1) \delta(b_2) \delta(b_3 - 1) + \frac{1}{4} \delta(b_1 - 1) \delta(b_2 - 1) \delta(b_3). \end{aligned}$$

Para $(b_1, b_2, b_3) = (0, 0, 0)$ tem-se $f_{b_1, b_2, b_3}(0, 0, 0) = 1/4$, mas

$$f_{b_1}(0) f_{b_2}(0) f_{b_3}(0) = \frac{1}{2} \times \frac{1}{2} \times \frac{2}{4} = \frac{1}{8}.$$

Logo, as variáveis b_1, b_2, b_3 não são mutuamente independentes de acordo com a Definição 2.1. No entanto, quaisquer pares dessas variáveis aleatórias são independentes pois

◇ b_1 é independente de b_2 , por hipótese;

◇ b_1 é independente de b_3 pois

$$\begin{aligned} f_{b_3|b_1}(b_3|b_1 = B_1) &= \frac{1}{2} \delta(b_3) \delta(B_1) + \frac{1}{2} \delta(b_3 - 1) \delta(B_1) \\ &+ \frac{1}{2} \delta(b_3 - 1) \delta(B_1 - 1) + \frac{1}{2} \delta(b_3) \delta(B_1 - 1) \\ &= \frac{1}{2} [\delta(b_3) + \delta(b_3 - 1)] \underbrace{[\delta(B_1) + \delta(B_1 - 1)]}_{=1} = f_{b_3}(b_3) \end{aligned}$$

para $B_1 \in \{0, 1\}$, o que implica

$$f_{b_3, b_1}(b_3, b_1) = f_{b_3|b_1}(b_3|b_1) f_{b_1}(b_1) = f_{b_3}(b_3) f_{b_1}(b_1);$$

◇ analogamente ao caso anterior, b_2 é independente de b_3 pois $f_{b_3|b_2}(b_3|b_2 = B_2) = f_{b_3}(b_3)$

para $B_2 \in \{0, 1\}$, o que implica $f_{b_3, b_2}(b_3, b_2) = f_{b_3|b_2}(b_3|b_2) f_{b_2}(b_2) = f_{b_3}(b_3) f_{b_2}(b_2)$.

Portanto, segundo a Definição 2.2, as variáveis b_1, b_2, b_3 são independentes em pares. ◁

Antes de prosseguir ao caso vetorial, apresenta-se a definição de variáveis aleatórias identicamente distribuídas. Essa definição é útil à abordagem de independência temporal de processos estocásticos feita na Subseção 2.1.3.

Definição 2.3. As variáveis aleatórias a_1, a_2, \dots, a_N são identicamente distribuídas se, e somente se, todas possuírem as mesmas funções distribuição de probabilidade, *i.e.*,

$$\boxed{F_{a_i}(\cdot) = F_{a_\ell}(\cdot)} \quad (2.6)$$

para quaisquer $i, \ell = 1, 2, \dots, N$, em que $F_{a_i}(\cdot) = \Pr\{a_i \leq (\cdot)\}$ e $F_{a_\ell}(\cdot) = \Pr\{a_\ell \leq (\cdot)\}$ são as funções distribuição de probabilidade de a_i e a_ℓ , respectivamente. ◁

2.1.2 Independência para vetores aleatórios

Definição 2.4. A função distribuição de probabilidade do vetor aleatório

$$\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_N]^\top$$

é definida como a função distribuição de probabilidade conjunta de seus elementos, *i.e.*,

$$F_{a_1, a_2, \dots, a_N}(a_1, a_2, \dots, a_N) = \Pr\{a_1 \leq a_1, a_2 \leq a_2, \dots, a_N \leq a_N\},$$

e pode ser representada, em forma reduzida equivalente, por

$$\boxed{F_{\mathbf{a}}(\mathbf{a}) = \Pr\{\mathbf{a} \leq \mathbf{a}\}}, \quad (2.7)$$

em que $\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_N]^\top$. \triangleleft

Com base nessa definição, enunciam-se a seguir duas definições que correspondem a extensões das Definições 2.1 e 2.3 para uma sequência de vetores aleatórios.

Definição 2.5. Os vetores aleatórios $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N$, com $N \geq 2$, são mutuamente independentes, ou apenas independentes se, e somente se, a função distribuição de probabilidade conjunta

$$F_{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N}(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N) = \Pr\{\mathbf{a}_1 \leq \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 \leq \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N \leq \mathbf{a}_N\} \quad (2.8)$$

puder ser fatorada conforme

$$\boxed{F_{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N}(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N) = \prod_{i=1}^N F_{\mathbf{a}_i}(\mathbf{a}_i)}, \quad (2.9)$$

em que $F_{\mathbf{a}_i}(\mathbf{a}_i) = \Pr\{\mathbf{a}_i \leq \mathbf{a}_i\}$ é a função distribuição de probabilidade de \mathbf{a}_i , com $i = 1, 2, \dots, N$. \triangleleft

Definição 2.6. Os vetores aleatórios $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N$, com $N \geq 2$, são identicamente distribuídos se, e somente se, todos possuírem as mesmas funções distribuição de probabilidade, *i.e.*,

$$\boxed{F_{\mathbf{a}_i}(\cdot) = F_{\mathbf{a}_\ell}(\cdot)}, \quad (2.10)$$

para quaisquer $i, \ell = 1, 2, \dots, N$, em que $F_{\mathbf{a}_i}(\cdot) = \Pr\{\mathbf{a}_i \leq (\cdot)\}$ e $F_{\mathbf{a}_\ell}(\cdot) = \Pr\{\mathbf{a}_\ell \leq (\cdot)\}$ são as funções distribuição de probabilidade de \mathbf{a}_i e \mathbf{a}_ℓ , respectivamente. \triangleleft

A independência de vetores aleatórios pode ser interpretada como a independência de conjuntos de variáveis aleatórias. Se forem definidos vetores aleatórios arbitrários que particionem um conjunto de variáveis aleatórias, pode-se utilizar a independência desses vetores para definir, de maneira consistente, a independência de partições do conjunto. Isso é útil, por exemplo, para expressar certas propriedades de cumulantes na Seção 2.3.

2.1.3 Independência temporal para processos estocásticos

A seguir, aborda-se a independência temporal para processos estocásticos. Partindo-se da definição de variáveis aleatórias identicamente distribuídas, inicia-se por uma classe de processos estocásticos escalares que não apresenta quaisquer variações estatísticas ao longo do tempo.

Definição 2.7. Seja um processo estocástico escalar $\{\underline{a}(n)\}$, com $n \in \mathbb{Z}$. O processo $\{\underline{a}(n)\}$ é independente e identicamente distribuído no tempo, ou apenas independente e identicamente distribuído (iid) se, e somente se,

- (i) $\{\underline{a}(n)\}$ for independente no tempo, *i.e.*, para qualquer conjunto finito de $\ell \geq 2$ instantes distintos $\{n_1, n_2, \dots, n_\ell\} \subset \mathbb{Z}$, as variáveis aleatórias

$$\underline{a}(n_1), \underline{a}(n_2), \dots, \underline{a}(n_\ell)$$

forem mutuamente independentes (conforme a Definição 2.1), e

- (ii) $\{\underline{a}(n)\}$ for identicamente distribuído no tempo, *i.e.*, as variáveis aleatórias

$$\dots, \underline{a}(-1), \underline{a}(0), \underline{a}(1), \dots$$

forem identicamente distribuídas (conforme a Definição 2.3).

◁

Um processo estocástico escalar que satisfaz a Definição 2.7 pode ser representado de maneira simples, sem ser necessário recorrer a ferramentas de séries temporais como, por exemplo, função de autocorrelação ou densidade espectral de potência. A fim de exemplificar essa importante característica de processos escalares iid, apresenta-se o seguinte exemplo (PAPOULIS; PILLAI, 2002).

Exemplo 2.2. O processo de Bernoulli $\{\underline{b}(n)\}$ é constituído por variáveis aleatórias mutuamente independentes $\underline{b}(n_0)$, para $n_0 = 0, 1, \dots$, tais que para um dado instante n_0 tem-se

$$\underline{b}(n_0) = \begin{cases} 1, & \text{com prob. } p \\ 0, & \text{com prob. } 1 - p, \end{cases} \quad (2.11)$$

em que $0 < p < 1$. Por definição, o processo de Bernoulli é temporalmente independente. Além disso, a função massa de probabilidade do processo tomado em um dado instante de tempo n_0 vale

$$f_{\underline{b}(n_0)}(b) = (1 - p) \delta(b) + p \delta(b - 1),$$

sendo $\delta(\cdot)$ definido em (2.5). Logo, $f_{\underline{b}(n_0)}$ independe do tempo e o processo é identicamente distribuído. Portanto, o processo de Bernoulli é iid. Como consequência, sua esperança

também independe do tempo e vale

$$E[\underline{b}(n)] = \sum_{b=-\infty}^{+\infty} b f_{\underline{b}(n)}(b) = 0 \times (1 - p) + 1 \times p = p. \quad (2.12)$$

Uma possível realização no tempo de $\{\underline{b}(n)\}$, indexada pelo número zero, é representada conforme

$$b^{(0)}(n) = \sum_{k=0}^{+\infty} b^{(0)}(k) \delta(n - k), \quad (2.13)$$

em que $b^{(0)}(k)$ denota o valor da realização $\{b^{(0)}(n)\}$ do processo $\{\underline{b}(n)\}$ tomada no k -ésimo instante, com $k = 0, 1, \dots$. Como $\{\underline{b}(n)\}$ é iid, é possível interpretar uma realização desse processo como repetidos sorteios independentes de uma mesma variável aleatória. Nesse sentido, define-se a variável aleatória de Bernoulli

$$\underline{b} = \begin{cases} 1, & \text{com prob. } p \\ 0, & \text{com prob. } 1 - p. \end{cases} \quad (2.14)$$

As expressões (2.11) e (2.14) são fundamentalmente diferentes, pois a primeira descreve um processo estocástico (*i.e.*, um conjunto de variáveis aleatórias indexadas), enquanto a segunda descreve apenas uma variável aleatória. Entretanto, existe uma relação estreita entre o processo $\{\underline{b}(n)\}$ e a variável aleatória \underline{b} . De fato, o sinal $\{b^{(0)}(n)\}$ de (2.13) pode ser compreendido tanto como uma realização do processo $\{\underline{b}(n)\}$, quanto como repetidos sorteios independentes da variável aleatória \underline{b} feitos ao longo do tempo. Em outras palavras, é possível fazer a seguinte interpretação:

$$b^{(0)}(n) = \sum_{i=0}^{+\infty} b^{(i)} \delta(n - i),$$

em que $b^{(i)}$ denota o i -ésimo sorteio independente da variável aleatória \underline{b} , com $i = 0, 1, \dots$. Sendo assim, para $\ell = 0, 1, \dots$, interpreta-se a realização de $\{\underline{b}(n)\}$ tomada no ℓ -ésimo instante, denotada por $b^{(0)}(\ell)$, como o ℓ -ésimo sorteio independente de \underline{b} , denotado por $b^{(\ell)}$. \triangleleft

Nos próximos dois exemplos, em contrapartida, consideram-se processos estocásticos escalares que não são iid e, por isso, não possuem uma representação simplificada como o processo do Exemplo 2.2.

Exemplo 2.3. Considera-se o processo de contagem $\{B(n)\}$ tal que

$$B(n) = \sum_{m=0}^n \underline{b}(m),$$

com $n = 0, 1, \dots$, sendo $\{\underline{b}(n)\}$ o processo estocástico de Bernoulli definido no Exemplo 2.2. Nesse caso, valem $B(0) = \underline{b}(0)$ e $B(1) = \underline{b}(0) + \underline{b}(1) = B(0) + \underline{b}(1)$. Embora $\{\underline{b}(n)\}$ seja temporalmente independente, o processo $\{B(n)\}$ não possui essa propriedade. Isso é

evidente ao notar que a variável aleatória $\underline{B}(0)$ aparece como um dos termos de $\underline{B}(1)$. Sendo assim, as variáveis aleatórias $\underline{B}(0)$ e $\underline{B}(1)$ não são independentes. Portanto, $\{\underline{B}(n)\}$ não é iid. Ao calcular a esperança do processo $\{\underline{B}(n)\}$, obtém-se

$$E[\underline{B}(n)] = E \left[\sum_{m=0}^n \underline{b}(m) \right],$$

e utilizando-se o resultado da Equação (2.12) do Exemplo 2.2, resulta $E[\underline{B}(n)] = (n+1)p$. A esperança de $\{\underline{B}(n)\}$ aumenta com o tempo, como é de se esperar para um processo de contagem que soma apenas zero ou um. Logo, esse processo não é estacionário em sentido amplo e não pode ser identicamente distribuído, já que instantes diferentes implicam variáveis aleatórias com esperanças diferentes e, portanto, com distribuições distintas. Por fim, constata-se que a interpretação feita para o processo iid do Exemplo 2.2 não é válida aqui. A rigor, não se pode interpretar uma realização do processo $\{\underline{B}(n)\}$ como diversos sorteios independentes de uma mesma variável aleatória, já que existe uma dependência temporal e uma mudança temporal de distribuição que não podem ser ignoradas. \triangleleft

Exemplo 2.4. Seja o processo estocástico $\{\underline{c}(n)\}$ constituído por variáveis aleatórias mutuamente independentes $\underline{c}(n_0)$ tais que, para um dado instante $n_0 = 0, 1, \dots$,

$$\underline{c}(n_0) \sim \begin{cases} \mathcal{U}(a, b), & \text{se } n_0 \text{ é par} \\ \mathcal{N}(\mu, \sigma^2), & \text{se } n_0 \text{ é ímpar,} \end{cases}$$

em que $\mathcal{U}(a, b)$ denota uma distribuição uniforme no intervalo (a, b) e $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ denota uma distribuição gaussiana com média μ e variância σ^2 . Por definição, o processo tem independência temporal. No entanto, claramente não é identicamente distribuído, visto que suas distribuições alternam no tempo entre uma uniforme e uma gaussiana. Logo, $\{\underline{c}(n)\}$ não é iid e fica evidente que não pode ser representado por apenas uma variável aleatória por conta da mudança de sua distribuição ao longo do tempo. \triangleleft

Os Exemplos 2.2, 2.3 e 2.4 auxiliam a compreender por qual motivo, muitas vezes, processos estocásticos iid são representados como simples variáveis aleatórias sorteadas ao longo do tempo (PAPOULIS; PILLAI, 2002). Assim como para o caso escalar, é possível definir processos estocásticos iid para o caso vetorial. Trata-se de uma generalização da Definição 2.7.

Definição 2.8. Seja um processo estocástico vetorial $\{\underline{\mathbf{a}}(n)\}$, com $n \in \mathbb{Z}$. O processo $\{\underline{\mathbf{a}}(n)\}$ é independente e identicamente distribuído no tempo, ou apenas independente e identicamente distribuído (iid) se, e somente se,

- (i) $\{\underline{\mathbf{a}}(n)\}$ for independente no tempo, *i.e.*, para qualquer conjunto finito de $\ell \geq 2$ instantes distintos $\{n_1, n_2, \dots, n_\ell\} \subset \mathbb{Z}$, os vetores aleatórios

$$\underline{\mathbf{a}}(n_1), \underline{\mathbf{a}}(n_2), \dots, \underline{\mathbf{a}}(n_\ell)$$

forem mutuamente independentes (conforme a Definição 2.5), e

(ii) $\{\mathbf{a}(n)\}$ for identicamente distribuído no tempo, *i.e.*, os vetores aleatórios

$$\dots, \mathbf{a}(-1), \mathbf{a}(0), \mathbf{a}(1), \dots$$

forem identicamente distribuídos (conforme a Definição 2.6).

◁

A consideração de processos estocásticos vetoriais iid em descrições estatísticas traz conveniências análogas às que ocorrem no caso escalar. Em particular, é possível representar o processo vetorial iid como um simples vetor aleatório, cujos sorteios independentes se dão ao longo do tempo (BREIMAN, 1992).

A independência abordada na Definição 2.8 é eminentemente temporal. Entretanto, ela implica um certo tipo de independência espacial. Considera-se, por exemplo, um processo estocástico iid $\{\mathbf{a}(n)\}$ com $\mathbf{a}(n) = [a_1(n) \ a_2(n)]^T$. Conforme a Definição 2.8-(a), tem-se $\mathbf{a}(n_1)$ independente de $\mathbf{a}(n_2)$ para $n_1 \neq n_2$. De acordo com a Definição 2.5, essa independência equivale à independência mútua dos conjuntos $\{a_1(n_1), a_2(n_1)\}$ e $\{a_1(n_2), a_2(n_2)\}$. Por sua vez, essa independência mútua implica a independência das variáveis aleatórias $a_1(n_1)$ e $a_2(n_2)$, bem como a independência de $a_2(n_1)$ e $a_1(n_2)$. Logo, há independência no sentido espacial desde que instantes distintos sejam considerados. Porém, nada é possível afirmar quanto à independência de $a_1(n_1)$ e $a_2(n_1)$, ou de $a_1(n_2)$ e $a_2(n_2)$; essas independências particulares não são contempladas pela Definição 2.8.

Embora a independência estatística de grandezas aleatórias seja muito importante do ponto de vista do uso de modelos estatísticos para a resolução de problemas práticos (BREIMAN, 1992), trata-se de um conceito relativamente forte do ponto de vista teórico (FELLER, 1968–1971). Isso se deve ao fato de que a independência estatística implica restrições sobre funções distribuição de probabilidade conjuntas, conforme as Definições 2.1 e 2.8.

2.2 Medidas entrópicas de informação

Medidas entrópicas de informação permitem quantificar a independência estatística de variáveis aleatórias a partir de sua distribuição conjunta. As principais medidas de informação úteis para a representação da independência estatística são baseadas em entropia (COVER; THOMAS, 2006; HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001; COMON; JUTTEN, 2010). Em teoria da informação, o conceito de entropia está relacionado à imprevisibilidade ou ao grau de surpresa de variáveis aleatórias. As definições e proposições a seguir são adaptadas de Cover e Thomas (2006), Hyvärinen, Karhunen e Oja (2001), Watanabe (1960). Por simplicidade, nesta seção consideram-se apenas grandezas aleatórias para as quais a função densidade de probabilidade existe. Excluem-se, portanto, grandezas aleatórias discretas ou mistas. Inicia-se, a seguir, pela definição de entropia diferencial.

Definição 2.9. A entropia diferencial de uma função densidade de probabilidade conjunta f , correspondente a N variáveis aleatórias, é definida compactamente como

$$\boxed{H(f) = - \int_{\mathcal{S}_f} \log(f(\mathbf{x})) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}, \quad (2.15)$$

em que o símbolo de integral em negrito denota N integrais iteradas e \mathcal{S}_f denota o suporte de f , definido como $\mathcal{S}_f = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \mid f(\mathbf{x}) > 0\}$. A base do logaritmo está associada à unidade da entropia diferencial e deve ser um número real maior do que um. Por sua vez, a entropia diferencial de um vetor aleatório \mathbf{a} é definida como

$$\boxed{H[\mathbf{a}] = H(f_{\mathbf{a}}) = - E[\log f_{\mathbf{a}}(\mathbf{a})]}, \quad (2.16)$$

em que $f_{\mathbf{a}}$ denota a função densidade de probabilidade de \mathbf{a} . ◁

Diferentemente da entropia para variáveis aleatórias discretas introduzida por C. Shannon (COVER; THOMAS, 2006), não é possível interpretar a entropia diferencial da Definição 2.9 como uma medida consistente de informação média de uma fonte de informação contínua. O motivo principal que impossibilita essa interpretação é o fato de a entropia diferencial poder assumir valores negativos, enquanto é desejável que a informação seja sempre uma grandeza positiva (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001).

Proposição 2.2. *Seja \mathbf{a} um vetor aleatório qualquer de N elementos. A entropia diferencial satisfaz as seguintes propriedades:*

(i) *Invariância sob translação: para todo vetor $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^N$, tem-se*

$$H[\mathbf{a} + \mathbf{k}] = H[\mathbf{a}].$$

(ii) *Transformação linear: para toda matriz $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ inversível, tem-se*

$$H[\mathbf{K}\mathbf{a}] = H[\mathbf{a}] + \log |\det \mathbf{K}|.$$

(iii) *A entropia diferencial é limitada superiormente conforme*

$$H[\mathbf{a}] \leq \frac{1}{2} \log(\det(2\pi e \mathbf{C}_{\mathbf{a}})),$$

em que e denota a constante de Euler e $\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = E[(\mathbf{a} - E[\mathbf{a}])(\mathbf{a} - E[\mathbf{a}])^T]$ é a matriz de covariância de \mathbf{a} . A igualdade é estabelecida se, e somente se, os elementos de \mathbf{a} forem conjuntamente gaussianos.

Uma decorrência direta da propriedade (ii) da Proposição 2.2 é que, em geral, a entropia diferencial não se mantém constante ao realizar uma mudança de variáveis para representar uma fonte de informação. Por exemplo, se \mathbf{a} for uma grandeza física dada em metros, sua entropia diferencial mudará ao representá-la em centímetros. Essa inconsistência

dimensional também é uma característica indesejável para o uso da entropia diferencial como medida de informação média (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001).

De acordo com a propriedade (iii), entre todos os vetores aleatórios de mesma matriz de covariância, aqueles cujos elementos são conjuntamente gaussianos são os que possuem entropia diferencial máxima. Trata-se da propriedade de máxima entropia da distribuição gaussiana, amplamente utilizada na literatura de teoria da informação. Pode-se demonstrá-la a partir da desigualdade de Jensen conforme Cover e Thomas (2006), ou de maneira mais geral utilizando-se ferramentas do cálculo variacional.

A seguir, define-se uma medida entrópica de informação denominada divergência de Kullback–Leibler. Essa medida evita certas inconsistências da entropia diferencial, sendo mais adequada para medir informação média de variáveis aleatórias contínuas (COVER; THOMAS, 2006).

Definição 2.10. A divergência de Kullback–Leibler (*i.e.*, divergência K-L) entre duas funções densidade de probabilidade conjuntas f e g , ambas correspondentes a N variáveis aleatórias, é definida compactamente como

$$\boxed{K(f\|g) = \int_{S_f} \log \left(\frac{f(\mathbf{x})}{g(\mathbf{x})} \right) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.} \quad (2.17)$$

A fim de evitar possível divisão por zero, essa definição é considerada válida apenas se $g(\mathbf{x}) = 0$ implicar $f(\mathbf{x}) = 0$, *i.e.*, se o suporte de f estiver contido no suporte de g . A divergência K-L entre dois vetores aleatórios \mathbf{a} e \mathbf{b} , ambos com o mesmo número de elementos, é definida como

$$\boxed{K[\mathbf{a}\|\mathbf{b}] = K(f_{\mathbf{a}}\|f_{\mathbf{b}}),} \quad (2.18)$$

em que $f_{\mathbf{a}}$ e $f_{\mathbf{b}}$ são as funções densidade de probabilidade de \mathbf{a} e \mathbf{b} , respectivamente. \triangleleft

Segundo a Definição 2.10, tem-se que a divergência K-L não é simétrica, *i.e.*, em geral $K(f\|g) \neq K(g\|f)$. Sendo assim, rigorosamente não se pode afirmar que a divergência K-L é uma distância. Entretanto, pode-se interpretá-la como uma medida consistente de proximidade ou diferença entre distribuições de dois vetores aleatórios (COVER; THOMAS, 2006). Essa interpretação pode ser melhor compreendida a partir das propriedades enunciadas a seguir.

Proposição 2.3. A divergência K-L satisfaz as seguintes propriedades:

(i) *Não negatividade:* para quaisquer vetores aleatórios \mathbf{a} e \mathbf{b} , tem-se

$$K[\mathbf{a}\|\mathbf{b}] \geq 0.$$

(ii) *Valor nulo: a igualdade*

$$K[\mathbf{a}\|\mathbf{b}] = 0$$

ocorre se, e somente se, $f_{\mathbf{a}} = f_{\mathbf{b}}$ — exceto, eventualmente, em um conjunto de medida nula dos suportes dessas funções densidade de probabilidade.

(iii) *Invariância sob transformação: para quaisquer vetores aleatórios \mathbf{a} e \mathbf{b} , ambos de N elementos, e para toda função inversível $\mathbf{h} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$, tem-se*

$$K[\mathbf{h}(\mathbf{a}) \parallel \mathbf{h}(\mathbf{b})] = K[\mathbf{a} \parallel \mathbf{b}].$$

(iv) *Relação com a entropia diferencial: para todo vetor aleatório \mathbf{a} de N elementos com suporte $(0, 1)^N$, e sendo \mathbf{u} um vetor aleatório de N elementos com distribuição uniforme em $(0, 1)^N$, tem-se*

$$K[\mathbf{a} \parallel \mathbf{u}] = -H[\mathbf{a}].$$

Diferentemente da entropia diferencial, a divergência K-L é sempre não negativa conforme a propriedade (i) da Proposição 2.3. Além disso, de acordo com a propriedade (iii), essa medida entrópica não se altera sob uma mesma mudança de variáveis aplicada a ambos os vetores aleatórios. Sendo assim, ao contrário da entropia diferencial, a divergência K-L é dimensionalmente consistente (COVER; THOMAS, 2006).

A divergência K-L permite definir uma medida entrópica de informação especialmente útil em separação cega de fontes. Trata-se da informação mútua, apresentada a seguir (COMON, 1994; CARDOSO, 1998; HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001).

Definição 2.11. A informação mútua de uma função densidade de probabilidade conjunta f , correspondente a N variáveis aleatórias cujas funções densidade de probabilidade marginais são dadas por f_1, f_2, \dots, f_N , é definida como

$$I(f) = K \left(f \parallel \prod_{i=1}^N f_i \right). \quad (2.19)$$

A informação mútua de um vetor aleatório \mathbf{a} é definida como

$$I[\mathbf{a}] = K[\mathbf{a} \parallel \check{\mathbf{a}}], \quad (2.20)$$

em que $\check{\mathbf{a}}$ é um vetor aleatório de elementos mutuamente independentes e cujas funções densidade de probabilidade marginais são iguais à de \mathbf{a} . \triangleleft

Quando $N = 2$, a informação mútua da Definição 2.11 corresponde à informação mútua usual de teoria da informação (COVER; THOMAS, 2006). Logo, pode-se interpretar a Definição 2.11 como uma generalização — para mais de duas variáveis aleatórias — da definição usual de informação mútua. Porém, pode-se mostrar que essa generalização não é única e há outras maneiras consistentes de fazê-la. Para chamar atenção a esse fato, a informação mútua da Definição 2.11 é preferencialmente denominada correlação total (WATANABE, 1960) no contexto de teoria da informação.

Proposição 2.4. *A informação mútua satisfaz as seguintes propriedades:*

(i) *Não negatividade: para todo vetor aleatório \mathbf{a} , tem-se*

$$I[\mathbf{a}] \geq 0.$$

(ii) *Valor nulo: a igualdade*

$$I[\mathbf{a}] = 0$$

ocorre se, e somente se, as variáveis aleatórias em \mathbf{a} forem mutuamente independentes.

(iii) *Relação com a entropia diferencial: para todo vetor aleatório $\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_N]^\top$, tem-se*

$$I[\mathbf{a}] = \sum_{i=1}^N H[a_i] - H[\mathbf{a}].$$

A propriedade (ii) da Proposição 2.4 é uma decorrência direta da condição de valor nulo para a divergência K-L da Proposição 2.3. A partir dessa propriedade, a informação mútua pode ser interpretada como um indicador de independência mútua de variáveis aleatórias (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001).

2.3 Cumulantes

Cumulantes são parâmetros estatísticos que permitem quantificar de maneira aproximada a independência de variáveis aleatórias sem ser necessário conhecer a sua distribuição conjunta. Antes de apresentar a definição de cumulantes, porém, são definidos os momentos de um vetor aleatório e de suas variáveis. As definições e proposições desta seção são adaptadas de McCullagh (2018), Picinbono (1993), Nikias e Petropulu (1993), Papoulis e Pillai (2002). Por conveniência, considera-se nesta seção que \mathbf{a} é um vetor aleatório de N elementos dado por

$$\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_N]^\top.$$

O conteúdo exposto a seguir é válido apenas para grandezas aleatórias reais; extensões de momentos e cumulantes para o caso complexo podem ser encontradas, por exemplo, em Picinbono (1993).

Definição 2.12. Os momentos de ordem $M \geq 1$ do vetor aleatório \mathbf{a} são definidos, em termos da esperança matemática, como

$$\mathcal{E}_{\mathbf{a}}^{i_1, i_2, \dots, i_M} = E[a_{i_1} a_{i_2} \cdots a_{i_M}] \quad (2.21)$$

para $i_1, i_2, \dots, i_M = 1, 2, \dots, N$. Nessa notação, dois ou mais índices podem assumir o mesmo valor. No caso particular em que $i_1 = i_2 = \cdots = i_M = i$, obtém-se o momento de ordem M da variável aleatória a_i , convenientemente denotado por

$$\mathcal{E}_{a_i, M} = E[a_i^M] \quad (2.22)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$. ◁

Nem sempre os momentos de um vetor aleatório existem (MCCULLAGH, 2018). De acordo com a Definição 2.12, um vetor aleatório de N elementos possui no máximo

$$\frac{(M + N - 1)!}{M! (N - 1)!}$$

momentos de ordem M distintos, em que $(\cdot)!$ denota o fatorial.

A função característica de um vetor aleatório, definida a seguir, é útil para o cálculo dos momentos desse vetor (PICINBONO, 1993).

Definição 2.13. A função característica do vetor aleatório \mathbf{a} é definida como a função característica de seus elementos, *i.e.*,

$$\Phi_{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N) = \mathbb{E} \left[\exp \left(j \sum_{i=1}^N \omega_i \mathbf{a}_i \right) \right]$$

para $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N \in \mathbb{R}$, em que j é a unidade imaginária tal que $j^2 = -1$. Essa função pode ser representada, em forma reduzida equivalente, como

$$\boxed{\Phi_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\omega}) = \mathbb{E}[\exp(j\boldsymbol{\omega}^T \mathbf{a})]} \quad (2.23)$$

para $\boldsymbol{\omega} = [\omega_1 \ \omega_2 \ \dots \ \omega_N]^T \in \mathbb{R}^N$. ◁

A função característica definida pode ser interpretada como a transformada de Fourier, com os sinais das frequências trocados, da função densidade de probabilidade conjunta de $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N$. Além disso, a definição apresentada também vale para variáveis aleatórias discretas. Tanto para variáveis aleatórias contínuas quanto discretas, a função característica sempre existe — mesmo se funções densidade de probabilidade não puderem ser definidas (MCCULLAGH, 2018).

Os momentos de ordem M de um vetor aleatório, caso existam, podem ser obtidos a partir de derivadas parciais da função característica (MCCULLAGH, 2018; PICINBONO, 1993) conforme

$$\xi_{\mathbf{a}}^{i_1, i_2, \dots, i_M} = (-j)^M \frac{\partial^M \Phi_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\omega})}{\partial \omega_{i_1} \partial \omega_{i_2} \dots \partial \omega_{i_M}} \Big|_{\boldsymbol{\omega}=\mathbf{0}_N}.$$

Definição 2.14. A função log-característica do vetor aleatório \mathbf{a} é definida como a função log-característica de seus elementos, *i.e.*,

$$\Psi_{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N) = \ln \Phi_{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N),$$

para $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N \in \mathbb{R}$, em que $\ln(\cdot)$ denota o logaritmo natural. Essa função pode ser representada, em forma reduzida equivalente, como

$$\boxed{\Psi_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\omega}) = \ln \Phi_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\omega})} \quad (2.24)$$

para $\boldsymbol{\omega} = [\omega_1 \ \omega_2 \ \dots \ \omega_N]^T \in \mathbb{R}^N$. ◁

Definição 2.15. Os cumulantes de ordem $M \geq 1$ do vetor aleatório \mathbf{a} são denotados por

$$\boxed{\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i_1, i_2, \dots, i_M} = \text{cum}[\underline{a}_{i_1}, \underline{a}_{i_2}, \dots, \underline{a}_{i_M}]}$$
 (2.25)

para $i_1, i_2, \dots, i_M = 1, 2, \dots, N$, e definidos conforme

$$\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i_1, i_2, \dots, i_M} = (-j)^M \frac{\partial^M \Psi_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\omega})}{\partial \omega_{i_1} \partial \omega_{i_2} \cdots \partial \omega_{i_M}} \Big|_{\boldsymbol{\omega}=\mathbf{0}_N},$$

i.e., a partir de derivadas parciais da função log-característica (NIKIAS; PETROPULU, 1993; PICINBONO, 1993). Em particular, se $i_1 = i_2 = \dots = i_M = i$, obtém-se o cumulante de ordem M da variável aleatória \underline{a}_i , denotado por

$$\boxed{\mathcal{C}_{\underline{a}_i, M} = \text{cum}[\underbrace{\underline{a}_i, \underline{a}_i, \dots, \underline{a}_i}_{M \text{ vezes}}]}$$
 (2.26)

para $i = 1, 2, \dots, N$. ◁

Os cumulantes possuem propriedades matemáticas interessantes, sendo muitas vezes mais convenientes de manipular algebricamente do que momentos. As principais propriedades dos cumulantes são apresentadas a seguir (MCCULLAGH, 2018; PICINBONO, 1993; HOLMQUIST, 1988).

Proposição 2.5. *Seja um vetor aleatório qualquer $\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_N]^T$ para o qual existem cumulantes. Para quaisquer índices $i_1, i_2, \dots, i_M = 1, 2, \dots, N$, valem as seguintes propriedades:*

(i) *Multilinearidade: se $M \geq 1$, então*

$$\text{cum}[k \underline{a}_{i_1}, \underline{a}_{i_2}, \dots, \underline{a}_{i_M}] = k \text{cum}[\underline{a}_{i_1}, \underline{a}_{i_2}, \dots, \underline{a}_{i_M}]$$

para todo $k \in \mathbb{R}$, e

$$\text{cum}[\underline{a}_{i_1} + \underline{a}_\ell, \underline{a}_{i_2}, \dots, \underline{a}_{i_M}] = \text{cum}[\underline{a}_{i_1}, \underline{a}_{i_2}, \dots, \underline{a}_{i_M}] + \text{cum}[\underline{a}_\ell, \underline{a}_{i_2}, \dots, \underline{a}_{i_M}]$$

para qualquer $\ell = 1, 2, \dots, N$.

(ii) *Invariância sob permutação de índices: se $M \geq 2$, então*

$$\text{cum}[\underline{a}_{i_1}, \underline{a}_{i_2}, \dots, \underline{a}_{i_M}] = \text{cum}[\underline{a}_{\sigma(i_1)}, \underline{a}_{\sigma(i_2)}, \dots, \underline{a}_{\sigma(i_M)}],$$

em que $\sigma(\cdot)$ denota um mapeamento de permutação.

(iii) *Invariância sob translação: se $M \geq 2$, então*

$$\text{cum}[\underline{a}_{i_1} + k, \underline{a}_{i_2}, \dots, \underline{a}_{i_M}] = \text{cum}[\underline{a}_{i_1}, \underline{a}_{i_2}, \dots, \underline{a}_{i_M}]$$

para todo $k \in \mathbb{R}$.

(iv) Se os elementos de \mathbf{a} forem conjuntamente gaussianos e $M \geq 3$, então

$$\text{cum}[\mathbf{a}_{i_1}, \mathbf{a}_{i_2}, \dots, \mathbf{a}_{i_M}] = 0.$$

A seguir, considera-se adicionalmente um vetor aleatório qualquer $\mathbf{b} = [b_1 \ b_2 \ \dots \ b_P]^\top$ para o qual também existem cumulantes. Se os vetores aleatórios \mathbf{a} e \mathbf{b} forem independentes conforme a Definição 2.5, então para quaisquer índices $i_1, i_2, \dots, i_M = 1, 2, \dots, N$ e $\ell_1, \ell_2, \dots, \ell_{M'} = 1, 2, \dots, P$, com $M, M' \geq 1$, valem as seguintes propriedades:

(v.1) Partições independentes:

$$\text{cum}[\mathbf{a}_{i_1}, \mathbf{a}_{i_2}, \dots, \mathbf{a}_{i_M}, \mathbf{b}_{\ell_1}, \mathbf{b}_{\ell_2}, \dots, \mathbf{b}_{\ell_{M'}}] = 0.$$

(v.2) Aditividade: se $M = M' = R$, então

$$\text{cum}[\mathbf{a}_{i_1} + \mathbf{b}_{\ell_1}, \mathbf{a}_{i_2} + \mathbf{b}_{\ell_2}, \dots, \mathbf{a}_{i_R} + \mathbf{b}_{\ell_R}] = \text{cum}[\mathbf{a}_{i_1}, \mathbf{a}_{i_2}, \dots, \mathbf{a}_{i_R}] + \text{cum}[\mathbf{b}_{\ell_1}, \mathbf{b}_{\ell_2}, \dots, \mathbf{b}_{\ell_R}].$$

As propriedades (i) e (ii) da Proposição 2.5 também são válidas para momentos (PICIN-BONO, 1993); as demais propriedades são válidas, no caso geral, apenas para cumulantes. Enfatiza-se que a propriedade (iii) não é válida para ordem $M = 1$; nesse caso, o cumulante equivale ao momento e perde-se a invariância sob translação.

A propriedade (iv) consiste no fato de que um vetor aleatório cujas variáveis são conjuntamente gaussianas possui todos os cumulantes de ordem maior do que dois iguais a zero. A propriedade (v.1) é muito útil para verificar, até uma dada ordem, a independência mútua de duas ou mais variáveis aleatórias. A propriedade (v.2) torna manipulações algébricas de cumulantes muito convenientes; trata-se de uma decorrência direta de sucessivas aplicações das propriedades (i) e (v.1).

Destaca-se que, enquanto na propriedade (i) é considerada a soma de variáveis aleatórias em apenas um dos argumentos do cumulante, na propriedade (v.2) são consideradas somas em todos os argumentos. Embora a propriedade (i) seja sempre válida, a propriedade (v.2) apenas é garantida se os vetores aleatórios considerados forem independentes. Por exemplo, se $M = M' = R = 2$ e os vetores aleatórios \mathbf{a} e \mathbf{b} não forem independentes, aplicações sucessivas das propriedades (i) e (ii) levam à obtenção de

$$\text{cum}[\mathbf{a}_{i_1} + \mathbf{b}_{\ell_1}, \mathbf{a}_{i_2} + \mathbf{b}_{\ell_2}] = \text{cum}[\mathbf{a}_{i_1}, \mathbf{a}_{i_2}] + \text{cum}[\mathbf{a}_{i_1}, \mathbf{b}_{\ell_2}] + \text{cum}[\mathbf{b}_{\ell_1}, \mathbf{a}_{i_2}] + \text{cum}[\mathbf{b}_{\ell_1}, \mathbf{b}_{\ell_2}]$$

e, devido ao aparecimento de cumulantes cruzados dos elementos de \mathbf{a} e \mathbf{b} na expressão resultante, a propriedade (v.2) não é satisfeita no caso geral.

Assim como os momentos, nem sempre os cumulantes existem (MCCULLAGH, 2018). Quando ambos existem, é conveniente expressar os cumulantes em função de momentos das variáveis envolvidas. A seguir, utilizam-se as notações reduzidas de momentos e cumulantes de um vetor aleatório estabelecidas, respectivamente, em (2.21) e (2.25).

Proposição 2.6. *Seja um vetor aleatório $\underline{a} = [a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_N]^\top$ para o qual existem momentos e cumulantes. Os cumulantes de ordens um a quatro desse vetor, respectivamente elencados a seguir, podem ser expressos em função de momentos como¹*

$$\mathcal{C}_{\underline{a}}^i = \mathcal{E}_{\underline{a}}^i, \quad (2.27)$$

$$\mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j} = \mathcal{E}_{\underline{a}}^{i,j} - \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j, \quad (2.28)$$

$$\mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j,k} = \mathcal{E}_{\underline{a}}^{i,j,k} - [3] \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^k + 2 \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^k, \quad (2.29)$$

$$\mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j,k,\ell} = \mathcal{E}_{\underline{a}}^{i,j,k,\ell} - [4] \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^k \mathcal{E}_{\underline{a}}^\ell - [3] \mathcal{E}_{\underline{a}}^{i,j} \mathcal{E}_{\underline{a}}^{k,\ell} + 2 [6] \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^k \mathcal{E}_{\underline{a}}^\ell - 6 \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^k \mathcal{E}_{\underline{a}}^\ell, \quad (2.30)$$

para $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$.

Finalmente, é interessante considerar o caso particular em que os índices dos cumulantes nas expressões da Proposição 2.6 são todos iguais. Nessa situação, são obtidos os cumulantes de ordens um a quatro de uma variável aleatória em função de seus momentos. A seguir, utilizam-se as notações reduzidas de momentos e cumulantes de uma variável aleatória estabelecidas, respectivamente, em (2.22) e (2.26).

Proposição 2.7. *Seja uma variável aleatória a para a qual existem momentos e cumulantes. Os cumulantes de ordens um a quatro dessa variável, respectivamente elencados a seguir, podem ser expressos em função de momentos como*

$$\mathcal{C}_{a,1} = \mathcal{E}_{a,1}, \quad (2.31)$$

$$\mathcal{C}_{a,2} = \mathcal{E}_{a,2} - \mathcal{E}_{a,1}^2, \quad (2.32)$$

$$\mathcal{C}_{a,3} = \mathcal{E}_{a,3} - 3 \mathcal{E}_{a,1} \mathcal{E}_{a,2} + 2 \mathcal{E}_{a,1}^3, \quad (2.33)$$

$$\mathcal{C}_{a,4} = \mathcal{E}_{a,4} - 4 \mathcal{E}_{a,1} \mathcal{E}_{a,3} - 3 \mathcal{E}_{a,2}^2 + 12 \mathcal{E}_{a,1}^2 \mathcal{E}_{a,2} - 6 \mathcal{E}_{a,1}^4. \quad (2.34)$$

As expressões das Proposições 2.6 e 2.7 são úteis não somente do ponto de vista teórico, mas também do ponto de vista prático. Isso pois permitem, a partir de estimativas de momentos, obter estimativas de cumulantes (CARDOSO, 1999; HYVÄRINEN; OJA, 2000).

2.4 Independência e gaussianidade

Nesta seção, por meio da abordagem dos conceitos de independência e gaussianidade, relacionam-se os conteúdos das Seções 2.1, 2.2 e 2.3. Inicia-se pela definição de covariância (PICINBONO, 1993; MCCULLAGH, 2018). Em seguida, define-se uma versão

¹ Nessas expressões, inteiros K entre colchetes e ao lado esquerdo de um termo genérico indicam somas de todos os K possíveis termos obtidos a partir de permutações dos índices do termo. Por exemplo,

$$[3] \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^k = \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^k + \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^k + \mathcal{E}_{\underline{a}}^k \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j$$

e

$$[4] \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^k \mathcal{E}_{\underline{a}}^\ell = \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^k \mathcal{E}_{\underline{a}}^\ell + \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^k \mathcal{E}_{\underline{a}}^\ell + \mathcal{E}_{\underline{a}}^k \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^\ell + \mathcal{E}_{\underline{a}}^\ell \mathcal{E}_{\underline{a}}^i \mathcal{E}_{\underline{a}}^j \mathcal{E}_{\underline{a}}^k.$$

aproximada de independência baseada em cumulantes de ordem dois. Trata-se da não correlação, também denominada descorrelação na literatura (PAPOULIS; PILLAI, 2002).

Definição 2.16. Sejam duas variáveis aleatórias conjuntamente distribuídas \underline{a}_1 e \underline{a}_2 . Suas variâncias são definidas como os cumulantes de ordem dois

$$\text{var}[\underline{a}_1] = \text{cum}[\underline{a}_1, \underline{a}_1] \quad \text{e} \quad \text{var}[\underline{a}_2] = \text{cum}[\underline{a}_2, \underline{a}_2].$$

Se \underline{a}_1 e \underline{a}_2 possuírem variâncias finitas, a covariância entre essas duas variáveis aleatórias é definida como o cumulante de ordem dois $\text{cov}[\underline{a}_1, \underline{a}_2] = \text{cum}[\underline{a}_1, \underline{a}_2]$, que resulta

$$\text{cov}[\underline{a}_1, \underline{a}_2] = \text{E}[\underline{a}_1 \underline{a}_2] - \text{E}[\underline{a}_1] \text{E}[\underline{a}_2]$$

conforme (2.28). ◁

Definição 2.17. As variáveis aleatórias $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N$, com variâncias finitas e $N \geq 2$, são não correlacionadas em pares, ou apenas não correlacionadas, se, e somente se, a covariância entre \underline{a}_i e \underline{a}_ℓ for igual a zero para quaisquer $i, \ell = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq \ell$. Segundo a Definição 2.16, isso equivale a considerar que existe a fatoração

$$\text{E}[\underline{a}_i \underline{a}_\ell] = \text{E}[\underline{a}_i] \text{E}[\underline{a}_\ell]$$

para quaisquer $i, \ell = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq \ell$. ◁

A não correlação também é conhecida como independência de ordem dois (LACOUME; AMBLARD; COMON, 1997). Partindo-se dessas definições, obtém-se a seguinte relação entre os conceitos de independência em pares — abordado na Definição 2.2 — e não correlação.

Proposição 2.8. *Se as variáveis aleatórias $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N$ forem independentes em pares, então essas variáveis são não correlacionadas.*

Demonstração. Veja a Seção A.1 do Apêndice A.

A recíproca da Proposição 2.8, em geral, não é verdadeira — *i.e.*, a não correlação nem sempre implica independência em pares (PAPOULIS; PILLAI, 2002). Consequentemente, a independência em pares é uma condição mais forte do que a não correlação. Recapitulando as relações entre diferentes tipos de independência das Proposições 2.1 e 2.8, tem-se

$$\boxed{\text{independência mútua} \Rightarrow \text{independência em pares} \Rightarrow \text{não correlação.}} \quad (2.35)$$

No caso particular em que são consideradas apenas duas variáveis aleatórias, a independência mútua e a independência em pares são equivalentes. Nessa situação, tem-se

$$\boxed{\text{independência mútua} \Leftrightarrow \text{independência em pares} \Rightarrow \text{não correlação.}} \quad (2.36)$$

A cadeia de implicações (2.35) pode se tornar uma cadeia de equivalências se as variáveis aleatórias consideradas forem conjuntamente gaussianas. Esse caso excepcional é considerado na seguinte proposição.

Proposição 2.9. *Se variáveis aleatórias $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N$ forem conjuntamente gaussianas e não correlacionadas, então essas variáveis são mutuamente independentes.*

Demonstração. Veja a Seção A.1 do Apêndice A.

Até mesmo para o caso de as variáveis aleatórias serem conjuntamente gaussianas e algumas delas serem constantes (*i.e.*, caso conjuntamente gaussiano degenerado), a Proposição 2.9 continua valendo (FELLER, 1968–1971). Recordar-se que, de acordo com a Proposição 2.1, a independência mútua implica a independência em pares. Logo, para o caso conjuntamente gaussiano, a expressão (2.35) pode ser reescrita conforme

$$\boxed{\text{independência mútua} \Leftrightarrow \text{independência em pares} \Leftrightarrow \text{não correlação.}} \quad (2.37)$$

Essa equivalência resultante da Proposição 2.9 é notável; basicamente, para variáveis aleatórias conjuntamente gaussianas, o conceito relativamente forte de independência mútua pode ser substituído pela aproximação de independência baseada em ordem dois, *i.e.*, a não correlação.

O fato de, para variáveis aleatórias conjuntamente gaussianas, a independência equivaler à não correlação, motiva a consideração de uma medida entrópica de informação que permita quantificar a gaussianidade de uma grandeza aleatória. Essa medida, complementar àquelas abordadas na Seção 2.2, é denominada negentropia (COMON, 1994; HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001). Sob certas condições, discutidas em maiores detalhes no Capítulo 7, a negentropia pode ser empregada como medida de independência mútua (COMON, 1994).

Definição 2.18. Seja \mathbf{a} um vetor aleatório qualquer com média $\mathbf{m}_{\mathbf{a}} = E[\mathbf{a}]$ e matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = E[(\mathbf{a} - \mathbf{m}_{\mathbf{a}})(\mathbf{a} - \mathbf{m}_{\mathbf{a}})^T]$. A negentropia de \mathbf{a} é definida como

$$\boxed{J[\mathbf{a}] = K[\mathbf{a}|\mathbf{a}_G],} \quad (2.38)$$

em que $\mathbf{a}_G \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}_{\mathbf{a}}, \mathbf{C}_{\mathbf{a}})$. ◁

Proposição 2.10. *A negentropia satisfaz as seguintes propriedades:*

(i) *Não negatividade: para todo vetor aleatório \mathbf{a} , tem-se*

$$J[\mathbf{a}] \geq 0.$$

(ii) *Valor nulo: a igualdade*

$$J[\mathbf{a}] = 0$$

ocorre se, e somente se, as variáveis aleatórias em \mathbf{a} forem conjuntamente gaussianas.

(iii) *Invariância sob transformação linear: para todo vetor aleatório \mathbf{a} de N elementos e qualquer matriz $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ inversível, tem-se*

$$J[\mathbf{K}\mathbf{a}] = J[\mathbf{a}].$$

(iv) *Relação com a entropia diferencial: para todo vetor aleatório \mathbf{a} de média $\mathbf{m}_{\mathbf{a}}$ e matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$, e sendo $\mathbf{a}_{\mathbf{G}} \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}_{\mathbf{a}}, \mathbf{C}_{\mathbf{a}})$, tem-se*

$$J[\mathbf{a}] = H[\mathbf{a}_{\mathbf{G}}] - H[\mathbf{a}].$$

A propriedade (ii) é uma decorrência direta da condição de valor nulo para a divergência K-L da Proposição 2.3. Segundo essa propriedade, evidencia-se a utilidade da negentropia como um indicador de gaussianidade de um vetor aleatório. A relação explícita entre a independência estatística e a negentropia, entretanto, é melhor esclarecida no Capítulo 7 para o problema de separação cega de fontes.

2.5 Conclusões

Nesse capítulo, introduziram-se conceitos teóricos fundamentais necessários à compreensão do problema de separação cega de fontes por imposição de independência. Nos capítulos seguintes, verifica-se que esses conceitos são relevantes, também, à proposição de soluções para o problema de separação.

Na Seção 2.1, foram apresentadas definições de independência para variáveis aleatórias e processos estocásticos. Essas definições são especialmente úteis nos Capítulos 4 e 5, em que o problema de separação cega de fontes é formulado e questões de separabilidade são abordadas, respectivamente. Na Seção 2.2, foram introduzidas medidas entrópicas de informação, úteis no Capítulo 7 ao abordar o problema de separação sob um ponto de vista de otimização. Na Seção 2.3, cumulantes foram introduzidos como estatísticas úteis na quantificação de independência de variáveis aleatórias. O conteúdo dessa seção, em particular, é amplamente utilizado nos Capítulos 3 e 6.

Embora os conceitos abordados nesse capítulo sejam clássicos na literatura de teoria das probabilidades e separação cega de fontes, as relações entre independência estatística e medidas entrópicas de informação continuam sendo estudadas pela comunidade científica até os dias atuais. Por exemplo, em Baudot et al. (2019) é proposta uma nova caracterização de independência estatística, para o caso multivariado, baseada em uma quantidade finita de medidas entrópicas inspiradas na informação mútua.

Antes de iniciar a abordagem do problema de separação cega de fontes, é conveniente abordar cumulantes sob um outro ponto de vista, complementar àquele considerado na Seção 2.3. Trata-se do assunto do próximo capítulo.

3 ABORDAGEM TENSORIAL PARA REPRESENTAÇÃO DE CUMULANTES

Em problemas multivariados, cumulantes de ordem dois são comumente representados por meio de uma matriz de covariância. A decomposição em autovalores e autovetores dessa matriz permite encontrar, por exemplo, uma transformação linear que descorrelaciona variáveis aleatórias. Dependendo do modelo estatístico considerado para os sinais em cada problema, diferentes aplicações podem decorrer da diagonalização da matriz de covariância. Se a diagonalização dessa matriz permite descorrelacionar variáveis aleatórias, então é razoável imaginar que a aplicação de um princípio análogo a cumulantes de ordem superior possa tornar as variáveis aleatórias mais próximas da independência.

A generalização da matriz de covariância para cumulantes de ordem superior possui, como representação natural, grandezas conhecidas como tensores (MCCULLAGH, 2018; CARDOSO, 1999). Historicamente, tensores foram extensivamente estudados no contexto de álgebra multilinear e geometria diferencial durante décadas (LANDSBERG, 2012), com diversas aplicações em áreas de física (QI; LUO, 2017; QI; CHEN; CHEN, 2018). Neste capítulo, apresenta-se uma abordagem tensorial aplicada à representação de cumulantes. Busca-se, com isso, compreender do ponto de vista conceitual os cumulantes como ferramentas úteis em processamento estatístico de sinais, e também obter representações matriciais consistentes de estatísticas de ordem superior. O objetivo desse capítulo é servir como referência para estudo de tensores e cumulantes, independentemente da aplicação a ser considerada nos capítulos subsequentes.

Na Seção 3.1, fazem-se considerações preliminares acerca de tensores. O objetivo não é adentrar na teoria de álgebra multilinear, a qual é muito extensa e por vezes relativamente complicada, mas sim introduzir conceitos relevantes ao conteúdo do capítulo. Na Seção 3.2, apresentam-se ferramentas necessárias à abordagem tensorial de cumulantes de ordem superior, considerando-se inicialmente o caso mais familiar de cumulantes de ordem dois, *i.e.*, covariâncias. Abordam-se, para esse caso mais conhecido e relativamente simples, conceitos introdutórios necessários às seções seguintes. Na Seção 3.3, estendem-se gradualmente os conceitos previamente introduzidos para cumulantes de ordem três e, na Seção 3.4, para cumulantes de ordem quatro. Por fim, apresentam-se as conclusões do capítulo na Seção 3.5.

3.1 Considerações preliminares sobre tensores

Nesta seção, apresentam-se conceitos preliminares sobre álgebra multilinear que são úteis nas seções seguintes. Na Subseção 3.1.1, apresenta-se uma extensão do produto externo de vetores comumente utilizado em álgebra linear. Essa generalização dá origem a grandezas vetoriais com mais de dois índices, cujas propriedades algébricas justificam sua denominação como tensores (DE LATHAUWER, 1997; LANDSBERG, 2012). Em

seguida, na Subseção 3.1.2, aborda-se a propriedade de multilinearidade do produto externo estendido. Essa propriedade, também compartilhada pelos cumulantes, permite representá-los de maneira tensorial (MCCULLAGH, 2018).

3.1.1 Produto externo estendido

A operação de produto externo de dois vetores quaisquer $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 \in \mathbb{R}^N$ é denotada por $\mathbf{a}_1 \circ \mathbf{a}_2 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ e usualmente definida como $\mathbf{a}_1 \circ \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2^\top$ ou, em termos de seus elementos, conforme

$$[\mathbf{a}_1 \circ \mathbf{a}_2]_{i,j} = [\mathbf{a}_1]_i [\mathbf{a}_2]_j$$

para $i, j = 1, 2, \dots, N$. Da teoria de matrizes (HORN; JOHNSON, 2013), o produto externo de dois vetores corresponde a uma matriz cujos elementos são representáveis com dois índices distintos. Conforme a seguinte definição, o produto externo pode ser estendido para mais de dois vetores (DE LATHAUWER, 1997; LANDSBERG, 2012).

Definição 3.1. O produto externo de M vetores $\mathbf{a}_1 \in \mathbb{R}^{N_1}, \mathbf{a}_2 \in \mathbb{R}^{N_2}, \dots, \mathbf{a}_M \in \mathbb{R}^{N_M}$, denotado por $\mathbf{a}_1 \circ \mathbf{a}_2 \circ \dots \circ \mathbf{a}_M \in \mathbb{R}^{N_1 \times N_2 \times \dots \times N_M}$, é definido elemento a elemento conforme

$$[\mathbf{a}_1 \circ \mathbf{a}_2 \circ \dots \circ \mathbf{a}_M]_{i_1, i_2, \dots, i_M} = [\mathbf{a}_1]_{i_1} [\mathbf{a}_2]_{i_2} \dots [\mathbf{a}_M]_{i_M} \quad (3.1)$$

para $i_k = 1, 2, \dots, N_k$ com $k = 1, 2, \dots, M$. Além disso, é conveniente definir a potência externa de ordem M do vetor $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^N$, denotada por $\mathbf{a}^{\circ M}$, como o produto externo de M cópias desse vetor, *i.e.*,

$$\mathbf{a}^{\circ M} = \underbrace{\mathbf{a} \circ \mathbf{a} \circ \dots \circ \mathbf{a}}_{M \text{ vezes}}. \quad (3.2)$$

◁

O produto externo com $M > 2$ fatores resulta em grandezas vetoriais cujos elementos são representáveis com M índices. No contexto de álgebra multilinear, essas grandezas são denominadas tensores (DE LATHAUWER, 1997). A ordem de um tensor é definida como o número de índices distintos que permitem representar seus elementos (COMON et al., 2008; ZHANG, 2017). No produto externo estendido, o número de fatores é igual ao número de índices necessários para representar o tensor. Portanto, um tensor resultante do produto externo estendido de M vetores possuirá ordem M . Tensores de ordens um e dois podem ser representados como vetores de coordenadas e matrizes, respectivamente. Já um tensor de ordem $M > 2$ pode ser representado por hipermatrizes, *i.e.*, extensões de matrizes em três ou mais dimensões (LANDSBERG, 2012).

Tensores satisfazem as regras usuais da álgebra linear referentes a produto por escalar e soma; sendo assim, compõem um espaço vetorial (LANDSBERG, 2012). Nesse espaço, os tensores se distinguem basicamente entre dois tipos: tensores simples, que admitem representação como apenas um produto externo iterado de vetores — *e.g.*, $\mathbf{a}_1 \circ \mathbf{a}_2$ para

ordem $M = 2$ —, e os demais tensores, oriundos de combinações lineares irreduzíveis de mais de um tensor simples (COMON, 2014). No espaço de tensores de ordem dois, que no caso são representados de maneira equivalente como matrizes, os tensores simples correspondem às matrizes $N \times N$ de posto máximo igual a um, pois essas matrizes podem ser escritas como um único produto externo de dois vetores. Já os demais tensores são matrizes de posto maior do que um, obtidas a partir da combinação linear de mais de um tensor simples e não admitindo representação reduzida por meio de apenas um produto externo.

3.1.2 Propriedade da multilinearidade

O produto externo generalizado, definido em (3.1), é linear em cada um dos vetores mantendo-se os demais constantes. Esse produto é denominado, por esse motivo, um mapeamento multilinear (HOFFMAN; KUNZE, 1971; LANDSBERG, 2012). Disso, decorre uma propriedade importante: a invariância do produto externo estendido a mudanças contrárias de escala nos vetores. Por exemplo, para ordem $M = 3$ e vetores $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3 \in \mathbb{R}^N$ fixos, tem-se pela multilinearidade que

$$(\alpha_1 \mathbf{a}_1) \circ (\alpha_2 \mathbf{a}_2) \circ (\alpha_3 \mathbf{a}_3) = (\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3) \mathbf{a}_1 \circ \mathbf{a}_2 \circ \mathbf{a}_3, \quad (3.3)$$

com $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \in \mathbb{R}$. Se $\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 = 1$, então o produto considerado em (3.3) será sempre igual ao tensor $\mathbf{a}_1 \circ \mathbf{a}_2 \circ \mathbf{a}_3 \in \mathbb{R}^{N \times N \times N}$. Em álgebra multilinear, a palavra tensor é utilizada mais formalmente para designar todas as possíveis M -uplas que resultem em um mesmo produto externo (LANDSBERG, 2012). Nesse sentido, a definição de tensor engloba todas as possíveis sequências de vetores que, sob o ponto de vista de um mapeamento multilinear, são equivalentes. No caso considerado para $M = 3$, o tensor $\mathbf{a}_1 \circ \mathbf{a}_2 \circ \mathbf{a}_3$ representa, na verdade, um conjunto com infinitas triplas; alguns exemplos são dados por

$$(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3), (-2\mathbf{a}_1, 3\mathbf{a}_2, -\mathbf{a}_3/6), (\mathbf{a}_1/2, 7\mathbf{a}_2, 2\mathbf{a}_3/7) \text{ e } (2\mathbf{a}_1, -\mathbf{a}_2, -\mathbf{a}_3/2).$$

Além disso, qualquer mapeamento, desde que seja multilinear, assumirá o mesmo valor para qualquer uma das triplas representadas pelo tensor $\mathbf{a}_1 \circ \mathbf{a}_2 \circ \mathbf{a}_3$. Com base nessa definição mais formal, mapeamentos multilineares podem ser estudados do ponto de vista de mapeamentos lineares que atuam sobre tensores (LANDSBERG, 2012). Podem-se, então, utilizar as ferramentas convencionais de álgebra linear, voltadas ao estudo de transformações lineares em um único vetor, para abordar transformações multilineares sob o “disfarce” de tensores.

Do Capítulo 2, recorda-se que o cumulante de variáveis aleatórias, de acordo com a Proposição 2.5-(i), corresponde a um mapeamento multilinear. É por esse motivo que McCullagh (2018), Cardoso (1999) afirmam que a representação natural para cumulantes é a representação tensorial (CARDOSO, 1999). A partir da multilinearidade dos cumulantes, pode-se determinar como eles se transformam, com exatidão, sob mudanças de

base ou coordenadas. Se adequadamente explorada, essa propriedade torna viável o uso de cumulantes de ordem superior na obtenção de soluções de variados tipos de problemas de processamento estatístico de sinais. Isso vem sendo feito, desde a década de 1990, com o desenvolvimento de técnicas baseadas em estatísticas de ordem superior — especialmente no contexto de problemas inversos (MENDEL, 1991; NIKIAS; PETROPULU, 1993; PICINBONO, 1993).

3.2 Representações para cumulantes de ordem dois

Nesta seção, abordam-se representações para cumulantes de ordem dois. Na Subseção 3.2.1, apresenta-se a definição usual de matriz de covariância. Na Subseção 3.2.2, aborda-se uma representação equivalente por meio de funcional linear. Na Subseção 3.2.3, trata-se das regras de transformação da representação matricial de cumulantes de ordem dois, as quais possuem importantes aplicações práticas.

3.2.1 Matriz de covariância

Seja um vetor aleatório $\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_N]^\top$ de N variáveis aleatórias. Os cumulantes de ordem dois dos elementos de \mathbf{a} são denotados por $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j}$ e definidos conforme (2.28). Esses cumulantes possuem uma notação matricial que provém diretamente da sua definição.

Definição 3.2. A matriz de covariância do vetor aleatório \mathbf{a} é denotada por $\mathbf{C}_{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ e definida elemento a elemento como

$$[\mathbf{C}_{\mathbf{a}}]_{i,j} = \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j} \quad (3.4)$$

para $i, j = 1, 2, \dots, N$. ◁

Quanto a essa definição, destaca-se que:

◊ A matriz de covariância, genericamente expressa como

$$\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2} & \dots & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,N} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2} & \dots & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{N,1} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{N,2} & \dots & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{N,N} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N},$$

representa toda a descrição estatística de ordem dois do vetor aleatório \mathbf{a} .

◊ Devido à invariância à permutação de índices dos cumulantes dada pela Proposição 2.5-(ii), $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ é uma matriz simétrica, *i.e.*,

$$\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = \mathbf{C}_{\mathbf{a}}^\top.$$

- ◇ De acordo com a definição apresentada e utilizando-se (2.28), pode-se exprimir a matriz de covariância de \mathbf{a} genericamente como

$$\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = \mathbb{E}[(\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}]) (\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}])^{\top}]. \quad (3.5)$$

Alternativamente, empregando-se o produto externo definido em (3.1), e utilizando-se a notação de potência externa da Subseção 3.1.1, tem-se

$$\boxed{\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = \mathbb{E}[(\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}]) \circ (\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}])] \triangleq \mathbb{E}[(\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}])^{\circ 2}].} \quad (3.6)$$

O produto externo de dois vetores $(\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}]) \circ (\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}]) = (\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}]) (\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}])^{\top}$ corresponde a um tensor simples de ordem dois. Além disso, se $\mathbb{E}[\mathbf{a}] = \mathbf{0}_N$, obtém-se a expressão usual $\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = \mathbb{E}[\mathbf{a} \circ \mathbf{a}] = \mathbb{E}[\mathbf{a}\mathbf{a}^{\top}]$.

- ◇ A partir de (3.5), pode-se mostrar que $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ é uma matriz positiva semidefinida (PICINBONO, 1993; HAYKIN, 2014). Além disso, pode-se mostrar por construção que qualquer matriz simétrica positiva semidefinida é uma matriz de covariância — *i.e.*, correspondente a alguma distribuição multivariável válida (MCCULLAGH, 2018).
- ◇ Considerando-se a base canônica de vetores do \mathbb{R}^N , composta por N vetores da forma

$$\mathbf{e}_1 = [1 \ 0 \ \cdots \ 0]^{\top}, \quad \mathbf{e}_2 = [0 \ 1 \ \cdots \ 0]^{\top}, \quad \dots, \quad \mathbf{e}_N = [0 \ 0 \ \cdots \ 1]^{\top}, \quad (3.7)$$

a matriz de covariância pode ser representada como

$$\boxed{\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j} \mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j.} \quad (3.8)$$

Nessa expressão, os cumulantes $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j}$ podem ser interpretados como as coordenadas de $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ em uma base do espaço vetorial $\mathbb{R}^{N \times N}$, cuja dimensão é igual a N^2 . Essa base é constituída por N^2 matrizes da forma de produto externo

$$\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j = \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^{\top}$$

para $i, j = 1, 2, \dots, N$. Cada uma dessas matrizes terá elemento igual a um na posição (i, j) e elementos nulos nas demais posições.

Conforme a Equação (3.8), a matriz de covariância pode ser interpretada como uma combinação linear de tensores simples de ordem dois. Por esse motivo, $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ é denominada tensor de cumulantes de ordem dois do vetor aleatório \mathbf{a} (MCCULLAGH, 2018; DE LATHAUWER, 1997).

3.2.2 Funcional linear de ordem dois

Algebricamente, pode ser útil considerar uma representação dos cumulantes de ordem dois em um espaço vetorial alternativo denominado espaço dual. Por definição, esse espaço contém todas as funções escalares lineares (*i.e.*, funcionais ou formas lineares) de vetores pertencentes a um espaço vetorial previamente estipulado (HOFFMAN; KUNZE, 1971). Por exemplo, estipulando-se como espaço vetorial o $\mathbb{R}^{N \times N}$, o espaço dual a ele correspondente contém todas as funções lineares de matrizes $N \times N$ que retornam um valor escalar real. No espaço dual do $\mathbb{R}^{N \times N}$, define-se o funcional linear correspondente à matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ como um mapeamento

$$f_{\mathbf{a},2} : \mathbb{R}^{N \times N} \rightarrow \mathbb{R}$$

dado pela expressão

$$f_{\mathbf{a},2}(\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j} [\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta}]_{i,j} \quad (3.9)$$

para todos $\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^N$. Considerar apenas o valor que o funcional assume para uma escolha específica de matrizes $\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta}$ não permite, necessariamente, descrevê-lo por completo. Para que a descrição estatística de ordem dois do vetor aleatório seja integralmente contemplada pelo funcional linear $f_{\mathbf{a},2}$, é preciso conhecê-lo para o conjunto de todas as possibilidades de matrizes pertencentes a seu domínio. Porém, por se tratar de um funcional linear, é suficiente conhecer o mapeamento apenas para matrizes pertencentes a uma mesma base do $\mathbb{R}^{N \times N}$ (HOFFMAN; KUNZE, 1971).

A seguir, apresentam-se comentários sobre a representação equivalente para cumulantes de ordem dois por meio de funcional:

- ◇ A cada matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ pertencente a $\mathbb{R}^{N \times N}$ associa-se um único funcional linear $f_{\mathbf{a},2}$ pertencente ao espaço dual do $\mathbb{R}^{N \times N}$. Na expressão (3.9), pressupõe-se implicitamente que os vetores genéricos $\boldsymbol{\kappa}$ e $\boldsymbol{\eta}$ correspondem a coordenadas relativas à base utilizada na representação da matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ conforme (3.8).
- ◇ A rigor, a expressão (3.9) permite descrever o mapeamento apenas para matrizes da forma $\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\kappa} \boldsymbol{\eta}^T \in \mathbb{R}^{N \times N}$, cujo posto máximo é igual a um. Porém, devido à linearidade do funcional $f_{\mathbf{a},2}$, essa descrição é suficiente para conhecer o mapeamento sobre matrizes quadradas genéricas de posto qualquer. Para tanto, basta decompor a matriz em questão como uma combinação linear de matrizes de posto máximo igual a um e, em seguida, aplicar a regra de mapeamento a cada componente da decomposição (HOFFMAN; KUNZE, 1971).
- ◇ Apesar de o funcional linear $f_{\mathbf{a},2}$ representar o mapeamento para quaisquer matrizes pertencentes ao $\mathbb{R}^{N \times N}$, pode ser útil verificar os valores que ele assume quando

tomado sobre certas matrizes particulares. Por exemplo, considerando-se $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{e}_i$ e $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{e}_j$ vetores da base canônica do \mathbb{R}^N definida em (3.7), resultam matrizes da forma $\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j$ para $i, j = 1, 2, \dots, N$. Trata-se das matrizes que compõem a base canônica do espaço $\mathbb{R}^{N \times N}$. Calculando-se o funcional para os elementos dessa base, tem-se

$$f_{\mathbf{a},2}(\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j) = \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j}. \quad (3.10)$$

Sendo assim, a partir do funcional é possível obter individualmente todos os cumulantes de ordem dois dos elementos do vetor aleatório \mathbf{a} .

- ◇ Analogamente à matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$, a expressão (3.9) do funcional $f_{\mathbf{a},2}$ também pode ser interpretada como uma decomposição em base de vetores. Especificamente, os cumulantes $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j}$ podem ser entendidos como as coordenadas de $f_{\mathbf{a},2}$ na base composta por N^2 funcionais da forma

$$\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \mapsto [\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta}]_{i,j} = \kappa_i \eta_j.$$

A base constituída por esses funcionais é conhecida, na literatura, como base dual (HOFFMAN; KUNZE, 1971). Assim como o espaço vetorial $\mathbb{R}^{N \times N}$, seu dual possui dimensão igual a N^2 . Além disso, as coordenadas da matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ e do funcional linear $f_{\mathbf{a},2}$ em relação às respectivas bases dos espaços vetoriais a que pertencem são iguais. Há, portanto, uma equivalência entre as representações por matriz de covariância e funcional linear, no sentido de que ambas contemplam a descrição estatística de ordem dois de \mathbf{a} por completo.

Exemplo 3.1. Considera-se um vetor aleatório $\mathbf{a} = [a_1 \ a_2]^T$ de $N = 2$ elementos. Sua matriz de covariância é dada genericamente por

$$\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}.$$

Conforme (3.8), essa matriz pode também ser expressa como

$$\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1} \mathbf{e}_1 \circ \mathbf{e}_1 + \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2} \mathbf{e}_1 \circ \mathbf{e}_2 + \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1} \mathbf{e}_2 \circ \mathbf{e}_1 + \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2} \mathbf{e}_2 \circ \mathbf{e}_2.$$

O espaço dual do $\mathbb{R}^{2 \times 2}$ contém todos os funcionais lineares que tomam uma matriz 2×2 e retornam um escalar. Nesse espaço, o funcional linear correspondente à matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ é obtido particularizando-se (3.9) para $N = 2$, o que resulta

$$f_{\mathbf{a},2} \left(\begin{bmatrix} \kappa_1 \eta_1 & \kappa_1 \eta_2 \\ \kappa_2 \eta_1 & \kappa_2 \eta_2 \end{bmatrix} \right) = \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1} \kappa_1 \eta_1 + \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2} \kappa_1 \eta_2 + \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1} \kappa_2 \eta_1 + \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2} \kappa_2 \eta_2 \quad (3.11)$$

para todos $\kappa_1, \kappa_2, \eta_1, \eta_2 \in \mathbb{R}$. O funcional $f_{\mathbf{a},2}$ representa uma regra geral de mapeamento de uma matriz 2×2 qualquer para um escalar que, por sua vez, contém a informação dos cumulantes de ordem dois do vetor aleatório considerado.

Particularmente, todos os cumulantes de ordem dois do vetor aleatório \mathbf{a} podem ser individualmente obtidos a partir do funcional $f_{\mathbf{a},2}$. Para tanto, calculam-se os valores assumidos pelo funcional em matrizes específicas de seu domínio. Conforme (3.10), ao considerar vetores $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{e}_i$ e $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{e}_j$ da base canônica do \mathbb{R}^2 para $i, j = 1, 2$, obtêm-se

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{a},2}(\mathbf{e}_1 \circ \mathbf{e}_1) &= f_{\mathbf{a},2}\left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\right) = \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1}, & f_{\mathbf{a},2}(\mathbf{e}_1 \circ \mathbf{e}_2) &= f_{\mathbf{a},2}\left(\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\right) = \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2}, \\ f_{\mathbf{a},2}(\mathbf{e}_2 \circ \mathbf{e}_1) &= f_{\mathbf{a},2}\left(\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\right) = \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1} & \text{e } f_{\mathbf{a},2}(\mathbf{e}_2 \circ \mathbf{e}_2) &= f_{\mathbf{a},2}\left(\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\right) = \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2}. \end{aligned}$$

Conhecer os valores que o funcional linear assume para todas as matrizes da forma $\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j$ permite determinar todos os coeficientes de $f_{\mathbf{a},2}$ em (3.11). Isso, por sua vez, equivale à obtenção da regra geral de mapeamento $f_{\mathbf{a},2}$ para uma matriz qualquer do $\mathbb{R}^{2 \times 2}$, bastando considerar a decomposição em relação à base canônica dessa matriz. \triangleleft

3.2.3 Mudança de base e diagonalização em ordem dois

A fim de aplicar cumulantes de ordem dois a problemas práticos, é importante compreender o efeito que mudanças de base possuem nas representações desses cumulantes. Inicia-se por um resultado conhecido de variáveis aleatórias (MCCULLAGH, 2018; PAPOULIS; PILLAI, 2002).

Proposição 3.1. *Seja \mathbf{a} um vetor aleatório com matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ e seja o vetor aleatório dado por $\mathbf{b} = \mathbf{G}\mathbf{a}$ com $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{N \times N}$. A matriz de covariância do vetor \mathbf{b} , denotada por $\mathbf{C}_{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, pode ser expressa como*

$$\boxed{\mathbf{C}_{\mathbf{b}} = \mathbf{G}\mathbf{C}_{\mathbf{a}}\mathbf{G}^T}, \quad (3.12)$$

ou dada em função de seus elementos conforme

$$[\mathbf{C}_{\mathbf{b}}]_{i,j} = \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N [\mathbf{C}_{\mathbf{a}}]_{p,q} g_{i,p} g_{j,q} \quad (3.13)$$

para $i, j = 1, 2, \dots, N$, em que $g_{i,j} = [\mathbf{G}]_{i,j}$.

Demonstração. Decorre da propriedade de multilinearidade dos cumulantes conforme a Proposição 2.5-(i). Particularmente, (3.12) é obtida diretamente ao aplicar (3.5) ao vetor aleatório \mathbf{b} . \square

Basicamente, a expressão (3.12) consiste na relação entre matrizes de covariância de vetores aleatórios distintos e relacionados por uma transformação linear. Essa expressão, porém, pode ser compreendida de outra forma. Sob certas condições, pode-se interpretar $\mathbf{C}_{\mathbf{b}}$ como uma versão alternativa da matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$, agora representada em

relação a uma nova base do \mathbb{R}^N . Segundo essa interpretação, ambas matrizes de covariância representam as estatísticas de ordem dois de um mesmo vetor aleatório, só que em relação a sistemas de coordenadas distintos (MCCULLAGH, 2018; COMON, 2014). Podem-se, então, compreender ambas matrizes como pseudônimas de um único tensor, livre de coordenadas, que representa as estatísticas de ordem dois do vetor aleatório \mathbf{a} (LANDSBERG, 2012). Ao representar esse tensor em coordenadas, é possível obter tanto $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ quanto $\mathbf{C}_{\mathbf{b}}$, dependendo da base considerada.

Em diversas aplicações, muitas vezes é necessário obter uma transformação linear que permita tornar não correlacionados os elementos de um determinado vetor aleatório. Em outras palavras, supondo que \mathbf{a} é um vetor aleatório de elementos quaisquer com matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, deseja-se obter $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ tal que os elementos de $\mathbf{b} = \mathbf{G}\mathbf{a}$ sejam não correlacionados. Nesse caso, $\mathbf{C}_{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é uma matriz diagonal. Felizmente, a teoria de matrizes garante a existência dessa transformação linear: as matrizes de covariância, por serem simétricas, são ortogonalmente diagonalizáveis com autovalores reais (GOLUB; VAN LOAN, 2013). Logo, a matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ pode ser sempre decomposta em autovalores e autovetores conforme

$$\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = \mathbf{\Theta}\mathbf{\Lambda}\mathbf{\Theta}^T, \quad (3.14)$$

com $\mathbf{\Theta} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ortogonal, *i.e.*, $\mathbf{\Theta}^{-1} = \mathbf{\Theta}^T$ e $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ diagonal. Substituindo-se essa expressão em (3.12), a transformação linear dada por $\mathbf{G} = \mathbf{\Theta}^T$ resulta na matriz de covariância diagonal $\mathbf{C}_{\mathbf{b}} = \mathbf{\Lambda}$.

Exemplo 3.2. Seja o vetor aleatório \mathbf{a} , com $N = 2$ elementos, cuja matriz de covariância é dada por

$$\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix}.$$

Deseja-se obter uma transformação linear $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ tal que os elementos do vetor aleatório $\mathbf{b} = \mathbf{G}\mathbf{a}$ sejam não correlacionados. Inicialmente, recorda-se que a matriz $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ é simétrica. Logo, sua decomposição em autovalores e autovetores pode ser diretamente obtida e é dada por (3.14) com $\mathbf{\Theta} = [\boldsymbol{\theta}_1 \ \boldsymbol{\theta}_2] \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ ortogonal e $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2) \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, sendo

$$\boldsymbol{\theta}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}[1 \ 1]^T, \quad \lambda_1 = 5, \quad \boldsymbol{\theta}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}[1 \ -1]^T \quad \text{e} \quad \lambda_2 = 1.$$

Utilizando-se a notação por produto externo, pode-se representar essa decomposição como

$$\mathbf{C}_{\mathbf{a}} = \lambda_1 \boldsymbol{\theta}_1 \circ \boldsymbol{\theta}_1 + \lambda_2 \boldsymbol{\theta}_2 \circ \boldsymbol{\theta}_2.$$

Escolhendo-se $\mathbf{G} = \mathbf{\Theta}^T$, a matriz de covariância de \mathbf{b} pode ser obtida a partir de (3.12) conforme

$$\mathbf{C}_{\mathbf{b}} = \mathbf{\Theta}^T \mathbf{C}_{\mathbf{a}} \mathbf{\Theta} = \mathbf{\Theta}^T \mathbf{\Theta} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Theta}^T \mathbf{\Theta} = \mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Logo, após a transformação aplicada a \mathbf{a} , as variáveis de \mathbf{b} resultam não correlacionadas. \triangleleft

Conforme (3.12) e o Exemplo 3.2, destaca-se que a notação matricial é muito conveniente para representar cumulantes de ordem dois de vetores aleatórios relacionados por uma transformação linear. Além disso, a existência e a unicidade da diagonalização de uma matriz de covariância, conforme (3.14), permitem obter diretamente a transformação que descorrelaciona variáveis aleatórias. Muitas dessas facilidades encontradas ao lidar com cumulantes de ordem dois, porém, não necessariamente ocorrem para cumulantes de ordem superior (MCCULLAGH, 2018; DE LATHAUWER, 1997). Diferenças significativas são encontradas até mesmo para o caso de ordem três, o qual é abordado a seguir.

3.3 Representações para cumulantes de ordem três

Nesta seção, abordam-se representações para cumulantes de ordem três. Inicia-se pela abordagem tensorial na Subseção 3.3.1, seguida de uma representação equivalente por funcional linear na Subseção 3.3.2. A partir dessa representação equivalente, na Subseção 3.3.3 obtém-se uma representação matricial para cumulantes de ordem três, denominada matriz de tricovariância. Trata-se de uma representação que é útil, principalmente, à extensão dos conceitos para cumulantes de ordem quatro feita na Seção 3.4. Finalmente, abordam-se na Subseção 3.3.4 as regras de transformação que os tensores de cumulantes de ordem três satisfazem, bem como o importante problema de diagonalização desses tensores.

3.3.1 Representação tensorial em ordem três

Conforme abordado na Seção 2.3, os cumulantes de ordem três dos elementos de \mathbf{a} são denotados por $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k}$ e definidos conforme (2.29). Devido à existência de três índices livres nesses cumulantes e à sua multilinearidade, sua representação natural é dada por tensores de ordem três.

Definição 3.3. O tensor de cumulantes de ordem três do vetor aleatório \mathbf{a} é denotado por $\mathcal{C}_{\mathbf{a},3} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N}$ e definido elemento a elemento como

$$[\mathcal{C}_{\mathbf{a},3}]_{i,j,k} = \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k} \quad (3.15)$$

para $i, j, k = 1, 2, \dots, N$. ◁

O tensor $\mathcal{C}_{\mathbf{a},3}$ pode ser interpretado como uma “matriz tridimensional”, *i.e.*, como uma sequência de matrizes usuais dispostas em camadas ao longo de uma terceira dimensão. Genericamente, o tensor de cumulantes de ordem três pode ser expresso em função de momentos como (DOMINO; GAWRON; PAWELA, 2018)

$$\boxed{\mathcal{C}_{\mathbf{a},3} = \mathbb{E}[(\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}])^{\circ 3}]}, \quad (3.16)$$

que pode ser interpretada como uma extensão da expressão (3.6) relativa à matriz de covariância.

Exemplo 3.3. Para um vetor aleatório $\underline{a} = [a_1 \ a_2]^T$ de $N = 2$ elementos, o tensor de cumulantes de ordem três $\mathcal{C}_{\underline{a},3} \in \mathbb{R}^{2 \times 2 \times 2}$ possui $N^3 = 8$ elementos. Na Figura 1, apresenta-se uma possível ilustração da disposição desses elementos, em que consideram-se direções ortogonais para índices distintos. A linha pontilhada central do cubo liga os elementos da diagonal principal do tensor. Esses elementos correspondem a cumulantes com todos os três índices iguais — denominados autocumulantes. Os demais cumulantes que compõem o tensor são denominados cumulantes cruzados. Devido à propriedade de permutação de índices de cumulantes reais conforme a Proposição 2.5-(ii), muitos dos cumulantes cruzados serão iguais entre si. A título de exemplo, os elementos com fundo cinza indicam um dos possíveis conjuntos de cumulantes cruzados que, devido à simetria, são numericamente iguais. Trata-se dos cumulantes $\mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,2}$, $\mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,2}$ e $\mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,1}$. Em virtude dessa e das demais igualdades entre cumulantes cruzados, $\mathcal{C}_{\underline{a},3}$ é denominado tensor simétrico. Essa propriedade se mantém para $N > 2$, bem como para tensores de cumulantes de ordens maiores do que três (MCCULLAGH, 2018; COMON, 2014).

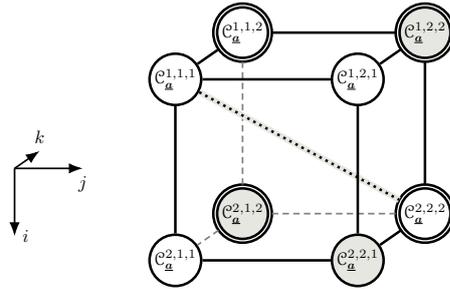


Figura 1 – Disposição dos elementos do tensor de cumulantes de ordem três $\mathcal{C}_{\underline{a},3}$ para $N = 2$.

Fonte: autoria própria.

É possível fatiar $\mathcal{C}_{\underline{a},3}$ de diferentes maneiras para obter tensores de ordem inferior a três. Denotando-se por $[\mathcal{C}_{\underline{a},3}]_{:, :, k}$ as fatias obtidas fixando-se apenas o último índice dos elementos do tensor, resultam os tensores de ordem dois, *i.e.*, matrizes

$$[\mathcal{C}_{\underline{a},3}]_{:, :, 1} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,1} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,1} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,1} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,1} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad [\mathcal{C}_{\underline{a},3}]_{:, :, 2} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,2} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,2} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,2} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,2} \end{bmatrix}.$$

Trata-se das fatias correspondentes aos elementos de contorno simples e duplo da Figura 1, respectivamente. Um outro exemplo seria a obtenção de fatias horizontais, fixando-se apenas o primeiro índice de $\mathcal{C}_{\underline{a},3}$ conforme

$$[\mathcal{C}_{\underline{a},3}]_{1, :, :} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,1} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,1} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,2} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,2} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad [\mathcal{C}_{\underline{a},3}]_{2, :, :} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,1} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,1} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,2} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,2} \end{bmatrix}.$$

Além disso, fibras de $\mathcal{C}_{\underline{a},3}$ podem ser obtidas deixando-se apenas um índice livre no tensor. Por exemplo, como fibras verticais de $\mathcal{C}_{\underline{a},3}$ resultam

$$[\mathcal{C}_{\underline{a},3}]_{:, 1, 1} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,1} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,1} \end{bmatrix}, \quad [\mathcal{C}_{\underline{a},3}]_{:, 1, 2} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,2} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,2} \end{bmatrix}, \quad [\mathcal{C}_{\underline{a},3}]_{:, 2, 1} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,1} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,1} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad [\mathcal{C}_{\underline{a},3}]_{:, 2, 2} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,2} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,2} \end{bmatrix},$$

que consistem em tensores de ordem um, *i.e.*, vetores. \triangleleft

A seguir, representa-se o tensor de cumulantes de ordem três de maneira análoga à representação (3.8) para a matriz de covariância. Considerando-se a base canônica de vetores do \mathbb{R}^N dada por (3.7) e a definição do produto externo estendido (3.1) para ordem $M = 3$, o tensor de cumulantes de ordem três pode ser expresso como

$$\mathbf{C}_{\mathbf{a},3} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k} \mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j \circ \mathbf{e}_k. \quad (3.17)$$

Os cumulantes $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k}$ podem ser interpretados como as coordenadas de $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$ na base composta por N^3 tensores simples de ordem três da forma

$$\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j \circ \mathbf{e}_k,$$

com elemento igual a um na posição (i, j, k) e elementos nulos nas demais posições. Trata-se novamente de uma interpretação útil, visto que o conjunto de tensores de ordem três $\mathbb{R}^{N \times N \times N}$ constitui um espaço vetorial de dimensão N^3 (LANDSBERG, 2012; COMON, 2014).

3.3.2 Funcional linear de ordem três

Analogamente ao caso de ordem dois, também pode-se associar ao tensor $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$ um elemento do espaço dual do $\mathbb{R}^{N \times N \times N}$, *i.e.*, um funcional linear tomado sobre tensores de ordem três. No espaço dual, define-se o funcional linear correspondente ao tensor $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$ como um mapeamento

$$f_{\mathbf{a},3} : \mathbb{R}^{N \times N \times N} \rightarrow \mathbb{R}$$

dado pela expressão

$$f_{\mathbf{a},3}(\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k} [\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma}]_{i,j,k} \quad (3.18)$$

para todos $\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{R}^N$. Para que a descrição estatística de ordem três do vetor aleatório seja integralmente contemplada pelo funcional linear $f_{\mathbf{a},3}$, é preciso conhecê-lo para o conjunto de todas as possibilidades de tensores simples $\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma}$ pertencentes a seu domínio. Porém, por se tratar de um funcional linear, é suficiente conhecer o mapeamento apenas para tensores simples pertencentes a uma mesma base do $\mathbb{R}^{N \times N \times N}$ (HOFFMAN; KUNZE, 1971).

A seguir, apresentam-se comentários a respeito da representação equivalente para cumulantes de ordem três por meio de funcional:

- ◇ A cada tensor de cumulantes de ordem três $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$ pertencente ao $\mathbb{R}^{N \times N \times N}$ associa-se um único funcional linear $f_{\mathbf{a},3}$ pertencente ao espaço dual do $\mathbb{R}^{N \times N \times N}$. Na expressão (3.18), pressupõe-se implicitamente que os vetores genéricos $\boldsymbol{\kappa}$, $\boldsymbol{\eta}$ e $\boldsymbol{\gamma}$ correspondem a coordenadas relativas à base utilizada na representação do tensor de cumulantes $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$ conforme (3.17).

- ◇ Em uma primeira análise, a expressão (3.18) permite descrever o mapeamento apenas para tensores simples da forma $\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N}$. Porém, devido à linearidade do funcional $f_{\underline{a},3}$, essa descrição é suficiente para conhecer o mapeamento sobre tensores quaisquer. Para tanto, basta decompor o tensor em questão como uma combinação linear de tensores simples e, em seguida, aplicar a regra de mapeamento a cada componente da decomposição (HOFFMAN; KUNZE, 1971).
- ◇ Considerando-se o caso particular em que $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{e}_i$, $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{e}_j$ e $\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{e}_k$ são vetores da base canônica do \mathbb{R}^N definida em (3.7), resultam tensores simples da forma $\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j \circ \mathbf{e}_k$ para $i, j, k = 1, 2, \dots, N$. Por sua vez, esses tensores compõem a base canônica do espaço $\mathbb{R}^{N \times N \times N}$. Calculando-se o funcional para os elementos dessa base, tem-se

$$f_{\underline{a},3}(\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j \circ \mathbf{e}_k) = \mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j,k}.$$

Sendo assim, a partir do funcional é possível obter individualmente todos os cumulantes de ordem três dos elementos do vetor aleatório \underline{a} .

- ◇ Analogamente ao tensor de cumulantes de ordem três $\mathcal{C}_{\underline{a},3}$, a expressão (3.18) do funcional $f_{\underline{a},3}$ também pode ser interpretada como uma decomposição em base de vetores. Especificamente, os cumulantes $\mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j,k}$ podem ser entendidos como as coordenadas de $f_{\underline{a},3}$ na base dual composta por N^3 funcionais da forma

$$\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma} \mapsto [\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma}]_{i,j,k} = \kappa_i \eta_j \gamma_k.$$

Assim como o espaço vetorial $\mathbb{R}^{N \times N \times N}$, seu dual possui dimensão igual a N^3 . Além disso, as coordenadas do tensor de cumulantes de ordem três $\mathcal{C}_{\underline{a},3}$ e do funcional linear $f_{\underline{a},3}$ em relação às respectivas bases dos espaços vetoriais a que pertencem são iguais. Há, portanto, uma equivalência entre as representações por tensor de cumulantes de ordem três e funcional linear, no sentido de que ambas contemplam a descrição estatística de ordem três de \underline{a} por completo.

A partir do funcional linear da Equação (3.18), que consiste em uma representação equivalente do tensor de cumulantes $\mathcal{C}_{\underline{a},3}$, pode-se obter uma representação matricial para cumulantes de ordem três. Essa representação, abordada a seguir, pode ser mais conveniente tanto do ponto de vista teórico quanto do ponto de vista prático.

3.3.3 Matriz de tricovariância

A fim de obter uma representação matricial completa para os cumulantes de ordem três de um vetor aleatório, considera-se inicialmente a representação equivalente de (3.18). A expressão do funcional linear pode ser expressa como uma forma bilinear em dois dos três vetores $\boldsymbol{\kappa}$, $\boldsymbol{\eta}$ e $\boldsymbol{\gamma}$. Por exemplo, expandindo-se a expressão do funcional, tem-se

$$f_{\underline{a},3}(\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\sum_{k=1}^N \mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j,k} \gamma_k \right) \kappa_i \eta_j = \boldsymbol{\kappa}^T \left(\sum_{k=1}^N [\mathcal{C}_{\underline{a},3}]_{:,j,k} \gamma_k \right) \boldsymbol{\eta}$$

chegando-se à forma bilinear particular em $\boldsymbol{\kappa}$ e $\boldsymbol{\eta}$, e parametrizada por $\boldsymbol{\gamma}$, dada por

$$\tilde{f}_{\mathbf{a},3}(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\eta}; \boldsymbol{\gamma}) = \boldsymbol{\kappa}^\top \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{T}_{\mathbf{a}}^k \gamma_k \right) \boldsymbol{\eta} \quad (3.19)$$

para todos $\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^N$, em que

$$\mathbf{T}_{\mathbf{a}}^k = [\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}]_{\cdot, \cdot, k} \quad (3.20)$$

denota a matriz correspondente a uma fatia do tensor $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$. Ao expressar a forma bilinear em outros pares de vetores que não $(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\eta})$, formas equivalentes são obtidas devido à propriedade de invariância à permutação de índices dos cumulantes dada pela Proposição 2.5-(ii). Observa-se, também, a semelhança entre a forma obtida em (3.19) e a expressão do funcional linear para a matriz de covariância dado por (3.9). Aqui, em vez de uma única matriz, a forma bilinear depende de uma combinação linear genérica de fatias do tensor $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$ fixando-se seu último índice. A matriz de tricovariância é definida como a matriz correspondente à forma bilinear (3.19). Recordando-se que $\gamma_k = [\boldsymbol{\gamma}]_k$, tem-se a seguinte definição.

Definição 3.4. A matriz de tricovariância do vetor aleatório \mathbf{a} , denotada por $\mathbf{T}_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\gamma}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$, é definida como

$$\mathbf{T}_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\gamma}) = \sum_{k=1}^N \mathbf{T}_{\mathbf{a}}^k [\boldsymbol{\gamma}]_k, \quad (3.21)$$

em que $\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{R}^N$ é um vetor de pesos. ◁

Na definição apresentada, há uma dependência da matriz de tricovariância com a escolha feita para o vetor de pesos $\boldsymbol{\gamma}$. Isso sugere que há um conjunto de formas bilineares a serem consideradas para assegurar a completude na representação do funcional linear (3.18). Assim, a fim de levar em conta o conjunto de formas bilineares — que de fato consiste na representação equivalente ao tensor de cumulantes $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$ —, considera-se no lugar de apenas uma única matriz, o mapeamento

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{\mathbf{a}} : \mathbb{R}^N &\rightarrow \mathbb{R}^{N \times N} \\ \boldsymbol{\gamma} &\mapsto \mathbf{T}_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\gamma}) \end{aligned}$$

para todo $\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{R}^N$ vetor de pesos genérico. Na Equação (3.18), destaca-se que o vetor $\boldsymbol{\gamma}$ tem papel secundário de variável livre do funcional linear. Porém, na interpretação de (3.19) como forma bilinear, os elementos de $\boldsymbol{\gamma}$ têm o papel de ponderação das fatias do tensor de cumulantes na composição da matriz associada à forma bilinear. Nesse caso, portanto, os elementos do vetor $\boldsymbol{\gamma}$ possuem papel relevante na descrição da forma bilinear resultante. O mapeamento $\mathbf{T}_{\mathbf{a}}$ é aqui denominado transformação de tricovariância de \mathbf{a} . Em decorrência da linearidade do funcional $f_{\mathbf{a},3}$, tem-se que $\mathbf{T}_{\mathbf{a}}$ é linear. Além disso, em seu espaço imagem haverá matrizes, cuja manipulação e tratamento algébrico são em geral mais simples do que para um tensor de ordem três como $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$.

Exemplo 3.4. Para um vetor aleatório $\mathbf{a} = [a_1 \ a_2]^\top$ de $N = 2$ elementos, a matriz de tricovariância conforme (3.21) resulta

$$\mathbf{T}_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\gamma}) = \mathbf{T}_{\mathbf{a}}^1[\boldsymbol{\gamma}]_1 + \mathbf{T}_{\mathbf{a}}^2[\boldsymbol{\gamma}]_2 \in \mathbb{R}^{2 \times 2}, \quad (3.22)$$

em que $\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{R}^2$ é o vetor de pesos. A liberdade na escolha do vetor de pesos implica a possibilidade de obtenção de diferentes matrizes de tricovariância pertencentes ao espaço imagem da transformação $\mathbf{T}_{\mathbf{a}}$. Por exemplo, utilizando-se (3.22) para calcular a matriz de tricovariância nos vetores da base canônica do \mathbb{R}^2 e a definição das fatias $\mathbf{T}_{\mathbf{a}}^k$ conforme (3.20), obtêm-se

$$\mathbf{T}_{\mathbf{a}}(\mathbf{e}_1) = \mathbf{T}_{\mathbf{a}} \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right) = \mathbf{T}_{\mathbf{a}}^1 = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1,1} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2,1} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1,1} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2,1} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{T}_{\mathbf{a}}(\mathbf{e}_2) = \mathbf{T}_{\mathbf{a}} \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right) = \mathbf{T}_{\mathbf{a}}^2 = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1,2} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2,2} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1,2} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2,2} \end{bmatrix}.$$

Todos os cumulantes de ordem três de \mathbf{a} são contemplados pelos elementos dessas matrizes, as quais são ponderadas e somadas para a obtenção da matriz de tricovariância. \triangleleft

A partir da escolha de um vetor de pesos particular $\boldsymbol{\gamma}$, na matriz de tricovariância correspondente $\mathbf{T}_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\gamma})$ estará refletida apenas uma parte da descrição estatística de ordem três do vetor aleatório \mathbf{a} . A escolha de $\boldsymbol{\gamma}$ pode ser crítica na aplicabilidade da matriz $\mathbf{T}_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\gamma})$ a um determinado problema prático. Basicamente, essa escolha deve ser feita a fim de que a matriz de tricovariância obtida descreva satisfatoriamente as estatísticas de ordem três do vetor \mathbf{a} necessárias à resolução do problema dado. Dependendo da aplicação considerada, pode ou não ser suficiente considerar apenas um elemento do espaço imagem da transformação $\mathbf{T}_{\mathbf{a}}$, *i.e.*, apenas uma matriz de tricovariância. No entanto, ressalta-se que no caso geral é a transformação de tricovariância $\mathbf{T}_{\mathbf{a}}$ que representa a descrição completa em termos de cumulantes de ordem três do vetor aleatório \mathbf{a} — e não apenas uma matriz de tricovariância específica $\mathbf{T}_{\mathbf{a}}(\boldsymbol{\gamma})$ para um vetor de pesos $\boldsymbol{\gamma}$ particular (HOFFMAN; KUNZE, 1971; LANDSBERG, 2012). Trata-se da completude da representação do tensor $\mathcal{C}_{\mathbf{a},3}$ por matrizes de tricovariância obtidas a partir do mapeamento $\mathbf{T}_{\mathbf{a}}$.

3.3.4 Diagonalização do tensor de cumulantes de ordem três

Diferentemente do caso de ordem dois, a diagonalização de um tensor de ordem três não é evidente (DE LATHAUWER, 1997; COMON et al., 2008). A fim de compreender melhor os problemas envolvidos, inicia-se apresentando o efeito que uma transformação linear possui sobre o tensor de cumulantes de ordem três de um vetor aleatório (MCCULLAGH, 2018).

Proposição 3.2. *Seja \mathbf{a} um vetor aleatório com tensor de cumulantes de ordem três $\mathcal{C}_{\mathbf{a},3} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N}$ e seja o vetor aleatório dado por $\mathbf{b} = \mathbf{G}\mathbf{a}$ com $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{N \times N}$. O tensor de*

cumulantes de ordem três de \mathbf{b} , denotado por $\mathbf{C}_{\mathbf{b},3} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N}$, pode ser expresso elemento a elemento como

$$\boxed{[\mathbf{C}_{\mathbf{b},3}]_{i,j,k} = \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N \sum_{r=1}^N [\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}]_{p,q,r} g_{i,p} g_{j,q} g_{k,r}} \quad (3.23)$$

para $i, j, k = 1, 2, \dots, N$, em que $g_{i,j} = [\mathbf{G}]_{i,j}$.

Demonstração. Resulta da propriedade de multilinearidade dos cumulantes conforme a Proposição 2.5-(i); (3.23) pode ser compreendida como uma extensão de (3.13) para o caso de ordem três. \square

Quanto à proposição apresentada, destaca-se que a expressão (3.23) pode ser colocada de maneira tensorial. Denotando-se por $\mathbf{g}_p \in \mathbb{R}^N$ a p -ésima coluna de \mathbf{G} para $p = 1, 2, \dots, N$, tem-se

$$\mathbf{C}_{\mathbf{b},3} = \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N \sum_{r=1}^N [\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}]_{p,q,r} \mathbf{g}_p \circ \mathbf{g}_q \circ \mathbf{g}_r. \quad (3.24)$$

Agora, considera-se a obtenção de uma transformação linear que permita tornar não correlacionados, em ordem três, os elementos de um determinado vetor aleatório. Em outras palavras, supondo que \mathbf{a} é um vetor aleatório de elementos quaisquer com tensor de cumulantes $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N}$, deseja-se obter $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ tal que os elementos de $\mathbf{b} = \mathbf{G}\mathbf{a}$ sejam não correlacionados em ordem três. Nesse caso, tem-se que $\mathbf{C}_{\mathbf{b},3} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N}$ será um tensor diagonal dado elemento a elemento por

$$[\mathbf{C}_{\mathbf{b},3}]_{i,j,k} = \mathcal{C}_{\mathbf{b},3} \delta_{i,j,k} \quad (3.25)$$

para $i, j, k = 1, 2, \dots, N$, em que $\delta_{i,j,k}$ é igual a um se $i = j = k$ e igual a zero caso contrário (MCCULLAGH, 2018). Na diagonal principal desse tensor ficam os autocumulantes de ordem três dos elementos de \mathbf{b} . Substituindo-se (3.25) na representação de (3.17), o tensor diagonal de ordem três $\mathbf{C}_{\mathbf{b},3}$ pode ser expresso de maneira simplificada como

$$\boxed{\mathbf{C}_{\mathbf{b},3} = \sum_{i=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{b},3} \mathbf{e}_i^{\circ 3}}. \quad (3.26)$$

Analogamente ao caso de ordem dois, a obtenção de $\mathbf{b} = \mathbf{G}\mathbf{a}$ com elementos não correlacionados em ordem três está condicionada à existência de \mathbf{G} tal que, na expressão (3.24), o tensor de cumulantes $\mathbf{C}_{\mathbf{b},3}$ resulte diagonal. Se essa matriz existir, ela poderá ser obtida a partir de uma diagonalização do tensor $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$, que, em geral, é um tensor cheio. Como $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$ é um tensor simétrico, sua diagonalização pode ser expressa como

$$\mathbf{C}_{\mathbf{a},3} = \sum_{i=1}^N \lambda_i \bar{\mathbf{g}}_i^{\circ 3}, \quad (3.27)$$

em que $\lambda_i \in \mathbb{R}$ para $i = 1, 2, \dots, N$ e $\bar{\mathbf{G}} = [\bar{\mathbf{g}}_1 \ \bar{\mathbf{g}}_2 \ \dots \ \bar{\mathbf{g}}_N] \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é inversível (COMMON et al., 2008).

Se a decomposição (3.27) existir, a escolha de $\mathbf{G} = \overline{\mathbf{G}}^{-1}$ garantirá a não correlação em ordem três dos elementos de \mathbf{b} . Entretanto, para um tensor de ordem três simétrico qualquer, a existência da decomposição é apenas garantida para $N = 2$ (COMMON et al., 2008). Nesse caso, a decomposição pode ser obtida no domínio do funcional linear, de acordo com o método baseado em polinômios descrito por Comon (1996). Para $N > 2$, como não há resultado teórico que garanta a existência da decomposição (COMMON et al., 2008), é usual realizar algum procedimento numérico aproximado, como o algoritmo dos mínimos quadrados alternados (ALS, do inglês *alternating least squares*) (COMMON, 2014). Outro fator limitante é que, ao contrário do caso matricial, decomposições de tensores como (3.27), mesmo que existam, podem não ser únicas (COMMON et al., 2008). Isso pode representar uma desvantagem, tendo-se em vista a necessidade de unicidade em problemas de estimação cega, por exemplo.

Exemplo 3.5. Retornando ao caso do Exemplo 3.3 para $N = 2$, considera-se o vetor aleatório \mathbf{a} com tensor cheio de cumulantes de ordem três $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3} \in \mathbb{R}^{2 \times 2 \times 2}$, dado, em fatias, por

$$[\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}]_{:, :, 1} = \begin{bmatrix} 186 & -99 \\ -99 & 51 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad [\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}]_{:, :, 2} = \begin{bmatrix} -99 & 51 \\ 51 & -25 \end{bmatrix}. \quad (3.28)$$

A obtenção de uma diagonalização desse tensor simétrico não é evidente; porém, verifica-se a seguir que ele pode ser escrito como

$$\mathbf{C}_{\mathbf{a},3} = 3\overline{\mathbf{g}}_1^{\circ 3} - 7\overline{\mathbf{g}}_2^{\circ 3} \quad (3.29)$$

com $\overline{\mathbf{g}}_1 = [5 \ -3]^\top$ e $\overline{\mathbf{g}}_2 = [3 \ -2]^\top$. Nesse caso particular, a decomposição obtida é única a menos de permutação dos tensores simples somados. Para obter essa decomposição, é preciso resolver um sistema de equações polinomiais de terceiro grau. Trata-se de um sistema cuja solução não é direta — aqui, a decomposição foi obtida por um *software* de computação simbólica. Questões envolvendo a existência, unicidade e formas de obter soluções para esses tipos de sistemas de equações são estudadas em uma área de matemática pura denominada geometria algébrica (LANDSBERG, 2012).

A fim de conferir que a decomposição dada é válida, expandem-se os produtos externos em (3.29) resultando em

$$[\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}]_{:, :, 1} = 15\overline{\mathbf{g}}_1\overline{\mathbf{g}}_1^\top - 21\overline{\mathbf{g}}_2\overline{\mathbf{g}}_2^\top \quad \text{e} \quad [\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}]_{:, :, 2} = -9\overline{\mathbf{g}}_1\overline{\mathbf{g}}_1^\top + 14\overline{\mathbf{g}}_2\overline{\mathbf{g}}_2^\top \quad (3.30)$$

com

$$\overline{\mathbf{g}}_1\overline{\mathbf{g}}_1^\top = \begin{bmatrix} 25 & -15 \\ -15 & 9 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \overline{\mathbf{g}}_2\overline{\mathbf{g}}_2^\top = \begin{bmatrix} 9 & -6 \\ -6 & 4 \end{bmatrix}.$$

Substituindo-se essas matrizes em (3.30), chega-se às camadas do tensor $\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}$ de (3.28). Agora, definindo-se a matriz $\overline{\mathbf{G}} = [\overline{\mathbf{g}}_1 \ \overline{\mathbf{g}}_2]$, pode-se obter $\mathbf{b} = \mathbf{G}\mathbf{a}$ com elementos não

correlacionados em ordem três escolhendo-se $\mathbf{G} = \overline{\mathbf{G}}^{-1}$. Calculando-se a matriz \mathbf{G} , tem-se

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ -3 & -2 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ -3 & -5 \end{bmatrix}.$$

A partir da expressão (3.23) com $g_{i,j} = [\mathbf{G}]_{i,j}$, podem-se obter os elementos do tensor $\mathbf{C}_{\mathbf{b},3}$. Como se trata de um tensor simétrico, vamos apenas calcular os elementos das posições (1, 1, 2) e (1, 2, 2), já que os demais elementos de fora da diagonal principal de $\mathbf{C}_{\mathbf{b},3}$ serão iguais a um dos elementos nessas posições. Portanto,

$$\begin{aligned} [\mathbf{C}_{\mathbf{b},3}]_{1,1,2} &= \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N \sum_{r=1}^N [\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}]_{p,q,r} g_{1,p} g_{1,q} g_{2,r} \\ &= 186 \times 2^2 \times (-3) - 99 \times 2^2 \times (-5) - 99 \times 2 \times 3 \times (-3) + 51 \times 2 \times 3 \times (-5) \\ &\quad - 99 \times 3 \times 2 \times (-3) + 51 \times 3 \times 2 \times (-5) + 51 \times 3^2 \times (-3) - 25 \times 3^2 \times (-5) \\ &= 0 \end{aligned}$$

e, de forma análoga,

$$[\mathbf{C}_{\mathbf{b},3}]_{1,2,2} = \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N \sum_{r=1}^N [\mathbf{C}_{\mathbf{a},3}]_{p,q,r} g_{1,p} g_{2,q} g_{2,r} = 0.$$

Logo, o tensor resultante $\mathbf{C}_{\mathbf{b},3}$ é diagonal. ◁

Dadas as dificuldades teóricas e práticas existentes na obtenção da decomposição de um tensor simétrico, a representação matricial é em geral mais conveniente. Ao invés de diagonalizar o tensor por completo, podem-se diagonalizar matrizes de tricovariância por meio de métodos convencionais. Sob certas condições, isso permite impor a não correlação em ordem três com garantia de unicidade na decomposição (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). Nesse aspecto, a representação por matriz de tricovariância passa a ter um papel ainda mais relevante na representação de cumulantes de ordem três.

3.4 Representações para cumulantes de ordem quatro

Nesta seção, abordam-se representações para cumulantes de ordem quatro. Estruturalmente, o conteúdo desta seção é muito similar ao da seção anterior, em que foram abordadas representações para cumulantes de ordem três. Porém, escolheu-se abordar o caso de cumulantes de ordem quatro após o de ordem três para facilitar seu entendimento e evidenciar as sutis — mas não pouco relevantes — diferenças entre os dois casos. Inicia-se pela representação tensorial de cumulantes de ordem quatro na Subseção 3.4.1, seguida de uma representação equivalente por funcional linear considerada na Subseção 3.4.2. A partir dessa representação equivalente, na Subseção 3.4.3 obtém-se uma representação matricial para cumulantes de ordem quatro, denominada matriz de quadricovariância. Na

Subseção 3.4.4, estende-se a definição matricial e introduz-se o operador de quadricovariância. Isso leva, na Subseção 3.4.5, à discussão da questão da completude da representação matricial em ordem quatro, bem como à apresentação de propriedades desse operador. Finalmente, aborda-se na Subseção 3.4.6 a questão da diagonalização de tensores de cumulantes de ordem quatro.

3.4.1 Representação tensorial em ordem quatro

Os cumulantes de ordem quatro de \mathbf{a} são denotados por $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k,\ell}$ e definidos conforme (2.30). A seguir, esses cumulantes são inicialmente representados de maneira tensorial.

Definição 3.5. O tensor de cumulantes de ordem quatro do vetor aleatório \mathbf{a} é denotado por $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$ e definido elemento a elemento como

$$[\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}]_{i,j,k,\ell} = \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k,\ell} \quad (3.31)$$

para $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$. ◁

Como os elementos de $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}$ apresentam quatro índices livres, trata-se de um tensor de ordem quatro. No exemplo a seguir, aborda-se uma primeira diferença em relação ao caso de ordem três: a dificuldade de visualização dos elementos do tensor de ordem quatro.

Exemplo 3.6. Para um vetor aleatório $\mathbf{a} = [a_1 \ a_2]^\top$ de $N = 2$ elementos, o tensor de cumulantes de ordem quatro $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4} \in \mathbb{R}^{2 \times 2 \times 2 \times 2}$ possui $N^4 = 16$ elementos. Uma ilustração análoga à Figura 1, apresentada no Exemplo 3.3 para o tensor de cumulantes de ordem três, seria de difícil visualização devido à necessidade de uma quarta dimensão espacial. Porém, é possível esquematizar uma projeção da disposição dos elementos de $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}$ em um espaço de dimensão inferior. Uma figura dessa projeção no espaço de três dimensões, inspirada em Coxeter (1948), é mostrada na Figura 2. A linha pontilhada central liga os elementos da diagonal principal do tensor. Assim como para ordem três, o tensor $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}$ é simétrico. Para exemplificar, os elementos em fundo cinza indicam um dos possíveis conjuntos de cumulantes cruzados que, devido à simetria, são numericamente iguais. Trata-se dos cumulantes $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2,2,2}$, $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1,2,2}$, $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2,1,2}$ e $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2,2,1}$.

O tensor $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}$ pode ser fatiado de diferentes maneiras para obter tensores de ordem inferior a quatro. Denotando-se por $[\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}]_{:, :, :, k}$ as fatias obtidas fixando-se apenas o último índice dos elementos do tensor, obtêm-se os tensores de ordem três $[\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}]_{:, :, :, 1}$ e $[\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}]_{:, :, :, 2}$, cujos elementos são indicados na Figura 2 em contorno simples e duplo, respectivamente. Tensores de ordem dois podem ser obtidos fixando-se, por exemplo, os dois últimos índices de $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}$, resultando nas matrizes

$$[\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}]_{:, :, 1, 1} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1,1,1} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2,1,1} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1,1,1} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2,1,1} \end{bmatrix}, \quad [\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}]_{:, :, 1, 2} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1,1,2} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2,1,2} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1,1,2} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2,1,2} \end{bmatrix},$$

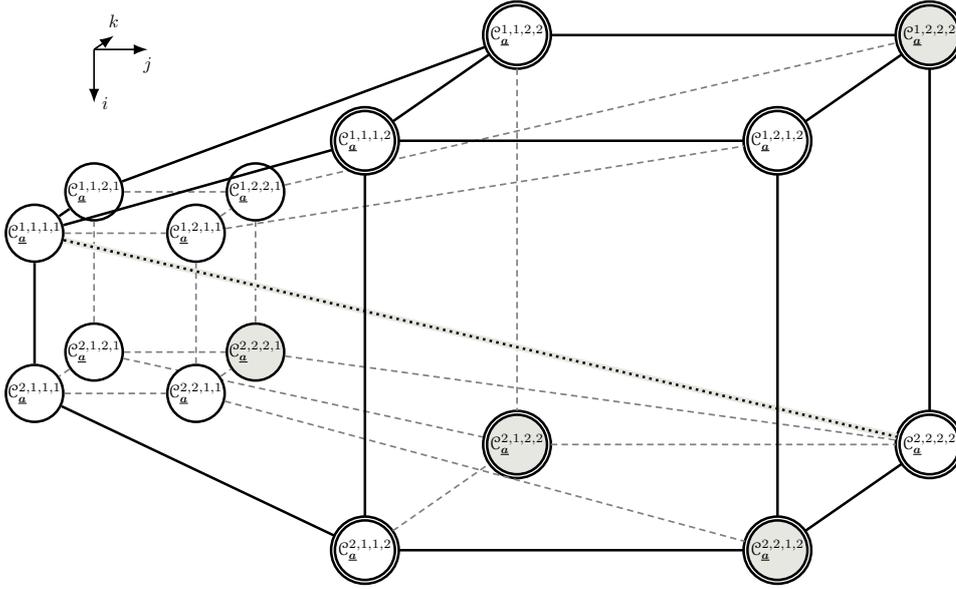


Figura 2 – Projeção da disposição dos elementos do tensor de cumulantes de ordem quatro $\mathcal{C}_{\mathbf{a},4}$, para $N = 2$, no espaço tridimensional.

Fonte: autoria própria.

$$[\mathcal{C}_{\mathbf{a},4}]_{::,2,1} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1,2,1} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2,2,1} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1,2,1} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2,2,1} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad [\mathcal{C}_{\mathbf{a},4}]_{::,2,2} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1,2,2} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,2,2,2} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1,2,2} & \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,2,2,2} \end{bmatrix}.$$

Finalmente, fibras de $\mathcal{C}_{\mathbf{a},4}$ podem ser obtidas deixando-se apenas um índice livre no tensor. Por exemplo, como exemplos de fibras verticais de $\mathcal{C}_{\mathbf{a},4}$ para $j = 1$, resultam

$$\begin{aligned} [\mathcal{C}_{\mathbf{a},4}]_{:,1,1,1} &= \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1,1,1} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1,1,1} \end{bmatrix}, & [\mathcal{C}_{\mathbf{a},4}]_{:,1,1,2} &= \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1,1,2} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1,1,2} \end{bmatrix}, \\ [\mathcal{C}_{\mathbf{a},4}]_{:,1,2,1} &= \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1,2,1} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1,2,1} \end{bmatrix} & \text{e} & [\mathcal{C}_{\mathbf{a},4}]_{:,1,2,2} &= \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{1,1,2,2} \\ \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{2,1,2,2} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

que correspondem a tensores de ordem um, *i.e.*, vetores. \triangleleft

Considerando-se a base canônica de vetores do \mathbb{R}^N dada por (3.7) e a definição do produto externo estendido (3.1) para ordem $M = 4$, o tensor de cumulantes de ordem quatro admite a representação

$$\mathcal{C}_{\mathbf{a},4} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k,\ell} \mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j \circ \mathbf{e}_k \circ \mathbf{e}_\ell. \quad (3.32)$$

Os cumulantes $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k,\ell}$ podem ser interpretados como as coordenadas de $\mathcal{C}_{\mathbf{a},4}$ na base composta por N^4 tensores simples de ordem quatro da forma de produto externo

$$\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j \circ \mathbf{e}_k \circ \mathbf{e}_\ell,$$

cada um com elemento igual a um na posição (i, j, k, ℓ) e elementos nulos nas demais posições. O conjunto de tensores de ordem quatro $\mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$ também pode ser interpretado como um espaço vetorial, agora de dimensão N^4 (LANDSBERG, 2012; COMON, 2014).

3.4.2 Funcional linear em ordem quatro

Analogamente aos casos de ordem dois e três, também pode-se associar ao tensor $\mathcal{C}_{\underline{a},4}$ um elemento do espaço dual do $\mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$, *i.e.*, um funcional linear tomado sobre tensores de ordem quatro. No espaço dual, define-se o funcional linear correspondente ao tensor $\mathcal{C}_{\underline{a},4}$ como um mapeamento

$$f_{\underline{a},4} : \mathbb{R}^{N \times N \times N \times N} \rightarrow \mathbb{R}$$

dado pela expressão

$$f_{\underline{a},4}(\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j,k,\ell} [\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}]_{i,j,k,\ell} \quad (3.33)$$

para todos $\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\delta} \in \mathbb{R}^N$. Para que a descrição estatística de ordem quatro do vetor aleatório seja integralmente contemplada pelo funcional linear $f_{\underline{a},4}$, é preciso conhecê-lo para o conjunto de todas as possibilidades de tensores simples $\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}$ pertencentes a seu domínio. Porém, por se tratar de um funcional linear, é suficiente conhecer o mapeamento apenas para tensores simples pertencentes a uma mesma base do $\mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$ (HOFFMAN; KUNZE, 1971).

A seguir, apresentam-se comentários a respeito da representação equivalente para cumulantes de ordem quatro por meio de funcional:

- ◇ A cada tensor de cumulantes de ordem quatro $\mathcal{C}_{\underline{a},4}$ pertencente ao $\mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$ associa-se um único funcional linear $f_{\underline{a},4}$ pertencente ao espaço dual do $\mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$. Na expressão (3.33), pressupõe-se implicitamente que os vetores genéricos $\boldsymbol{\kappa}$, $\boldsymbol{\eta}$, $\boldsymbol{\gamma}$ e $\boldsymbol{\delta}$ correspondem a coordenadas relativas à base utilizada na representação do tensor de cumulantes $\mathcal{C}_{\underline{a},4}$ conforme (3.32).
- ◇ A expressão (3.33) permite descrever o mapeamento apenas para tensores simples da forma $\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$. Porém, devido à linearidade do funcional $f_{\underline{a},4}$, essa descrição é suficiente para conhecer o mapeamento sobre tensores quaisquer.
- ◇ Considerando-se o caso particular em que $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{e}_i$, $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{e}_j$, $\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{e}_k$ e $\boldsymbol{\delta} = \mathbf{e}_\ell$ são vetores da base canônica do \mathbb{R}^N , resultam tensores simples da forma $\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j \circ \mathbf{e}_k \circ \mathbf{e}_\ell$ para $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$. Por sua vez, esses tensores compõem a base canônica do espaço $\mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$. Calculando-se o funcional para os elementos dessa base, tem-se

$$f_{\underline{a},4}(\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j \circ \mathbf{e}_k \circ \mathbf{e}_\ell) = \mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j,k,\ell}$$

Sendo assim, a partir do funcional é possível obter individualmente todos os cumulantes de ordem quatro dos elementos do vetor aleatório \underline{a} .

- ◇ Analogamente ao tensor de cumulantes de ordem quatro $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}$, a expressão (3.33) do funcional $f_{\mathbf{a},4}$ também pode ser interpretada como uma decomposição em base de vetores. Especificamente, os cumulantes $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k,\ell}$ podem ser entendidos como as coordenadas de $f_{\mathbf{a},4}$ na base dual composta por N^4 funcionais da forma

$$\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta} \mapsto [\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}]_{i,j,k,\ell} = \kappa_i \eta_j \gamma_k \delta_\ell.$$

Assim como o espaço vetorial $\mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$, seu dual possui dimensão igual a N^4 . Além disso, as coordenadas do tensor de cumulantes de ordem quatro $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}$ e do funcional linear $f_{\mathbf{a},4}$ em relação às respectivas bases dos espaços vetoriais a que pertencem são iguais. Portanto, assim como para ordens dois e três, há uma equivalência entre as representações por tensor de cumulantes de ordem quatro e funcional linear.

3.4.3 Matriz de quadricovariância

A fim de obter uma representação matricial completa para os cumulantes de ordem quatro de um vetor aleatório, considera-se inicialmente a representação equivalente de (3.33). A expressão do funcional linear pode ser expressa como uma forma bilinear em dois dos quatro vetores $\boldsymbol{\kappa}$, $\boldsymbol{\eta}$, $\boldsymbol{\gamma}$ e $\boldsymbol{\delta}$. Por exemplo, fazendo-se a expansão do funcional, chega-se a

$$f_{\mathbf{a},4}(\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k,\ell} \gamma_k \delta_\ell \right) \kappa_i \eta_j = \boldsymbol{\kappa}^\top \left(\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N [\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}]_{:, :, k, \ell} \gamma_k \delta_\ell \right) \boldsymbol{\eta}. \quad (3.34)$$

A expressão obtida corresponde a uma forma bilinear particular em $\boldsymbol{\kappa}$ e $\boldsymbol{\eta}$, e parametrizada por $\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}$. Denotando-se essa forma bilinear por $\tilde{f}_{\mathbf{a},4}$, pode-se exprimi-la como

$$\tilde{f}_{\mathbf{a},4}(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\eta}; \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}) = \boldsymbol{\kappa}^\top \left(\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathbf{Q}_{\mathbf{a}}^{k,\ell} \gamma_k \delta_\ell \right) \boldsymbol{\eta} \quad (3.35)$$

para todos $\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^N$, em que

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{a}}^{k,\ell} = [\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}]_{:, :, k, \ell} \in \mathbb{R}^{N \times N} \quad (3.36)$$

denota a matriz correspondente a uma fatia do tensor $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}$. Analogamente ao caso de ordem três, ao expressar a forma bilinear em outros pares de vetores que não $(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\eta})$, formas equivalentes são obtidas. Observa-se a semelhança entre a forma obtida em (3.35) e as expressões (3.9) e (3.19) para as matrizes de covariância e tricovariância, respectivamente. Aqui, a forma bilinear depende de uma combinação linear genérica de fatias matriciais do tensor $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}$ fixando-se seus dois últimos índices. A matriz de quadricovariância é definida como a matriz correspondente à forma bilinear (3.35). Recordando-se que $\gamma_k \delta_\ell = [\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}]_{k,\ell}$, tem-se a seguinte definição.

Definição 3.6. A matriz de quadricovariância do vetor aleatório \underline{a} , denotada por $\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$, é definida como

$$\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}) = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathbf{Q}_{\underline{a}}^{k,\ell}[\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}]_{k,\ell}, \quad (3.37)$$

em que $\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é uma matriz de pesos. \triangleleft

Exemplo 3.7. Considera-se um vetor aleatório $\underline{a} = [\underline{a}_1 \ \underline{a}_2]^\top$ de $N = 2$ elementos. A liberdade na escolha dos vetores $\boldsymbol{\gamma}$ e $\boldsymbol{\delta}$ implica a possibilidade de obtenção de diferentes matrizes de quadricovariância pertencentes ao espaço imagem do mapeamento $\mathbf{Q}_{\underline{a}}$. Por exemplo, escolhendo-se $\boldsymbol{\gamma}$ e $\boldsymbol{\delta}$ pertencentes à base canônica do \mathbb{R}^2 conforme (3.7), e recordando-se da definição das fatias $\mathbf{Q}_{\underline{a}}^{k,\ell}$ conforme (3.36), obtêm-se

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{e}_1 \circ \mathbf{e}_1) &= \mathbf{Q}_{\underline{a}} \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \right) = \mathbf{Q}_{\underline{a}}^{1,1} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,1,1} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,1,1} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,1,1} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,1,1} \end{bmatrix}, \\ \mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{e}_1 \circ \mathbf{e}_2) &= \mathbf{Q}_{\underline{a}} \left(\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \right) = \mathbf{Q}_{\underline{a}}^{1,2} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,1,2} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,1,2} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,1,2} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,1,2} \end{bmatrix}, \\ \mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{e}_2 \circ \mathbf{e}_1) &= \mathbf{Q}_{\underline{a}} \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) = \mathbf{Q}_{\underline{a}}^{2,1} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,2,1} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,2,1} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,2,1} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,2,1} \end{bmatrix}, \\ \mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{e}_2 \circ \mathbf{e}_2) &= \mathbf{Q}_{\underline{a}} \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) = \mathbf{Q}_{\underline{a}}^{2,2} = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,2,2} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,2,2} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,2,2} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,2,2} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Portanto, todas as camadas matriciais $\mathbf{Q}_{\underline{a}}^{k,\ell}$ do tensor de cumulantes de ordem quatro $\mathcal{C}_{\underline{a},4}$ podem ser obtidas tomando-se $\mathbf{Q}_{\underline{a}}$ em produtos externos de vetores da base canônica. \triangleleft

Na definição apresentada, há uma dependência da matriz de quadricovariância com a escolha feita para a matriz de pesos $\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}$. Isso sugere que há um conjunto de formas bilineares a serem consideradas para assegurar a completude na representação do funcional linear (3.33). Assim, a fim de levar em conta o conjunto de formas bilineares — que de fato consiste na representação equivalente ao tensor de cumulantes $\mathcal{C}_{\underline{a},4}$ —, considera-se no lugar de apenas uma única matriz, o mapeamento

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{\underline{a}} : \mathbb{R}^{N \times N} &\rightarrow \mathbb{R}^{N \times N} \\ \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta} &\mapsto \mathbf{Q}_{\underline{a}}(\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}) \end{aligned}$$

para toda $\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ matriz de pesos com posto máximo igual a um. O mapeamento $\mathbf{Q}_{\underline{a}}$ é denominado operador de quadricovariância de \underline{a} .

3.4.4 Generalização do operador de quadricovariância

Segundo a expressão (3.37), tem-se que uma dada matriz de quadricovariância depende da matriz de pesos escolhida $\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}$, cujo posto máximo é igual a um. Uma expressão

mais geral pode ser obtida para o operador de quadricovariância, sem restringir o posto da matriz de seu argumento. Para exemplificar como isso pode ser feito, apresenta-se o seguinte exemplo.

Exemplo 3.8. Considera-se o tensor de ordem quatro da forma

$$\mathcal{A} = \boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}.$$

com $\mathbf{V} = \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta} + \bar{\boldsymbol{\gamma}} \circ \bar{\boldsymbol{\delta}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, *i.e.*, uma matriz de posto máximo igual a dois. Pela multilinearidade do produto externo generalizado, tem-se

$$\mathcal{A} = \boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \bar{\boldsymbol{\gamma}} \circ \bar{\boldsymbol{\delta}} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}.$$

Agora, aplica-se o funcional linear da Equação (3.33) a \mathcal{A} , *i.e.*, $f_{\mathbf{a},4}(\mathcal{A})$. Como o funcional que corresponde ao tensor de cumulantes é linear por definição, tem-se

$$f_{\mathbf{a},4}(\mathcal{A}) = f_{\mathbf{a},4}(\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}) + f_{\mathbf{a},4}(\boldsymbol{\kappa} \circ \boldsymbol{\eta} \circ \bar{\boldsymbol{\gamma}} \circ \bar{\boldsymbol{\delta}}).$$

Aplicando-se o mesmo raciocínio das Equações (3.34)–(3.35) para expressar cada um dos dois funcionais obtidos como uma forma bilinear, chega-se a

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{a},4}(\mathcal{A}) &= \boldsymbol{\kappa}^\top \left(\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathbf{Q}_{\mathbf{a}}^{k,\ell} \gamma_k \delta_\ell \right) \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\kappa}^\top \left(\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathbf{Q}_{\mathbf{a}}^{k,\ell} \bar{\gamma}_k \bar{\delta}_\ell \right) \boldsymbol{\eta} \\ &= \boldsymbol{\kappa}^\top \left(\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathbf{Q}_{\mathbf{a}}^{k,\ell} \gamma_k \delta_\ell + \mathbf{Q}_{\mathbf{a}}^{k,\ell} \bar{\gamma}_k \bar{\delta}_\ell \right) \boldsymbol{\eta}, \end{aligned}$$

obtendo-se a forma bilinear associada

$$\tilde{f}_{\mathbf{a},4}(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\eta}; \mathbf{V}) = \boldsymbol{\kappa}^\top \left(\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathbf{Q}_{\mathbf{a}}^{k,\ell} [\mathbf{V}]_{k,\ell} \right) \boldsymbol{\eta}, \quad (3.38)$$

pois $[\mathbf{V}]_{k,\ell} = \gamma_k \delta_\ell + \bar{\gamma}_k \bar{\delta}_\ell$. Devido à linearidade do funcional $f_{\mathbf{a},4}$, uma forma mais geral para expressar a matriz de quadricovariância seria adotar a matriz associada à forma bilinear mais geral (3.38), obtendo-se a definição alternativa

$$\boxed{\mathbf{Q}_{\mathbf{a}}(\mathbf{V}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \mathbf{Q}_{\mathbf{a}}^{i,j} [\mathbf{V}]_{i,j}} \quad (3.39)$$

em que \mathbf{V} é matriz de posto máximo igual a dois. Logo, a linearidade de $f_{\mathbf{a},4}$ implica a linearidade do operador de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\mathbf{a}}$. \triangleleft

O caso desse exemplo pode ser estendido, analogamente, para \mathbf{V} soma de uma quantidade qualquer de tensores simples. Nesse caso, não haveria qualquer restrição de posto sobre \mathbf{V} e seria possível chegar na definição mais geral para a matriz de quadricovariância, *i.e.*, sem a restrição sobre os elementos de seu domínio. Ressalta-se que a extensão da definição inicial da matriz de quadricovariância, obtida na Subseção 3.4.3 e dada por (3.37),

para expressões mais gerais e com menos restrições sobre as matrizes de pesos, decorre da linearidade do funcional $f_{\underline{a},4}$. Esse funcional, por sua vez, é uma representação equivalente ao tensor de cumulantes de ordem quatro $\mathcal{C}_{\underline{a},4}$.

Para mostrar o caso mais geral, define-se a matriz $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ com decomposição genérica na base canônica

$$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\mathbf{V}]_{i,j} \mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j.$$

Com base no Exemplo 3.8, recorda-se que a linearidade do funcional $f_{\underline{a},4}$ implica a linearidade do operador $\mathbf{Q}_{\underline{a}}$. Logo, ao aplicá-lo à matriz genérica \mathbf{V} , resulta

$$\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{V}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\mathbf{V}]_{i,j} \mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j).$$

Utilizando-se (3.37), obtém-se $\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{e}_i \circ \mathbf{e}_j) = \mathbf{Q}_{\underline{a}}^{i,j}$ para $i, j = 1, 2, \dots, N$. Logo, a matriz de quadricovariância pode ser expressa como em (3.39), mas agora para qualquer matriz $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, sem restrição de posto. Por sua vez, os elementos da matriz de quadricovariância são dados, nesse caso, por

$$[\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{V})]_{i,j} = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j,k,\ell} [\mathbf{V}]_{k,\ell} \quad (3.40)$$

para $i, j = 1, 2, \dots, N$.

Finalmente, cabem alguns comentários a respeito da representação de cumulantes de ordem quatro por meio do operador de quadricovariância. Na expressão (3.33) do funcional $f_{\underline{a},4}$, destaca-se que os vetores $\boldsymbol{\gamma}$ e $\boldsymbol{\delta}$ têm papel secundário de variáveis livres do funcional. Porém, na interpretação de (3.35) como forma bilinear, os elementos de $\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{\delta}$ têm o papel de ponderação das fatias do tensor de cumulantes na composição da matriz associada à forma bilinear. Esse mesmo papel é assumido pelos elementos da matriz \mathbf{V} em formas bilineares mais gerais, como (3.38) do Exemplo 3.8. Nesse caso, portanto, os elementos da matriz \mathbf{V} possuem papel relevante na descrição da forma bilinear resultante. Analogamente ao caso de ordem três, no espaço imagem de $\mathbf{Q}_{\underline{a}}$ haverá matrizes, cuja manipulação e tratamento algébrico são em geral mais simples do que para um tensor de ordem quatro como $\mathcal{C}_{\underline{a},4}$.

3.4.5 Completude da representação matricial em ordem quatro e propriedades

A partir da escolha de uma matriz de pesos particular \mathbf{V} , na matriz de quadricovariância correspondente $\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{V})$ estará refletida apenas uma parte da descrição estatística de ordem quatro do vetor aleatório $\underline{\mathbf{a}}$ — mas não necessariamente a descrição completa presente no operador de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\underline{a}}$. A escolha de \mathbf{V} pode ser crítica na aplicabilidade da matriz $\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{V})$ a um determinado problema prático. Basicamente, essa escolha deve ser feita a fim de que a matriz de quadricovariância obtida descreva satisfatoriamente

as estatísticas de ordem quatro do vetor \underline{a} necessárias à resolução do problema dado. Dependendo da aplicação considerada, pode ou não ser suficiente considerar apenas um elemento do espaço imagem do operador $\mathbf{Q}_{\underline{a}}$, *i.e.*, apenas uma matriz de quadricovariância. Em contrapartida, ressalta-se que no caso geral é o operador de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\underline{a}}$ que representa a descrição completa em termos de cumulantes de ordem quatro do vetor aleatório \underline{a} — e não apenas uma matriz de quadricovariância específica $\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{V})$ para uma matriz de pesos \mathbf{V} particular. Trata-se da completude da representação do tensor $\mathcal{C}_{\underline{a},4}$ por matrizes de quadricovariância obtidas a partir do mapeamento $\mathbf{Q}_{\underline{a}}$.

Exemplo 3.9. Considerando-se o Exemplo 3.7 para $N = 2$, seja agora a matriz de quadricovariância obtida para uma matriz de pesos 2×2 particular $\mathbf{V} = \mathbf{e}_1 \circ \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \circ \mathbf{e}_1$ com posto igual a dois. A matriz de quadricovariância é obtida, a partir da definição mais geral (3.39), conforme

$$\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{e}_1 \circ \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \circ \mathbf{e}_1) = \mathbf{Q}_{\underline{a}} \left(\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,1,2} + \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,2,1} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,1,2} + \mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,2,2,1} \\ \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,1,2} + \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,1,2,1} & \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,1,2} + \mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,2,1} \end{bmatrix}.$$

A matriz de quadricovariância obtida não leva em conta, pelo menos de maneira explícita, os cumulantes de ordem quatro $\mathcal{C}_{\underline{a}}^{1,1,1,1}$ e $\mathcal{C}_{\underline{a}}^{2,2,2,2}$. Por exemplo, no caso particular em que a_1 e a_2 forem independentes, tem-se que essa matriz resultará nula independentemente das distribuições marginais das variáveis aleatórias consideradas — e, portanto, dos valores de seus autocumulantes. Em aplicações cujas soluções exijam a determinação de autocumulantes de variáveis aleatórias que possam ser independentes, ou requeiram a imposição de restrições sobre esses cumulantes, essa escolha de matriz de quadricovariância não teria utilidade. Trata-se do que ocorre, por exemplo, em problemas de separação cega de fontes e desconvolução cega de canais de comunicação (GODARD, 1980; COMON, 1994). \triangleleft

A seguir, são elencadas propriedades úteis do operador de quadricovariância. Trata-se de propriedades gerais que valem para qualquer matriz de pesos $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Algumas das propriedades são extremamente úteis e vieram à tona na literatura nos trabalhos (CARDOSO, 1989; CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; CARDOSO, 1999), apesar de decorrerem de conceitos algébricos anteriores da álgebra multilinear (LANDSBERG, 2012).

Proposição 3.3. *O operador de quadricovariância é linear, isto é,*

$$\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{V}_a + \mathbf{V}_b) = \mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{V}_a) + \mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{V}_b) \quad \forall \mathbf{V}_a, \mathbf{V}_b \in \mathbb{R}^{N \times N} \quad e \quad \mathbf{Q}_{\underline{a}}(c\mathbf{V}) = c\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{V}) \quad \forall c \in \mathbb{R}.$$

Demonstração. Veja a Seção A.2 do Apêndice A.

Proposição 3.4. *A matriz de quadricovariância é simétrica, isto é,*

$$\mathbf{Q}_{\underline{a}}(\mathbf{V}) = \mathbf{Q}_{\underline{a}}^T(\mathbf{V}) \quad \forall \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}.$$

Demonstração. Veja a Seção A.2 do Apêndice A.

Devido à Proposição 3.4, a matriz de quadricovariância é ortogonalmente diagonalizável e possui autovalores reais, assim como a matriz de covariância.

Proposição 3.5. *A matriz de quadricovariância é invariante à transposição da matriz de pesos, isto é,*

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{a}}(\mathbf{V}) = \mathbf{Q}_{\mathbf{a}}(\mathbf{V}^T) \quad \forall \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}.$$

Demonstração. Veja a Seção A.2 do Apêndice A.

Proposição 3.6. *Se \mathbf{a} possuir média nula, então as matrizes de quadricovariância podem ser expressas em função de momentos como*

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{a}}(\mathbf{V}) = \mathbb{E}[(\mathbf{a}^T \mathbf{V} \mathbf{a})(\mathbf{a} \mathbf{a}^T)] - \text{tr}(\mathbf{C}_{\mathbf{a}} \mathbf{V}) \mathbf{C}_{\mathbf{a}} - \mathbf{C}_{\mathbf{a}} \mathbf{V} \mathbf{C}_{\mathbf{a}} - \mathbf{C}_{\mathbf{a}} \mathbf{V}^T \mathbf{C}_{\mathbf{a}}, \quad (3.41)$$

$\forall \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, em que $\text{tr}(\cdot)$ denota o traço de (\cdot) .

Demonstração. Veja a Seção A.2 do Apêndice A.

As expressões (2.30) — para vetor aleatório de média nula — e (3.41) possuem certa semelhança. Particularmente, a primeira equação poderia ser interpretada como uma expressão para cumulantes escalares $\mathcal{C}_{\mathbf{a}}^{i,j,k,\ell}$ em função de momentos também escalares; a segunda, como uma expressão para matrizes de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\mathbf{a}}(\mathbf{V})$ em função de matrizes de momentos.

Proposição 3.7. *Seja \mathbf{a} um vetor aleatório de N elementos mutuamente independentes e seja o vetor aleatório dado por $\mathbf{b} = \mathbf{G} \mathbf{a}$ com $\mathbf{G} = [\mathbf{g}_1 \ \mathbf{g}_2 \ \cdots \ \mathbf{g}_N] \in \mathbb{R}^{N \times N}$. A matriz de quadricovariância de \mathbf{b} pode ser expressa como*

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{b}}(\mathbf{V}) = \mathbf{G} \mathbf{A}_{\mathbf{a},4}(\mathbf{V}, \mathbf{G}) \mathbf{G}^T \quad (3.42)$$

$\forall \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, sendo

$$\mathbf{A}_{\mathbf{a},4}(\mathbf{V}, \mathbf{G}) = \text{diag}(\mathcal{C}_{\mathbf{a}_1,4} \mathbf{g}_1^T \mathbf{V} \mathbf{g}_1, \mathcal{C}_{\mathbf{a}_2,4} \mathbf{g}_2^T \mathbf{V} \mathbf{g}_2, \dots, \mathcal{C}_{\mathbf{a}_N,4} \mathbf{g}_N^T \mathbf{V} \mathbf{g}_N) \quad (3.43)$$

em que $\text{diag}(\cdot)$ denota a matriz diagonal com elementos (\cdot) na ordem dada e $\mathcal{C}_{\mathbf{a}_i,4}$ denota o autocumulante de ordem quatro da i -ésima variável aleatória de \mathbf{a} .

Demonstração. Veja a Seção A.2 do Apêndice A.

Diferentemente da Proposição 3.1 para a matriz de covariância, a Proposição 3.7 só pode ser garantida para uma transformação linear sobre um vetor aleatório de elementos independentes. Supondo que o vetor aleatório genérico \mathbf{a} tem elementos independentes, podem-se comparar as transformações para a matriz de covariância e quadricovariância, dadas respectivamente por (3.12) e (3.42). Enquanto a matriz $\mathbf{C}_{\mathbf{a}}$ será diagonal contendo as variâncias dos elementos de \mathbf{a} , a matriz $\mathbf{A}_{\mathbf{a},4}(\mathbf{V}, \mathbf{G})$ dependerá, além das estatísticas de ordem quatro de cada elemento de \mathbf{a} , também das colunas de \mathbf{G} e da matriz de pesos \mathbf{V} .

3.4.6 Diagonalização do tensor de cumulantes de ordem quatro

A diagonalização de um tensor de ordem quatro possui certas limitações similares às abordadas na Subseção 3.3.4 para o caso de ordem três. A fim de compreender melhor os problemas envolvidos, inicia-se apresentando o efeito que uma transformação linear possui sobre o tensor de cumulantes de ordem quatro de um vetor aleatório (MCCULLAGH, 2018).

Proposição 3.8. *Seja \mathbf{a} um vetor aleatório com tensor de cumulantes de ordem quatro $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$ e seja o vetor aleatório dado por $\mathbf{b} = \mathbf{G}\mathbf{a}$ com $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{N \times N}$. O tensor de cumulantes de ordem quatro de \mathbf{b} , denotado por $\mathbf{C}_{\mathbf{b},4} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$, pode ser expresso elemento a elemento como*

$$\boxed{[\mathbf{C}_{\mathbf{b},4}]_{i,j,k,\ell} = \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N \sum_{r=1}^N \sum_{s=1}^N [\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}]_{p,q,r,s} g_{i,p} g_{j,q} g_{k,r} g_{\ell,s}} \quad (3.44)$$

para $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$, em que $g_{i,j} = [\mathbf{G}]_{i,j}$.

Demonstração. Resulta da propriedade de multilinearidade dos cumulantes conforme a Proposição 2.5-(i); (3.44) pode ser compreendida como uma extensão de (3.23) para o caso de ordem quatro. \square

Quanto à proposição apresentada, destaca-se que:

- ◇ A expressão (3.44) pode ser colocada de maneira tensorial. Denotando-se por $\mathbf{g}_p \in \mathbb{R}^N$ a p -ésima coluna de \mathbf{G} para $p = 1, 2, \dots, N$, tem-se

$$\mathbf{C}_{\mathbf{b},4} = \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N \sum_{r=1}^N \sum_{s=1}^N [\mathbf{C}_{\mathbf{a},4}]_{p,q,r,s} \mathbf{g}_p \circ \mathbf{g}_q \circ \mathbf{g}_r \circ \mathbf{g}_s. \quad (3.45)$$

Agora, considera-se a obtenção de uma transformação linear que permita tornar não correlacionados, em ordem quatro, os elementos de um determinado vetor aleatório. Em outras palavras, supondo que \mathbf{a} é um vetor aleatório de elementos quaisquer com tensor de cumulantes $\mathbf{C}_{\mathbf{a},4} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$, deseja-se obter $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ tal que os elementos de $\mathbf{b} = \mathbf{G}\mathbf{a}$ sejam não correlacionados em ordem quatro. Nesse caso, tem-se que $\mathbf{C}_{\mathbf{b},4} \in \mathbb{R}^{N \times N \times N \times N}$ será um tensor diagonal dado elemento a elemento por

$$[\mathbf{C}_{\mathbf{b},4}]_{i,j,k,\ell} = c_{b_i,4} \delta_{i,j,k,\ell} \quad (3.46)$$

para $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$, em que $\delta_{i,j,k,\ell}$ é igual a um se $i = j = k = \ell$ e igual a zero caso contrário (MCCULLAGH, 2018). Na diagonal principal desse tensor ficam os autocumulantes de ordem quatro dos elementos de \mathbf{b} . Substituindo-se (3.46) na representação de (3.32), o tensor diagonal de ordem quatro $\mathbf{C}_{\mathbf{b},4}$ pode ser expresso de maneira simplificada como

$$\boxed{\mathbf{C}_{\mathbf{b},4} = \sum_{i=1}^N c_{b_i,4} \mathbf{e}_i^{\circ 4}}. \quad (3.47)$$

Analogamente aos casos de ordem dois e três, a obtenção de $\underline{\mathbf{b}} = \mathbf{G}\underline{\mathbf{a}}$ com elementos não correlacionados em ordem quatro está condicionada à existência de \mathbf{G} tal que, na expressão (3.45), o tensor de cumulantes $\mathcal{C}_{\underline{\mathbf{b}},4}$ resulte diagonal. Se essa matriz existir, ela poderá ser obtida a partir de uma diagonalização do tensor $\mathcal{C}_{\underline{\mathbf{a}},4}$, que, em geral, é um tensor cheio. Como $\mathcal{C}_{\underline{\mathbf{a}},4}$ é um tensor simétrico, deseja-se obter a sua decomposição conforme

$$\mathcal{C}_{\underline{\mathbf{a}},4} = \sum_{i=1}^N \lambda_i \bar{\mathbf{g}}_i^{\circ 4}, \quad (3.48)$$

em que $\lambda_i \in \mathbb{R}$ para $i = 1, 2, \dots, N$ e $\bar{\mathbf{G}} = [\bar{\mathbf{g}}_1 \ \bar{\mathbf{g}}_2 \ \dots \ \bar{\mathbf{g}}_N] \in \mathbb{R}^{N \times N}$ possui posto completo. Se essa decomposição existir, a escolha de $\mathbf{G} = \bar{\mathbf{G}}^{-1}$ garantirá a não correlação em ordem quatro dos elementos de $\underline{\mathbf{b}}$. Porém, assim como para ordem três, em ordem quatro a existência dessa decomposição é apenas garantida para $N = 2$ (COMON et al., 2008). Para $N > 2$, como não há resultado teórico que garanta a existência da decomposição (COMON et al., 2008). Além disso, não há como garantir, em geral, a unicidade de decomposições de tensores como (3.48), mesmo que elas existam (COMON et al., 2008).

As dificuldades existentes para obtenção da transformação de diagonalização de um tensor de ordem quatro para $N > 2$, em relação à existência da decomposição e à sua unicidade, motivam a consideração de uma representação matricial equivalente para esses tensores (CARDOSO, 1990; CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). Recordar-se que, na Subseção 3.3.3, foi obtida uma representação matricial para cumulantes de ordem três, denominada matriz de tricovariância.

3.5 Conclusões

Nesse capítulo, os conceitos necessários à abordagem algébrica de cumulantes de ordem superior foram gradativamente introduzidos. Até aqui, decidiu-se por não se voltar a uma aplicação específica em virtude das inúmeras possibilidades de aplicações de tensores e estatísticas de ordem superior em processamento estatístico de sinais (MENDEL, 1991; NIKIAS; PETROPULU, 1993; COMON, 2014). Acredita-se que o tratamento dado ao assunto nesse capítulo auxilia, também, a consideração de tensores em contextos que não envolvam, necessariamente, cumulantes. Por exemplo, tensores de dados e suas decomposições têm atraído interesse das comunidades de processamento de sinais e aprendizado de máquina por se mostrarem úteis na resolução de diversos problemas (CICHOCKI et al., 2015; SIDIROPOULOS et al., 2017).

Ao longo do capítulo, enfatizou-se a conveniência que a representação tensorial traz à abordagem de cumulantes de ordem superior. Embora tensores sejam ferramentas matemáticas capazes de capturar a essência das transformações multilineares (LANDSBERG, 2012), como é o caso dos cumulantes, ainda há muitos problemas teóricos em aberto acerca

de decomposições tensoriais, sua existência e unicidade (COMON et al., 2008; COMON, 2014). Sendo assim, a aplicação direta de tensores a problemas práticos de processamento de sinais baseados em cumulantes ainda inspira cuidados e possui limitações. No entanto, a representação tensorial é extremamente útil à compreensão de propriedades algébricas de cumulantes e à obtenção de representações simplificadas convenientes. Representações matriciais para cumulantes (CARDOSO, 1990), por exemplo, além de contarem com tratamento algébrico relativamente mais simples, dispõem de teoria já conhecida no campo da álgebra linear (HOFFMAN; KUNZE, 1971).

Na Seção 3.2, abordaram-se representações para cumulantes de ordem dois. A matriz de covariância foi relacionada a uma representação equivalente por meio de funcional linear. Além disso, abordou-se a regra de transformação que a matriz de covariância satisfaz sob mudanças de base. Essa regra, amplamente utilizada em aplicações de cumulantes de ordem dois, é um dos princípios fundamentais das técnicas de análise de componentes principais (PCA) abordadas no Apêndice B.

Na Seção 3.3, os conceitos abordados para ordem dois foram estendidos para cumulantes de ordem três. O tensor de cumulantes de ordem três foi apresentado como uma extensão da matriz de covariância e também foi representado, de maneira equivalente, como um funcional linear. Por meio da representação por funcional, foi possível obter uma representação matricial para cumulantes de ordem três: a matriz de tricovariância. Em seguida, abordou-se a diagonalização do tensor de cumulantes de ordem três e destacaram-se as dificuldades teóricas que passam a existir quando se lida com tensores de ordem maior do que dois. Essas dificuldades motivam a consideração de representações matriciais para estatísticas de ordem três, como a matriz de tricovariância, em aplicações de processamento estatístico de sinais.

Na Seção 3.4, o caminho percorrido para ordem três foi estendido para o caso de cumulantes de ordem quatro. Em aplicações de processamento estatístico de sinais, esses cumulantes apresentam mais relevância e utilidade do que os de ordem três (LACOUME; AMBLARD; COMON, 1997). A extensão feita, porém, não é direta: a obtenção da representação matricial para cumulantes de ordem quatro, denominada matriz de quadricovariância, requereu interpretações adicionais.

Na Figura 3 é apresentado um esquema simplificado do caminho percorrido na obtenção da representação matricial. Primeiramente, introduziu-se a representação usual de cumulantes de ordem quatro, que consiste em um tensor. Nele está contemplada toda a descrição estatística de ordem quatro de um vetor aleatório. A partir do tensor e do conceito de espaço dual da álgebra linear (HOFFMAN; KUNZE, 1971), obteve-se uma representação por meio de funcional linear. Ambas as representações são equivalentes, pois há um mapeamento bijetor (*i.e.*, isomorfismo) entre elas. Em seguida, com base na expressão do funcional linear, definiu-se uma terceira representação para os cumulantes de ordem quatro — denominada operador de quadricovariância. Esse operador consiste em

um mapeamento que leva uma matriz de pesos a uma matriz de cumulantes de ordem quatro denominada matriz de quadricovariância. O espaço vetorial de todos os operadores de quadricovariância possui a mesma dimensão que o espaço de funcionais lineares. Logo, o operador de quadricovariância também contempla toda a descrição estatística presente no tensor de cumulantes. Porém, ao fixar a matriz de pesos e considerar apenas uma matriz do espaço imagem desse operador, passa-se a uma representação que não necessariamente mantém toda a informação sobre as estatísticas. Isso motivou abordar, de maneira preliminar, a questão da completude da representação matricial. Basicamente, essa questão consiste em saber se uma determinada matriz de quadricovariância permite descrever completamente as estatísticas de ordem quatro de um vetor aleatório necessárias à resolução de um problema. Evidentemente, a resposta depende da aplicação considerada. No Capítulo 6, a questão da completude é revisitada no contexto do problema de separação cega de fontes.

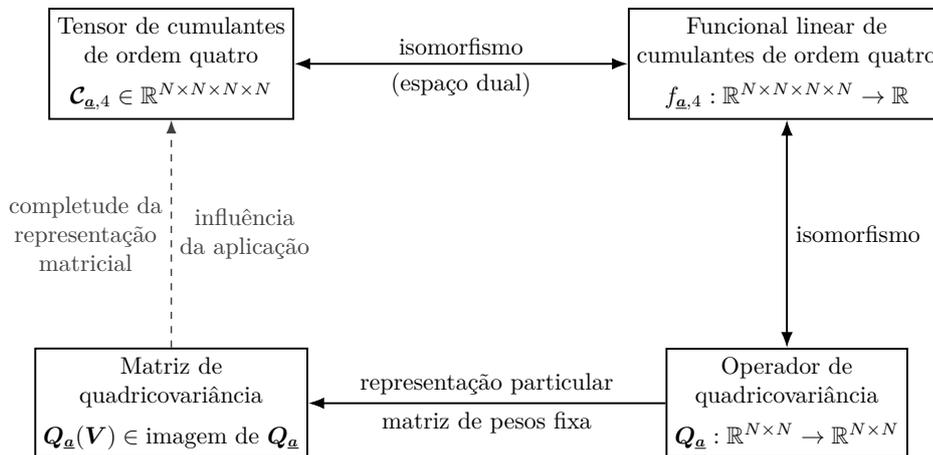


Figura 3 – Esquema simplificado do caminho percorrido na Seção 3.4 para a obtenção de uma representação matricial para cumulantes de ordem quatro.

Fonte: autoria própria.

Por meio desse capítulo, foi possível evidenciar que o uso de tensores permite obter representações matriciais para cumulantes de ordem superior análogas à matriz de covariância para o caso de ordem dois. No Capítulo 6, verifica-se como a representação por matriz de quadricovariância permite abordar o problema de separação cega de fontes e obter soluções. Antes, porém, apresenta-se uma formulação detalhada desse problema no capítulo a seguir.

4 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DE SEPARAÇÃO DE FONTES

Neste capítulo, aborda-se o problema de separação cega de fontes (BSS). Enfoque é dado ao modelo de sistema misturador linear e instantâneo, para o qual as soluções na área de BSS foram inicialmente estudadas (HÉRAULT; JUTTEN; ANS, 1985; COMON, 1992; CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). A partir de uma formulação do problema sob notação consistente e que evidencie detalhes comumente deixados de lado, o intuito é possibilitar a posterior compreensão teórica de princípios de separação e das soluções a eles relacionadas — tanto para os problemas de separação considerados ao longo do capítulo, quanto para problemas mais elaborados. Destaca-se que grande parte dos problemas de BSS com aplicabilidade prática podem ser formulados com base em sinais reais (COMON; JUTTEN, 2010). Além disso, as soluções para o caso real evitam complicações existentes em soluções envolvendo sinais complexos, sendo mais convenientes para a interpretação e o entendimento dos métodos de separação. Portanto, tanto neste capítulo quanto nos que o seguem, considera-se o problema de separação para o caso real.

Na Seção 4.1, apresenta-se o problema de BSS em sua formulação geral. Na Seção 4.2, particulariza-se o problema para o modelo de sistema misturador linear e instantâneo. Na Seção 4.3, inclui-se no modelo uma descrição estatística para as fontes, a qual permite simplificar o tratamento matemático do problema e também possibilita a sua resolução. Na Seção 4.4, apresentam-se considerações acerca da adoção de modelos de mistura como passo inicial para a resolução do problema de BSS. Por fim, apresentam-se as conclusões do capítulo na Seção 4.5.

4.1 Formulação geral do problema

Sejam os sinais das fontes não observadas denotados por $s_i(n)$, para $n \in \mathbb{Z}$ e com $i = 1, 2, \dots, N_s$. Em geral, o índice i indica uma posição no espaço. Os sinais das misturas observadas são denotados por $x_\ell(n)$, para $n \in \mathbb{Z}$ e com $\ell = 1, 2, \dots, N_x$. Considera-se que os sinais assumem valores no conjunto numérico dos reais, *i.e.*, \mathbb{R} . Vislumbrando-se uma resolução no contexto de processamento em tempo discreto de sinais, considera-se ainda que os sinais estão representados em tempo discreto — *i.e.*, com variável independente $n \in \mathbb{Z}$ relacionada ao tempo, ou, mais precisamente, ao índice de iteração. Durante a formulação inicial do problema nesta seção e na Seção 4.2, não são considerados modelos estocásticos dos sinais das fontes ou das misturas.

A partir dos sinais de cada fonte e de cada mistura, o vetor de fontes é definido, por conveniência, como

$$\mathbf{s}(n) = [s_1(n) \ s_2(n) \ \cdots \ s_{N_s}(n)]^\top \quad (4.1)$$

e o vetor de misturas é definido como

$$\mathbf{x}(n) = [x_1(n) \ x_2(n) \ \cdots \ x_{N_x}(n)]^\top. \quad (4.2)$$

A relação matemática existente entre o vetor de fontes $\mathbf{s}(n)$ e o vetor de misturas $\mathbf{x}(n)$ pode ser dada, genericamente, por

$$\mathbf{x}(n) = \mathcal{H}\{\mathbf{s}(\cdot)\}, \quad (4.3)$$

em que \mathcal{H} é um mapeamento desconhecido de \mathbb{R}^{N_s} em \mathbb{R}^{N_x} , responsável por misturar as fontes que se deseja, posteriormente, separar (COMON; JUTTEN, 2010). A notação de (4.3) indica que o vetor $\mathbf{x}(n)$ depende de uma transformação \mathcal{H} aplicada ao conjunto de vetores $\{\mathbf{s}(\cdot)\}$ à entrada do sistema, para instantes de tempo menores ou iguais a n . Em outras palavras, essa notação leva em conta a causalidade do mapeamento de mistura e a eventual diversidade temporal, ou memória, que ele possa ter.

Genericamente, em um problema de separação cega ou não supervisionada de fontes, busca-se reconstruir os sinais das fontes $s_i(n)$ a partir apenas das misturas observadas $x_\ell(n)$. Portanto, é usual também levar em conta, na formulação do problema, o sistema responsável pela separação, bem como os sinais reconstruídos. Os sinais correspondentes às fontes estimadas ou reconstruídas são denotados por $y_k(n)$, para $n \in \mathbb{Z}$ e com $k = 1, 2, \dots, N_y$. Por conveniência, constitui-se um vetor de fontes estimadas dado por

$$\mathbf{y}(n) = [y_1(n) \ y_2(n) \ \cdots \ y_{N_y}(n)]^T, \quad (4.4)$$

que deve satisfazer

$$\mathbf{y}(n) = \mathcal{W}\{\mathbf{x}(\cdot)\}, \quad (4.5)$$

em que \mathcal{W} é um mapeamento de \mathbb{R}^{N_x} em \mathbb{R}^{N_y} , responsável por separar as fontes, *i.e.*, recuperá-las a partir das misturas observadas.

Na Figura 4, é apresentado um esquema simplificado dos principais elementos envolvidos no problema de BSS. O modelo considerado para esse problema envolve, no caso geral, sistemas de múltiplas entradas e múltiplas saídas (MIMO, do inglês *multiple-input and multiple-output*), tanto na etapa de mistura quanto na etapa de separação. Além disso, se o mapeamento \mathcal{H} for conhecido e existir mapeamento inverso \mathcal{H}^{-1} , então a escolha de $\mathcal{W} = \mathcal{H}^{-1}$ recuperaria as fontes a partir das misturas observadas. No entanto, nos problemas de BSS, não se conhece o mapeamento \mathcal{H} responsável por gerar as misturas, e, além disso, seu inverso pode não existir.

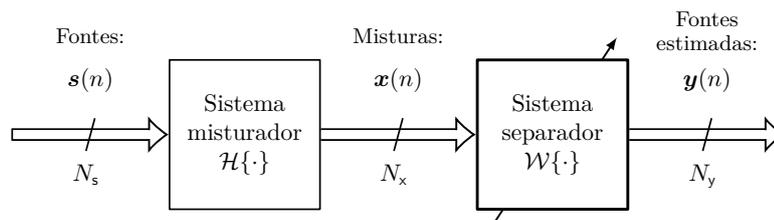


Figura 4 – Esquema simplificado dos principais elementos envolvidos no problema de separação cega de fontes, em que se deseja separar N_y fontes a partir apenas da observação de N_x misturas.

Fonte: autoria própria.

Nessa formulação do problema, considera-se, de forma genérica, que existem N_s fontes e N_x misturas. Quando $N_s = N_x$, o problema de BSS é dito igualmente determinado. No caso em que há mais fontes do que misturas, *i.e.*, $N_s > N_x$, o problema é dito subdeterminado. Quando $N_x > N_s$ e há mais misturas do que fontes, o problema é denominado sobredeterminado.

Até aqui, o problema de BSS foi apresentado de forma geral: não foram feitas, por exemplo, considerações sobre a estrutura interna do sistema misturador ou sobre eventuais características das fontes. Sem essas considerações adicionais, o problema inverso de separação é malposto — *i.e.*, não é possível garantir a existência ou a unicidade de solução (ASTER; BORCHERS; THURBER, 2019; COMON; JUTTEN, 2010). Isso significa que, com base apenas nos vetores de misturas observadas $\mathbf{x}(n)$, é impossível estimar adequadamente os vetores de fontes $\mathbf{s}(n)$ sem o uso de conhecimentos ou hipóteses adicionais. A função dessas hipóteses, que costumam ser incluídas no modelo do problema, é possibilitar a determinação de equações que permitam estimar adequadamente as fontes.

A fim de obter soluções para o problema de BSS, usualmente adotam-se modelos de mistura baseados em características hipotéticas — ou, eventualmente, conhecidas — tanto do sistema misturador quanto das fontes. Buscam-se, com a formulação desses modelos, a particularização do problema geral e a posterior obtenção de soluções para o respectivo problema particular. Desde os anos 1980, diversas soluções vêm sendo gradativamente apresentadas, na literatura, para casos particulares do problema geral apresentado nessa seção. As primeiras soluções foram obtidas para um modelo particular de sistema misturador, cujo estudo foi de considerável relevância no desenvolvimento subsequente de soluções para modelos mais elaborados (HÉRAULT; JUTTEN; ANS, 1985; COMON, 1992; CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; HYVÄRINEN; OJA, 2000). Trata-se do modelo de sistema misturador linear e instantâneo, introduzido na seção a seguir.

4.2 Misturas lineares e instantâneas

Inicialmente, apresenta-se a seguir a definição de um sistema MIMO linear e instantâneo (CARDOSO, 1998; HYVÄRINEN; OJA, 2000).

Definição 4.1. Um sistema MIMO é linear e instantâneo se, e somente se,

- (i) cada saída puder ser expressa como uma combinação linear das entradas, e
- (ii) as saídas forem instantâneas, *i.e.*, dependerem, em cada instante, somente dos valores das entradas nesse dado instante.

Adicionalmente, um sistema MIMO linear e instantâneo é invariante no tempo se, e somente se, os seus parâmetros forem funções constantes do tempo. Por simplicidade, considera-se ao longo do texto que, salvo menção explícita, um modelo linear e instantâneo também é invariante no tempo. ◁

No caso de um sistema misturador representado genericamente conforme (4.3), tem-se que as entradas são as fontes e as saídas são as misturas. Por conveniência, aborda-se o caso em que não há ruído aditivo nas observações das misturas. Se houver necessidade, a presença de ruído pode ser considerada em modelos mais completos (COMON, 1992; CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993).

Adotando-se um modelo de sistema misturador linear e instantâneo conforme a Definição 4.1 e as considerações feitas no parágrafo anterior, os sinais das misturas $x_\ell(n)$ podem ser expressos em função dos sinais das fontes $s_i(n)$ de acordo com a relação

$$x_\ell(n) = \sum_{i=1}^{N_s} h_{\ell,i} s_i(n), \quad (4.6)$$

para $\ell = 1, 2, \dots, N_x$, em que $h_{\ell,i}$ são os coeficientes constantes do sistema misturador. Nesse caso, as misturas são denominadas lineares e instantâneas. Por conveniência, (4.6) pode ser reescrita matricialmente como

$$\begin{bmatrix} x_1(n) \\ x_2(n) \\ \vdots \\ x_{N_x}(n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \cdots & h_{1,N_s} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & \cdots & h_{2,N_s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{N_x,1} & h_{N_x,2} & \cdots & h_{N_x,N_s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1(n) \\ s_2(n) \\ \vdots \\ s_{N_s}(n) \end{bmatrix}, \quad (4.7)$$

ou, na correspondente forma compacta,

$$\mathbf{x}(n) = \mathbf{H}\mathbf{s}(n), \quad (4.8)$$

em que o vetor de misturas $\mathbf{x}(n)$ é dado por (4.2), a matriz de coeficientes do sistema misturador (ou apenas matriz de mistura) $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_s}$ é dada por

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \cdots & h_{1,N_s} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & \cdots & h_{2,N_s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{N_x,1} & h_{N_x,2} & \cdots & h_{N_x,N_s} \end{bmatrix},$$

e o vetor de fontes $\mathbf{s}(n)$ é dado por (4.1).

Na obtenção de soluções para esse tipo particular de sistema misturador, é usual adotar-se um sistema separador que também seja linear e instantâneo. De fato, se o mapeamento de mistura for linear, instantâneo e bijetor, por exemplo, o mapeamento inverso correspondente também é linear e instantâneo. Com isso, a relação genérica de separação em (4.5) pode ser particularizada, conforme a Definição 4.1, para

$$\mathbf{y}(n) = \mathbf{W}\mathbf{x}(n), \quad (4.9)$$

em que o vetor de fontes estimadas $\mathbf{y}(n)$ é dado por (4.4) e o mapeamento \mathcal{W} foi substituído pela matriz de coeficientes do sistema separador (ou apenas matriz de separação) $\mathbf{W} \in$

$\mathbb{R}^{N_y \times N_x}$. Nessa formulação, os coeficientes em \mathbf{W} são considerados constantes, embora possam ser variantes no tempo a depender do tipo de solução escolhida. Substituindo-se (4.8) em (4.9), obtém-se, ainda, a relação útil entre fontes e fontes estimadas, dada por

$$\mathbf{y}(n) = \mathbf{M}\mathbf{s}(n), \quad (4.10)$$

em que $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N_y \times N_s}$ é a matriz de resposta combinada misturador-separador, dada por

$$\boxed{\mathbf{M} = \mathbf{W}\mathbf{H}.} \quad (4.11)$$

No seguinte exemplo, mostra-se de forma intuitiva que em problemas de BSS com sistema misturador linear e instantâneo, a falta de hipóteses no modelo sob consideração pode impossibilitar a obtenção de soluções.

Exemplo 4.1. Seja um problema de BSS igualmente determinado, com $N = N_s = N_x = N_y \geq 2$. Supõe-se que as fontes são misturadas por um sistema modelado como linear e instantâneo. A partir das misturas observadas, deseja-se estimar as fontes originais utilizando-se um sistema separador adequado.

Evidentemente, se a matriz de mistura $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ for não singular, então o problema pode ser resolvido tomando-se

$$\mathbf{W} = \mathbf{H}^{-1} \Leftrightarrow \mathbf{M} = \mathbf{I}_N,$$

em que $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é a matriz de separação, $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é a matriz de resposta combinada e \mathbf{I}_N denota a matriz identidade $N \times N$. A matriz \mathbf{H} é determinada se todos os seus N^2 elementos forem conhecidos. Se os elementos de \mathbf{H} forem desconhecidos, como ocorre em problemas de BSS, então são necessárias N^2 equações linearmente independentes para determiná-los (HYVÄRINEN; OJA, 2000). Em situações práticas, no entanto, não convém utilizar as equações do modelo do sistema misturador de (4.7), pois as fontes $s_i(n)$, para $i = 1, 2, \dots, N$, não são observadas. Portanto, há necessidade de adicionar, ao modelo de mistura, alguma hipótese adicional que possibilite a obtenção de equações que, por sua vez, permitam determinar \mathbf{H} . \triangleleft

Em virtude da falta de informações suficientes para a resolução do problema de BSS com o modelo de mistura até aqui considerado, um caminho seguido pela comunidade científica a partir do início do anos 1990 consistiu em adotar uma descrição estatística (*i.e.*, modelo estatístico) para os sinais das fontes. Em outras palavras, considerou-se um conjunto de hipóteses sobre as estatísticas das fontes que permitisse impor restrições à saída do sistema separador, levando à separação adequada das fontes (COMON, 1992; COMON, 1994; CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). Na próxima seção, são apresentadas algumas hipóteses usuais sobre as estatísticas das fontes, consideradas tanto de forma implícita quanto explícita nos primeiros estudos de BSS.

4.3 Modelo estocástico para as fontes

A dificuldade de resolver o problema de BSS de forma determinista¹, mesmo para o modelo simplificado de sistema misturador linear e instantâneo, suscita a ideia de adotar um modelo estocástico para as fontes. O objetivo ao fazer isso é simples: permitir a composição de equações linearmente independentes a fim de determinar, matematicamente, as incógnitas procuradas no problema de separação cega.

Como as fontes são sinais, *i.e.*, funções temporais, pode-se inicialmente pensar em modelá-las como processos estocásticos $\{\mathbf{s}(n)\}$ tais que

$$\mathbf{s}(n) = [s_1(n) \ s_2(n) \ \cdots \ s_{N_s}(n)]^\top.$$

No modelo de sistema misturador linear e instantâneo conforme (4.8), as misturas também resultam processos estocásticos $\{\mathbf{x}(n)\}$, dados por

$$\mathbf{x}(n) = \mathbf{H}\mathbf{s}(n), \quad (4.12)$$

em que

$$\mathbf{x}(n) = [x_1(n) \ x_2(n) \ \cdots \ x_{N_x}(n)]^\top.$$

As fontes estimadas também são estocásticas nesse modelo, sendo denotadas por $\{\mathbf{y}(n)\}$, em que

$$\mathbf{y}(n) = [y_1(n) \ y_2(n) \ \cdots \ y_{N_y}(n)]^\top,$$

e satisfazem, por sua vez,

$$\mathbf{y}(n) = \mathbf{W}\mathbf{x}(n) \quad (4.13)$$

e

$$\mathbf{y}(n) = \mathbf{M}\mathbf{s}(n) \quad (4.14)$$

conforme (4.9) e (4.10).

A adoção de um modelo estocástico particular para as fontes envolve, ainda, estabelecer hipóteses sobre seu comportamento estatístico ao longo do tempo e do espaço. Esse comportamento pode variar consideravelmente ao serem comparados modelos de fontes de origens distintas (*e.g.*, voz e sinais biomédicos), e pode não ser conhecido com a precisão necessária para compor um modelo razoável.

Por simplicidade e generalidade, no contexto de misturas lineares e instantâneas, inicialmente considerou-se que o comportamento estatístico das fontes não varia com o

¹ Entende-se por determinista, aqui, a resolução do problema de BSS sem necessariamente considerar um modelo estatístico para as misturas. Em alguns casos, a consideração de certas informações *a priori* acerca das misturas ou das fontes pode permitir a resolução determinista do problema de BSS. É o que ocorre, por exemplo, em separação cega de fontes baseada em esparsidade, em que hipóteses essencialmente geométricas são utilizadas a fim de obter a separação (LI; CICHOCKI; AMARI, 2004; COMON; JUTTEN, 2010). Entretanto, sem se dispor de quaisquer informações *a priori* sobre o modelo de mistura apresentado na Seção 4.2, a abordagem usual envolve a adoção de um modelo estatístico.

tempo (CARDOSO, 1998; HYVÄRINEN; OJA, 2000). Essa hipótese equivale a ignorar, no modelo, qualquer estrutura estatística temporal das fontes e analisar apenas as suas distribuições marginais ao longo do tempo (HYVÄRINEN, 2013). Abordam-se, a seguir, as implicações dessa hipótese na formulação feita, até aqui, do problema de BSS. Na Subseção 4.3.1, considera-se a hipótese de fontes como processos iid e, na Subseção 4.3.2, aborda-se a hipótese de independência espacial das fontes.

4.3.1 Fontes independentes e identicamente distribuídas no tempo

Historicamente, considerou-se a hipótese implícita e simplificadora de que o processo estocástico vetorial das fontes $\{\mathbf{s}(n)\}$ é independente e identicamente distribuído no tempo (iid) (HYVÄRINEN; OJA, 2000). Conforme abordado genericamente na Subseção 2.1.3, supor que $\{\mathbf{s}(n)\}$ é iid corresponde a ignorar a estrutura estatística temporal desse processo vetorial — *i.e.*, suas variações estatísticas ao longo do tempo e interdependências temporais. Eventualmente, modelos mais precisos e que levem em conta essas variações podem ser formulados, mas às custas de uma perda de generalidade e tratamento matemático mais sofisticado (HYVÄRINEN, 2013).

Inicialmente, a consideração da hipótese que $\{\mathbf{s}(n)\}$ é iid implica simplificações consideráveis no modelo estocástico geral. Conforme abordado no Capítulo 2, uma realização de um processo estocástico iid pode ser interpretada como diversos sorteios independentes, feitos ao longo do tempo, de um mesmo vetor aleatório. Logo, a adoção de um modelo iid conforme a Definição 2.8 para o processo vetorial das fontes $\{\mathbf{s}(n)\}$ implica sua substituição no modelo de mistura por um vetor aleatório \mathbf{s} dado por

$$\mathbf{s} = [s_1 \ s_2 \ \cdots \ s_{N_s}]^T. \quad (4.15)$$

Considerando-se misturas lineares e instantâneas, decorrem simplificações similares para os processos das misturas e das fontes estimadas. Isso se deve à seguinte proposição.

Proposição 4.1. *Seja o modelo de sistema misturador linear e instantâneo dado por $\mathbf{x}(n) = \mathbf{H}\mathbf{s}(n)$, em que $\{\mathbf{x}(n)\}$ é o processo estocástico vetorial das misturas, $\{\mathbf{s}(n)\}$ é o processo estocástico vetorial das fontes e $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_s}$ é a matriz fixa de mistura. Seja um sistema separador linear e instantâneo tal que $\mathbf{y}(n) = \mathbf{W}\mathbf{x}(n) = \mathbf{M}\mathbf{s}(n)$, em que $\{\mathbf{y}(n)\}$ é o processo estocástico vetorial das fontes estimadas, $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N_y \times N_x}$ é a matriz fixa de separação e $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N_y \times N_s}$ é a matriz fixa de resposta combinada. Pode-se afirmar que, se $\{\mathbf{s}(n)\}$ for iid, então*

(i) $\{\mathbf{x}(n)\}$ é iid, e

(ii) $\{\mathbf{y}(n)\}$ é iid.

Demonstração. A prova é esboçada apenas para o processo estocástico vetorial de misturas; a demonstração para as fontes estimadas é análoga. Seja um conjunto qualquer finito de $k \geq 2$ instantes distintos $\{n_1, n_2, \dots, n_k\} \subset \mathbb{Z}$. A função distribuição de probabilidade conjunta dos vetores $\underline{\mathbf{x}}(n_1), \underline{\mathbf{x}}(n_2), \dots, \underline{\mathbf{x}}(n_k)$, conforme a Definição 2.4, é dada por

$$F_{\underline{\mathbf{x}}(n_1), \underline{\mathbf{x}}(n_2), \dots, \underline{\mathbf{x}}(n_k)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k) = \Pr\{\underline{\mathbf{x}}(n_1) \leq \mathbf{x}_1, \underline{\mathbf{x}}(n_2) \leq \mathbf{x}_2, \dots, \underline{\mathbf{x}}(n_k) \leq \mathbf{x}_k\}. \quad (4.16)$$

A partir de (4.12) referente ao modelo de mistura, tem-se $\underline{\mathbf{x}}(n_\alpha) = \mathbf{H}\underline{\mathbf{s}}(n_\alpha)$ para $\alpha = 1, 2, \dots, k$. Sendo assim, o evento

$$\{\underline{\mathbf{x}}(n_\alpha) \leq \mathbf{x}_\alpha\} \quad (4.17)$$

pode ser equivalentemente expresso como

$$\{\mathbf{H}\underline{\mathbf{s}}(n_\alpha) \leq \mathbf{x}_\alpha\} = \{\underline{\mathbf{s}}(n_\alpha) \in \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{N_s} \mid \mathbf{H}\mathbf{v} \leq \mathbf{x}_\alpha\}\}.$$

Portanto, a função distribuição de probabilidade conjunta de (4.16) pode ser reescrita conforme

$$\begin{aligned} F_{\underline{\mathbf{x}}(n_1), \underline{\mathbf{x}}(n_2), \dots, \underline{\mathbf{x}}(n_k)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k) &= \Pr\{\underline{\mathbf{s}}(n_1) \in \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{N_s} \mid \mathbf{H}\mathbf{v} \leq \mathbf{x}_1\}, \\ &\quad \underline{\mathbf{s}}(n_2) \in \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{N_s} \mid \mathbf{H}\mathbf{v} \leq \mathbf{x}_2\}, \\ &\quad \dots, \underline{\mathbf{s}}(n_k) \in \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{N_s} \mid \mathbf{H}\mathbf{v} \leq \mathbf{x}_k\}\}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Como $\{\underline{\mathbf{s}}(n)\}$ é iid, pela Definição 2.8-(i) tem-se que os vetores $\underline{\mathbf{s}}(n_1), \underline{\mathbf{s}}(n_2), \dots, \underline{\mathbf{s}}(n_k)$ são mutuamente independentes. Logo, pode-se reescrever (4.18) como

$$\begin{aligned} F_{\underline{\mathbf{x}}(n_1), \underline{\mathbf{x}}(n_2), \dots, \underline{\mathbf{x}}(n_k)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k) &= \Pr\{\underline{\mathbf{s}}(n_1) \in \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{N_s} \mid \mathbf{H}\mathbf{v} \leq \mathbf{x}_1\}\} \\ &\quad \times \Pr\{\underline{\mathbf{s}}(n_2) \in \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{N_s} \mid \mathbf{H}\mathbf{v} \leq \mathbf{x}_2\}\} \\ &\quad \times \dots \times \Pr\{\underline{\mathbf{s}}(n_k) \in \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{N_s} \mid \mathbf{H}\mathbf{v} \leq \mathbf{x}_k\}\}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Finalmente, substituindo-se os eventos do lado direito de (4.19) pelas expressões originais em (4.17), tem-se

$$\begin{aligned} F_{\underline{\mathbf{x}}(n_1), \underline{\mathbf{x}}(n_2), \dots, \underline{\mathbf{x}}(n_k)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k) &= \Pr\{\underline{\mathbf{x}}(n_1) \leq \mathbf{x}_1\} \times \Pr\{\underline{\mathbf{x}}(n_2) \leq \mathbf{x}_2\} \\ &\quad \times \dots \times \Pr\{\underline{\mathbf{x}}(n_k) \leq \mathbf{x}_k\}. \end{aligned}$$

Conforme a Definição 2.8-(i), o processo $\{\underline{\mathbf{x}}(n)\}$ é independente no tempo.

Adicionalmente, como $\{\underline{\mathbf{s}}(n)\}$ é iid, pela Definição 2.8-(ii) tem-se que os vetores

$$\dots, \underline{\mathbf{s}}(-1), \underline{\mathbf{s}}(0), \underline{\mathbf{s}}(1), \dots$$

são identicamente distribuídos. Portanto, quaisquer vetores $\underline{\mathbf{x}}(n_\alpha) = \mathbf{H}\underline{\mathbf{s}}(n_\alpha)$ e $\underline{\mathbf{x}}(n_\beta) = \mathbf{H}\underline{\mathbf{s}}(n_\beta)$, com $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, k$, têm as mesmas distribuições, pois $\underline{\mathbf{s}}(n_\alpha)$ e $\underline{\mathbf{s}}(n_\beta)$ são identicamente distribuídos e \mathbf{H} é constante em função do tempo. A partir da Definição 2.8-(ii), tem-se que $\{\underline{\mathbf{x}}(n)\}$ é identicamente distribuído. Como esse processo também é independente no tempo, então $\{\underline{\mathbf{x}}(n)\}$ é iid. \square

Sob as condições da Proposição 4.1, os processos estocásticos vetoriais das misturas $\{\mathbf{x}(n)\}$ e das fontes estimadas $\{\mathbf{y}(n)\}$, por serem iid, também podem ser substituídos no modelo por vetores aleatórios

$$\mathbf{x} = [\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \cdots \ \mathbf{x}_{N_x}]^T \quad (4.20)$$

e

$$\mathbf{y} = [\mathbf{y}_1 \ \mathbf{y}_2 \ \cdots \ \mathbf{y}_{N_y}]^T, \quad (4.21)$$

respectivamente. Sendo assim, os procedimentos de mistura e de separação em (4.12), (4.13) e (4.14) podem ser reescritos conforme

$$\boxed{\mathbf{x} = \mathbf{H}\mathbf{s}} \quad (4.22)$$

e

$$\boxed{\mathbf{y} = \mathbf{W}\mathbf{x} = \mathbf{M}\mathbf{s}.} \quad (4.23)$$

Sob as considerações feitas, os procedimentos de mistura e de separação podem ser interpretados como simples transformações lineares aplicadas a vetores aleatórios. Na Figura 5, é mostrado um esquema simplificado dos principais elementos do problema de BSS para o modelo de mistura considerado até aqui.

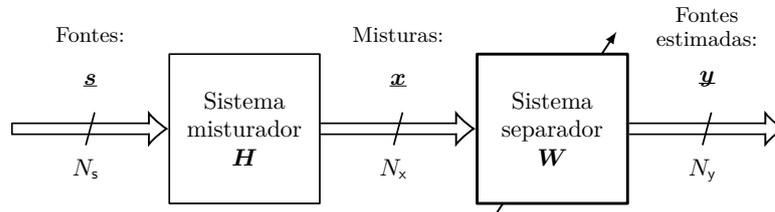


Figura 5 – Esquema simplificado dos principais elementos envolvidos no problema de separação cega de fontes para o modelo de sistema misturador linear e instantâneo com fontes iid.

Fonte: autoria própria.

Em termos práticos, a consideração de fontes iid no modelo de misturas lineares e instantâneas ainda traz uma outra conveniência. Como visto em mais detalhes no Capítulo 2, os parâmetros da distribuição de probabilidade do vetor aleatório \mathbf{x} — tais como média, matriz de covariância, entre outros — podem ser estimados a partir de uma única realização do processo estocástico vetorial $\{\mathbf{x}(n)\}$ observada ao longo do tempo.

Nesse ponto, é importante ressaltar que na literatura costumam-se encontrar frases como “as fontes são independentes e identicamente distribuídas (iid)” — o que pode gerar confusão. Seria mais preciso dizer que “assume-se, como hipótese no modelo, que o processo estocástico vetorial $\{\mathbf{s}(n)\}$, correspondente às fontes, é iid”. Primeiramente, porque dizer que “as fontes são iid” pode levar à interpretação errônea de que processos escalares de fontes distintas $\{\mathbf{s}_i(n)\}$, com $i = 1, 2, \dots, N_s$, são mutuamente independentes. No contexto de BSS, a palavra “independência” na sigla iid se refere à independência no tempo e não no espaço. Em segundo lugar, pois quando se diz “as fontes são iid”, é

necessário enfatizar que não apenas os processos escalares $\{\underline{s}_i(n)\}$ correspondentes a cada uma das fontes são iid individualmente, mas também que o processo vetorial $\{\underline{\mathbf{s}}(n)\}$ é iid. A condição sobre o processo vetorial é mais forte, pois garante a independência entre fontes distintas para instantes distintos, *e.g.*, $\underline{s}_1(0)$ e $\underline{s}_2(1)$. Mesmo que o processo vetorial $\{\underline{\mathbf{s}}(n)\}$ seja iid, isso não implica a independência mútua espacial das variáveis aleatórias $\underline{s}_1(n_0), \underline{s}_2(n_0), \dots, \underline{s}_{N_s}(n_0)$, obtidas tomando-se o processo $\{\underline{\mathbf{s}}(n)\}$ em um instante fixo qualquer $n_0 \in \mathbb{Z}$.

Embora resulte em algumas simplificações, a consideração de fontes iid no modelo de BSS essencialmente não contribui para encontrar equações linearmente independentes que permitam determinar \mathbf{W} . Na prática, apenas sorteios de $\underline{\mathbf{x}}$ são observados e deseja-se estimar $\underline{\mathbf{s}}$, escolhendo-se uma matriz \mathbf{W} adequada, sem conhecer \mathbf{H} . A fim de possibilitar a separação cega, uma opção intuitiva seria incluir no modelo de fontes $\underline{\mathbf{s}}$ alguma propriedade estatística que, quando recuperada à saída $\underline{\mathbf{y}}$ do sistema separador, permitisse recuperar também as fontes. Tradicionalmente, utiliza-se a hipótese de independência espacial das fontes como possibilitadora da imposição de restrições para a separação (COMON, 1994). Essa hipótese é abordada a seguir em maior detalhe.

4.3.2 Fontes mutuamente independentes no espaço

Considera-se o problema de BSS para o modelo de sistema misturador linear e instantâneo com fontes iid. As fontes são denotadas por suas variáveis aleatórias associadas \underline{s}_i , com $i = 1, 2, \dots, N_s$, conforme estipulado em (4.15). Nesse contexto, a hipótese de independência espacial das fontes diz respeito a algum tipo de independência das variáveis aleatórias $\underline{s}_1, \underline{s}_2, \dots, \underline{s}_{N_s}$. Em outras palavras, a independência espacial se refere à independência de variáveis aleatórias correspondentes a fontes distintas.

De acordo com as relações apresentadas ao longo do Capítulo 2, a independência espacial mútua das fontes é mais restritiva não apenas do que a sua não correlação espacial, mas também do que a sua independência espacial em pares (FELLER, 1968–1971). Quanto à separação das fontes, pode-se indagar se algum desses tipos de independência pode ser considerado no modelo de fontes e, quando recuperado à saída do sistema separador, implique a separação adequada de fontes. Conforme Castella e Comon (2007), a independência em pares, em geral, não é hipótese suficiente para garantir a separabilidade das fontes. Além disso, modelos de fontes não correlacionadas também não são suficientes para a separação cega das fontes iid.

No contexto de sistema misturador linear e instantâneo com fontes iid, é usual incluir-se no modelo a hipótese mais forte de que as fontes são mutuamente independentes no espaço (COMON, 1994; CARDOSO, 1998). Isso significa supor que as variáveis aleatórias $\underline{s}_1, \underline{s}_2, \dots, \underline{s}_{N_s}$ são mutuamente independentes de acordo com a Definição 2.1. Pode-se mostrar que, sob certas condições, a hipótese de independência espacial mútua das fontes

é suficiente para permitir a separação cega a partir da imposição de independência à saída do sistema separador (COMON, 1992; COMON, 1994). As condições que devem ser satisfeitas pelo modelo estatístico de mistura para que isso ocorra são conhecidas, na literatura, como condições de separabilidade das fontes (ERIKSSON; KOIVUNEN, 2004). Essas condições são abordadas em maior detalhe no próximo capítulo.

Na seção a seguir, apresentam-se considerações sobre os principais modelos de mistura (*i.e.*, sistema misturador e fontes) abordados até aqui. Também aborda-se a questão da adoção de um modelo de mistura como passo necessário para a resolução do problema geral de BSS.

4.4 Considerações sobre os modelos estocásticos de mistura

Ao longo das Seções 4.1 a 4.3, foram apresentados diferentes modelos para o problema de BSS. Partindo-se da formulação geral apresentada na Seção 4.1, o modelo geral do problema foi sendo gradativamente particularizado, obtendo-se então o modelo da Subseção 4.3.1 com um sistema misturador linear e instantâneo e com fontes iid. Por fim, na Subseção 4.3.2, foi considerada a adição da hipótese de independência espacial mútua como possibilitadora da separação cega de fontes. A fim de sedimentar os conceitos apresentados até aqui, na Tabela 1 é apresentado um resumo da notação dos modelos abordados ao longo desse capítulo.

Tabela 1 – Resumo da notação utilizada nos modelos abordados para sistemas misturadores e fontes.

	Modelo	Fontes	Misturas	Fontes estimadas
1.	Problema geral (Seção 4.1)	$\mathbf{s}(\cdot)$	$\mathbf{x}(n) = \mathcal{H}\{\mathbf{s}(\cdot)\}$ (Eq. (4.3))	$\mathbf{y}(n) = \mathcal{W}\{\mathbf{x}(\cdot)\}$ (Eq. (4.5))
2.	Misturas: lineares e instantâneas (Seção 4.2)	$\mathbf{s}(n)$	$\mathbf{x}(n) = \mathbf{H}\mathbf{s}(n)$ (Eqs. (4.8))	$\mathbf{y}(n) = \mathbf{W}\mathbf{x}(n) = \mathbf{M}\mathbf{s}(n)$ (Eqs. (4.9) e (4.10))
3.	Misturas: lineares e instantâneas Fontes: estocásticas (Seção 4.3)	$\underline{\mathbf{s}}(n)$	$\underline{\mathbf{x}}(n) = \mathbf{H}\underline{\mathbf{s}}(n)$ (Eq. (4.12))	$\mathbf{y}(n) = \mathbf{W}\underline{\mathbf{x}}(n) = \mathbf{M}\underline{\mathbf{s}}(n)$ (Eqs. (4.13) e (4.14))
4.	Misturas: lineares e instantâneas Fontes: estocásticas e iid, <i>i.e.</i> , vetores aleatórios (Subseção 4.3.1)	$\underline{\mathbf{s}}$	$\underline{\mathbf{x}} = \mathbf{H}\underline{\mathbf{s}}$ (Eq. (4.22))	$\mathbf{y} = \mathbf{W}\underline{\mathbf{x}} = \mathbf{M}\underline{\mathbf{s}}$ (Eq. (4.23))

Fonte: autoria própria.

Transitando-se ao longo das linhas da Tabela 1, do modelo 1 até modelo 4, a notação das equações para o vetor de misturas e para o vetor de fontes estimadas passa por sucessivas particularizações. O modelo 4, obtido por último, foi o primeiro tipo de modelo para o qual foram propostas soluções no contexto de BSS (HÉRAULT; JUTTEN; ANS,

1985). Além disso, foi esse o modelo considerado nos primeiros estudos envolvendo limites teóricos de separação (COMON, 1992; COMON, 1994).

Diversos tipos de modelos mais abrangentes foram sendo posteriormente considerados na literatura — tanto na proposição de soluções, quanto no estudo de propriedades teóricas de separação. Entre modelos de sistema misturador, destacam-se os sistemas deterministas lineares e convolutivos (YELLIN; WEINSTEIN, 1994; NGUYEN THI; JUTTEN, 1995; COMON, 1996; MOREAU; PESQUET, 1997; COMON, 2004; COMON; JUTTEN, 2010; VINCENT et al., 2014), sistemas não lineares (BABAIE-ZADEH, 2002) e sistemas variantes no tempo (VIELVA et al., 2002; HILD; ERDOĞMUŞ; PRÍNCIPE, 2002; RIVET et al., 2014). Quanto a modelos para as fontes, foram adotados modelos estocásticos de fontes não iid (*e.g.*, estacionárias com dependência temporal, não estacionárias, etc.) (ABED-MERAIM; XIANG; HUA, 2000; PHAM; CARDOSO, 2001; COMON; JUTTEN, 2010), além de hipóteses adicionais como esparsidade (LI; CICHOCKI; AMARI, 2004; LI et al., 2014) e não negatividade (EWERT et al., 2014). A consideração de hipóteses adicionais para as fontes pode também estar relacionada à necessidade de ter equações adicionais para a resolução do problema; trata-se do que ocorre, por exemplo, em problemas de separação subdeterminados (COMON; RAJIH, 2006; LI et al., 2014).

Raramente, pode haver situações em que um modelo reflete exatamente o que ocorre em um dado cenário real. Nesse caso, o modelo está em sintonia com a realidade e o funcionamento das soluções propostas para esse modelo não sofre degradação por eventuais características não modeladas. No entanto, usualmente o modelo não corresponde exatamente o que ocorre na realidade. Nessa situação, o desempenho de soluções propostas pode ou não sofrer degradação significativa. Para um modelo refletir a realidade de forma adequada, em geral, é necessário adicionar a ele um conjunto de conhecimentos prévios — que podem, por exemplo, ser obtidos de forma experimental. Se, por exemplo, as distribuições das fontes forem previamente conhecidas, podem-se considerá-las no modelo estocástico para as fontes — é o que acontece no modelo usual do problema de desconvolução cega multiusuário de canais de comunicação (GODARD, 1980; DONOHO, 1981).

Por fim, muitos dos modelos mais elaborados são formulados tomando-se por base, como “blocos de construção”, modelos mais simples tais como o modelo 4 em conjunto com a hipótese de fontes mutuamente independentes no espaço. Apesar de sua simplicidade e particularidade, esse modelo é utilizado em diversos tipos de problemas de BSS e tem levado a bons resultados, por exemplo, na área de sinais biomédicos (CARDOSO, 1998).

4.5 Conclusões

Em um problema de BSS, usualmente as fontes não são observadas e o sistema misturador é desconhecido, tendo-se acesso apenas às observações das misturas. A fim

de resolver esse problema, é fundamental assumir, mesmo que hipoteticamente, algum modelo para as misturas. Caso contrário, não é possível obter equações cuja resolução permita determinar a transformação inversa que separa fontes adequadamente. Além de permitir simplificar o tratamento matemático do problema, a adoção de um modelo tem como função tornar possível a sua resolução.

Na Seção 4.1, o problema de BSS foi apresentado de forma geral, sendo particularizado para o modelo de sistema misturador linear e instantâneo na Seção 4.2. Embora não se trate de um modelo realista em alguns casos práticos, acredita-se que a compreensão do problema de separação de fontes a partir desse modelo é um ponto inicial fundamental para o entendimento aprofundado de modelos mais elaborados e de soluções avançadas (CARDOSO, 1998).

Em seguida, na Seção 4.3, abordou-se a questão da descrição estatística para as fontes no problema de separação com modelo de misturas lineares e instantâneas. Na Subseção 4.3.1, apresentou-se a hipótese de fontes iid, que em conjunto com o modelo de sistema misturador linear e instantâneo, permite deixar de lado a diversidade temporal das séries temporais envolvidas no modelo estocástico. Isso facilita a formulação do problema de separação, que passa a envolver apenas vetores aleatórios no lugar de processos estocásticos vetoriais (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001). Além disso, a compreensão dos processos estocásticos como vetores aleatórios possibilita que estatísticas desses vetores sejam adequadamente estimadas ao longo do tempo.

Posteriormente, na Subseção 4.3.2, abordou-se de forma introdutória a hipótese de independência espacial mútua das fontes, de modo a viabilizar algum procedimento de separação cega. De fato, em sistemas físicos, muitas vezes a hipótese de independência espacial mútua é razoável para as fontes que se deseja separar. No entanto, ela não precisa ser exatamente verdadeira na prática para ser considerada e permitir a separação adequada das fontes (HYVÄRINEN; OJA, 2000; COMON; JUTTEN, 2010).

Ao longo dos capítulos seguintes, aborda-se o problema de BSS adotando-se o modelo de misturas lineares e instantâneas com fontes iid (*i.e.*, o modelo 4 da Tabela 1) com a hipótese adicional de fontes mutuamente independentes no espaço. Além disso, nos próximos capítulos, considera-se o problema de separação de fontes igualmente determinado com $N = N_s = N_x = N_y$. A partir desse ponto, podem ser levantados dois tipos de questão:

- (i) Sob quais condições a imposição de independência estatística à saída do sistema separador recupera as fontes mutuamente independentes?
- (ii) Como é possível, na prática, realizar a imposição de independência estatística à saída do sistema separador?

A questão (i) é respondida em detalhes no Capítulo 5, em que enfatizam-se as condições adicionais que o modelo de sistema misturador linear e instantâneo com fontes iid e mutuamente independentes no espaço deve satisfazer para que a separação por imposição

de independência seja possível. A demonstração matemática desse resultado sobre a separabilidade das fontes, que se provou um marco na área de BSS, foi obtida apenas no início dos anos 1990. Revisitá-lo, no contexto de BSS, é importante para compreender os limites teóricos de separação.

Já a questão (ii) começa a ser respondida, de uma maneira particular, no Capítulo 6. Nesse capítulo, cumulantes de ordem superior são utilizados para realizar a separação de fontes de maneira algébrica. Nesse caso particular, a imposição de independência aparece inicialmente de maneira implícita. Porém, no Capítulo 7, por meio da interpretação do problema de separação do ponto de vista de otimização, evidenciam-se de maneira mais clara princípios que levam à separação, tanto para métodos algébricos quanto para outros métodos.

5 SEPARABILIDADE E O TEOREMA DE DARMOIS–SKITOVICH

Tirando-se proveito da hipótese de independência espacial mútua para o conjunto de fontes, introduziu-se no Capítulo 4 a ideia de separação por recuperação de independência à saída do sistema separador como tática para separar as fontes de forma cega (HÉRAULT; JUTTEN; ANS, 1985; CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; HYVÄRINEN; OJA, 2000). As condições teóricas adicionais que o modelo de mistura deve satisfazer para que seja possível recuperar adequadamente as fontes segundo esse princípio, conhecidas como condições de separabilidade, são o assunto deste capítulo. Essas condições podem ser obtidas aplicando-se, ao problema de separação de fontes, um resultado denominado teorema de Darmois–Skitovich, provado em estudos de análise fatorial da área de estatística (DARMOIS, 1953; COMON, 1994).

Neste capítulo, apresenta-se a demonstração das condições de separabilidade das fontes. Partindo-se de teoremas preliminares da área de estatística que culminaram no teorema de Darmois–Skitovich, revisitam-se então as condições de separabilidade para misturas lineares e instantâneas com fontes iid e mutuamente independentes no espaço. Na Seção 5.1, enunciam-se e comentam-se teoremas preliminares conhecidos e úteis no contexto em questão. Com base nesses teoremas, na Seção 5.2 apresenta-se uma demonstração simplificada para o teorema de Darmois–Skitovich, inspirada em Kagan, Linnik e Rao (1973). Com base nesse teorema, na Seção 5.3 aborda-se o teorema decorrente provado por P. Comon, que garante a separabilidade das fontes no modelo de separação considerado. Na Seção 5.4, apresentam-se as conclusões do capítulo.

5.1 Teoremas preliminares

A seguir, são apresentados três resultados principais, *i.e.*,

- ◇ o teorema de Cramér, provado em 1936 na área de estatística, sobre a decomposição linear de uma variável aleatória gaussiana (CRAMÉR, 1970);
- ◇ o teorema de Marcinkiewicz–Dugué, provado em 1951 na área de estatística, sobre restrições acerca de funções características com expoente polinomial (DUGUÉ, 1951);
- ◇ o lema de Darmois, sobre equações funcionais e provado em 1953, que trata da decomposição de uma função contínua multivariável em uma soma de funções de uma única variável cada (DARMOIS, 1953).

Esses resultados são utilizados, posteriormente, na demonstração do teorema de Darmois–Skitovich.

Teorema 5.1 (Cramér, 1936). *Sejam $\underline{u}_1, \underline{u}_2, \dots, \underline{u}_N$ variáveis aleatórias reais mutuamente independentes. Se, para constantes reais a_1, a_2, \dots, a_N , a soma*

$$\underline{v} = \sum_{i=1}^N a_i \underline{u}_i \quad (5.1)$$

for gaussiana, então todas as variáveis aleatórias \underline{u}_i para as quais vale $a_i \neq 0$ também são gaussianas.

Esse teorema foi inicialmente conjecturado por P. Lévy. Sua demonstração foi feita por H. Cramér em 1936 e pode ser encontrada em Cramér (1970), Linnik e Ostrovskii (1977). Curiosamente, trata-se da recíproca de um resultado amplamente conhecido em estatística: que a combinação linear de variáveis aleatórias gaussianas independentes também é gaussiana (CRAMÉR, 1970; PAPOULIS; PILLAI, 2002). A demonstração do Teorema 5.1, no entanto, é muito menos evidente que a prova da sua recíproca pois requer conceitos sobre a convergência de funções de integrais e sobre fundamentos de funções inteiras.

Pode-se contrastar o Teorema 5.1 com o teorema central do limite, largamente utilizado em estatística. Em linhas gerais, se $\underline{u}_1, \underline{u}_2, \dots, \underline{u}_N$ forem variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas, à medida que N tende ao infinito, a distribuição de \underline{v} em (5.1) tende, em um sentido probabilístico, a uma distribuição gaussiana (PAPOULIS; PILLAI, 2002; CRAMÉR, 1970). Com base nesse fato, seria possível alegar que, como o teorema central do limite não restringe as variáveis aleatórias somadas a serem gaussianas, o Teorema 5.1 estaria errado. Porém, não é esse o caso: enquanto no teorema central do limite considera-se o limite da distribuição da soma de uma infinidade de variáveis aleatórias independentes e não necessariamente gaussianas, no Teorema 5.1 trata-se da distribuição exata da soma de uma quantidade finita de variáveis aleatórias independentes.

Teorema 5.2 (Marcinkiewicz–Dugué, 1951). *Seja \underline{u} uma variável aleatória real cuja função característica $\Phi_{\underline{u}} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ é dada por $\Phi_{\underline{u}}(\omega) = E[\exp(j\omega\underline{u})]$ conforme a Definição 2.13. As únicas variáveis aleatórias que possuem função característica da forma*

$$\Phi_{\underline{u}}(\omega) = e^{p(\omega)}, \quad (5.2)$$

em que $p : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ é um polinômio, são as variáveis aleatórias constantes¹ e as variáveis aleatórias gaussianas.

¹ Entende-se por variável aleatória constante aquela variável que assume um único valor com probabilidade um. Rigorosamente, tais variáveis também podem assumir outros valores; mas isso ocorre com probabilidade zero. Intuitivamente, a distribuição de uma variável aleatória constante pode ser compreendida como o limite de uma gaussiana quando a sua variância tende a zero. Na literatura, uma distribuição desse tipo é denominada degenerada (BREIMAN, 1992). Porém, ao lidar na prática com funções distribuição de probabilidade, a distinção conceitual entre uma variável aleatória constante e uma constante numérica não aleatória pode ser ignorada.

Alguns casos particulares desse teorema foram observados na tese de M. G. Kunitz em 1937. Sua demonstração geral foi feita por M. Marcinkiewicz em 1940. Além disso, D. Dugué indicou o teorema em 1939 e apresentou uma prova mais curta em 1951 (DUGUÉ, 1951).

A dedução desse teorema é consideravelmente complicada: utiliza conceitos de análise complexa e funções meromórficas (*i.e.*, funções analíticas exceto em alguns pontos isolados denominados polos). Basicamente, a dedução é feita estabelecendo-se condições sobre o polinômio p para que $\Phi_{\underline{u}}$, com $\Phi_{\underline{u}}(\omega) = e^{p(\omega)}$, seja uma função característica válida.

No exemplo a seguir, apresentado para tornar mais evidentes alguns aspectos do Teorema 5.2, determinam-se todas as funções características e suas correspondentes funções densidade de probabilidade para polinômios do expoente com grau máximo igual a dois.

Exemplo 5.1. Seja \underline{u} uma variável aleatória real com função densidade de probabilidade $f_{\underline{u}}$ e função característica $\Phi_{\underline{u}}(\omega) = e^{p(\omega)}$, em que $\omega \in \mathbb{R}$ e p é um polinômio tal que $\text{grau}(p) \leq 2$. Primeiramente, recorda-se que a função característica de uma variável aleatória \underline{u} , com função densidade de probabilidade $f_{\underline{u}}$, é igual à transformada de Fourier de $f_{\underline{u}}$ com o sinal de frequência trocado. De fato, expandindo-se a esperança matemática na definição de $\Phi_{\underline{u}}$, pode-se reescrever essa função característica como

$$\Phi_{\underline{u}}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{j\omega u} f_{\underline{u}}(u) du.$$

Com isso em mente, os seguintes três casos coletivamente exaustivos para $\text{grau}(p) \leq 2$ são considerados:

◇ p constante: Como $f_{\underline{u}}$ tem área unitária, então

$$\Phi_{\underline{u}}(0) = 1. \quad (5.3)$$

Com p constante, obtém-se $p(\omega) = 0$ para todo $\omega \in \mathbb{R}$. Portanto, $\Phi_{\underline{u}}(\omega) = 1$ para todo $\omega \in \mathbb{R}$ e \underline{u} é uma variável aleatória com função densidade de probabilidade

$$f_{\underline{u}}(u) = \delta(u),$$

em que $\delta(\cdot)$ denota, aqui, o delta de Dirac. Assim, \underline{u} é variável aleatória constante e vale zero com probabilidade um.

◇ $\text{grau}(p) = 1$: Como $f_{\underline{u}}$ é real, então para todo $\omega \in \mathbb{R}$ vale, por propriedades da transformada de Fourier,

$$\Phi_{\underline{u}}(-\omega) = \Phi_{\underline{u}}^*(\omega), \quad (5.4)$$

em que $(\cdot)^*$ denota o complexo conjugado. Supondo $p(\omega) = \alpha\omega + \beta$, com $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ e $\alpha \neq 0$, as restrições dadas por (5.3) e (5.4) implicam $\beta = 0$ e α puramente imaginário. Logo, deve-se ter p da forma $p(\omega) = j\omega u_0$, com $u_0 \in \mathbb{R}$ e $u_0 \neq 0$, o que implica

$$f_{\underline{u}}(u) = \delta(u - u_0).$$

Nesse caso, \underline{u} é variável aleatória constante e vale u_0 com probabilidade um.

◇ grau(p) = 2: Supondo $p(\omega) = \alpha\omega^2 + \beta\omega + \gamma$, com $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{C}$ e $\alpha \neq 0$, as restrições dadas por (5.3) e (5.4) implicam $\gamma = 0$, β imaginário puro e α real. Toma-se, por conveniência, p da forma $p(\omega) = j\omega\mu - \omega^2\sigma^2/2$, com $\mu, \sigma^2 \in \mathbb{R}$ e $\sigma^2 \neq 0$. Nesse caso, a antitransformada de $\Phi_{\underline{u}}$ converge apenas para $\sigma^2 > 0$ e tem-se (PAPOULIS; PILLAI, 2002)

$$f_{\underline{u}}(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(u-\mu)^2/(2\sigma^2)}.$$

Obtém-se, portanto, \underline{u} gaussiana com média μ e variância σ^2 .

Por fim, devido à unicidade dos pares da transformada de Fourier, as funções características consideradas nesse exemplo são as únicas funções associadas a variáveis aleatórias constantes ou gaussianas. Portanto, de acordo com o Teorema 5.2, não existe variável aleatória \underline{u} com $\Phi_{\underline{u}}(\omega) = e^{p(\omega)}$ tal que grau(p) > 2. \triangleleft

Lema 5.1 (Darmois, 1953; Linnik e Rao, 1964). *Sejam $f_1, f_2, \dots, f_N : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ e $g_1, g_2 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ funções contínuas em um conjunto aberto V em torno da origem. Seja $T : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}$ uma função que satisfaça a seguinte decomposição:*

$$T(x, y) = \sum_{\ell=1}^N f_{\ell}(a_{\ell}x + b_{\ell}y) = g_1(x) + g_2(y), \quad \forall x, y \in V, \quad (5.5)$$

em que a_1, a_2, \dots, a_N e b_1, b_2, \dots, b_N são constantes reais não nulas tais que, se $N > 1$,

$$a_i b_k - a_k b_i \neq 0 \quad \forall i \neq k. \quad (5.6)$$

Então, todas as funções f_i , para $i = 1, 2, \dots, N$, são polinômios de grau máximo igual a N .

A prova desse lema é feita por Darmais (1953) para $N = 2$ a partir do uso de diferenças finitas. Uma prova alternativa é também apresentada por Kagan, Linnik e Rao (1973), juntamente com algumas extensões do resultado original. Em termos gerais, esse lema estabelece que as únicas funções para as quais existe a decomposição em dois termos de (5.5), sob a condição (5.6), são polinômios. Além disso, o grau desses polinômios é igual, no máximo, ao número de termos N sendo originalmente somados.

Um exemplo em que a consistência do Lema 5.1 é verificada para diferentes tipos de funções é apresentado a seguir. Tanto nesse exemplo quanto na sequência do capítulo, apresentam-se argumentos que utilizam o conceito de contraposição² da lógica proposicional.

² Sejam p e q proposições quaisquer e seja a proposição condicional com hipótese p e tese q denotada por $p \Rightarrow q$. A contrapositiva dessa implicação consiste em negar a tese e concluir a hipótese. Denotando a negação de uma proposição por \neg , a contrapositiva pode ser representada simbolicamente como $\neg q \Rightarrow \neg p$. Pode-se mostrar que uma proposição condicional e sua contrapositiva são equivalentes; ou seja, possuem valores lógicos — *i.e.*, verdadeiro ou falso — iguais (SMITH; EGGEN; ST. ANDRE, 2015). Logo, uma implicação e sua contrapositiva podem ser substituídas indistintamente. A consideração da contrapositiva pode, em alguns casos, facilitar interpretações e provas de resultados matemáticos.

Exemplo 5.2. Para o caso particular de $N = 2$ com $f_1, f_2 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, os seguintes pares de funções são considerados:

- ◇ $f_1(x) = e^x$ e $f_2(x) = \sqrt{|x|}$: As funções f_1 e f_2 não são polinômios e, conforme a contrapositiva do Lema 5.1, a função $T(x, y)$ não admite uma decomposição como em (5.5) sob a condição (5.6).
- ◇ $f_1(x) = (x + 1)^2$ e $f_2(x) = 2x$: Uma decomposição conforme (5.5) é possível se, e somente se, $a_1 = 0$ ou $b_1 = 0$. Ambas situações não são contempladas pelo lema. Trata-se de um caso em que a recíproca não vale; *i.e.*, f_1 é um polinômio de grau dois e f_2 é um polinômio de grau um, mas uma decomposição segundo o enunciado do Lema 5.1 não existe.
- ◇ $f_1(x) = x^2$ e $f_2(x) = -2x^2$: Nesse caso, tem-se que existe uma decomposição de $T(x, y)$ conforme (5.5) se, e somente se, $a_1b_1 - 2a_2b_2 = 0$. Essa condição pode ser válida até mesmo para coeficientes não nulos e respeitando-se (5.6) — que, nesse caso, se simplifica para $a_1b_2 - a_2b_1 \neq 0$. Por exemplo, tomando-se

$$a_1 = 2, \quad a_2 = 2, \quad b_1 = 6, \quad \text{e} \quad b_2 = 3,$$

obtêm-se

$$a_1b_1 - 2a_2b_2 = 2 \times 6 - 2 \times 2 \times 3 = 0$$

e

$$a_1b_2 - a_2b_1 = 2 \times 3 - 2 \times 6 = -6 \neq 0.$$

Portanto, aplicando-se o Lema 5.1, garante-se que f_1 e f_2 são polinômios de grau máximo $N = 2$ — o que, de fato, é verdade.

◁

Com base nos Teoremas 5.1 e 5.2 e no Lema 5.1, é possível esboçar uma demonstração do teorema de Darmois–Skitovich com a finalidade de apresentá-lo e melhor compreendê-lo no contexto de BSS. Isso é feito na seguinte seção, inspirando-se em Darmois (1953), Comon (1994).

5.2 Teorema de Darmois–Skitovich

Teorema 5.3 (Darmois–Skitovich, 1953). *Sejam $\underline{u}_1, \underline{u}_2, \dots, \underline{u}_N$ variáveis aleatórias reais mutuamente independentes e sejam as seguintes formas lineares*

$$\begin{cases} v_1 = a_1\underline{u}_1 + a_2\underline{u}_2 + \dots + a_N\underline{u}_N \\ v_2 = b_1\underline{u}_1 + b_2\underline{u}_2 + \dots + b_N\underline{u}_N \end{cases} \quad (5.7)$$

em que a_1, a_2, \dots, a_N e b_1, b_2, \dots, b_N são constantes reais. Se v_1 e v_2 forem variáveis aleatórias independentes, então para qualquer índice i (com $i = 1, 2, \dots, N$) tal que $a_i b_i \neq 0$, tem-se que \underline{u}_i é variável aleatória constante ou gaussiana.

Demonstração. A função característica de \underline{v}_1 e \underline{v}_2 é igual a

$$\Phi_{\underline{v}_1, \underline{v}_2}(\omega_1, \omega_2) = \mathbb{E} [\exp(j(\omega_1 \underline{v}_1 + \omega_2 \underline{v}_2))].$$

A partir das decomposições

$$\underline{v}_1 = \sum_{i=1}^N a_i \underline{u}_i \quad \text{e} \quad \underline{v}_2 = \sum_{i=1}^N b_i \underline{u}_i,$$

obtém-se

$$\Phi_{\underline{v}_1, \underline{v}_2}(\omega_1, \omega_2) = \mathbb{E} \left[\exp \left(j \sum_{i=1}^N (\omega_1 a_i + \omega_2 b_i) \underline{u}_i \right) \right].$$

Devido à independência mútua dos \underline{u}_i , com $i = 1, 2, \dots, N$, a seguinte fatoração dessa função característica é possível (PAPOULIS; PILLAI, 2002):

$$\Phi_{\underline{v}_1, \underline{v}_2}(\omega_1, \omega_2) = \prod_{i=1}^N \Phi_{\underline{u}_i}(\omega_1 a_i + \omega_2 b_i). \quad (5.8)$$

Além disso, como \underline{v}_1 e \underline{v}_2 são independentes, vale

$$\Phi_{\underline{v}_1, \underline{v}_2}(\omega_1, \omega_2) = \Phi_{\underline{v}_1}(\omega_1) \Phi_{\underline{v}_2}(\omega_2),$$

e a partir de (5.8), tem-se

$$\Phi_{\underline{v}_1}(\omega_1) \Phi_{\underline{v}_2}(\omega_2) = \prod_{i=1}^N \Phi_{\underline{u}_i}(\omega_1 a_i + \omega_2 b_i).$$

Aplicando-se o logaritmo natural a ambos os lados dessa equação, e recordando-se da Definição 2.14 e da notação $\Psi(\cdot) = \ln(\Phi(\cdot))$ para funções log-características, obtém-se a seguinte igualdade:

$$\Psi_{\underline{v}_1}(\omega_1) + \Psi_{\underline{v}_2}(\omega_2) = \sum_{i=1}^N \Psi_{\underline{u}_i}(\omega_1 a_i + \omega_2 b_i). \quad (5.9)$$

Por conveniência, define-se o conjunto

$$\mathcal{I} = \{i = 1, 2, \dots, N \mid a_i b_i \neq 0\}$$

de todos os índices i para os quais $a_i b_i \neq 0$. Para $i \notin \mathcal{I}$, pode-se “englobar” a correspondente função $\Psi_{\underline{u}_i}$ em algum dos dois termos do lado esquerdo de (5.9). Repetindo-se esse procedimento sobre (5.9) para todos os índices $i \notin \mathcal{I}$, obtém-se a seguinte expressão genérica:

$$\bar{\Psi}_{\underline{v}_1}(\omega_1) + \bar{\Psi}_{\underline{v}_2}(\omega_2) = \sum_{i \in \mathcal{I}} \Psi_{\underline{u}_i}(\omega_1 a_i + \omega_2 b_i), \quad (5.10)$$

em que $\bar{\Psi}_{\underline{v}_1}$ denota a função $\Psi_{\underline{v}_1}$ após a inclusão de todas as funções $\Psi_{\underline{u}_i}$ para as quais $a_i \neq 0$ e $b_i = 0$, e $\bar{\Psi}_{\underline{v}_2}$ representa a função $\Psi_{\underline{v}_2}$ após a inclusão de todas as funções $\Psi_{\underline{u}_i}$ para as quais $a_i = 0$ e $b_i \neq 0$. Eventualmente, se ocorrer $a_i, b_i = 0$ para algum índice i , o termo

correspondente no lado direito será identicamente nulo pois $\Psi_{\underline{u}_i}(0) = 0$. Logo, restam $n(\mathcal{I})$ termos sendo somados no lado direito de (5.10), em que $n(\cdot)$ denota a cardinalidade de um conjunto.

Para terminar a demonstração, a Equação (5.10) é analisada para quatro casos coletivamente exaustivos elencados a seguir:

- (i) $n(\mathcal{I}) = 0$: Nesse caso, $\mathcal{I} = \emptyset$ e $a_i b_i = 0$ para todo $i = 1, 2, \dots, N$. Nada se pode afirmar sobre as variáveis aleatórias \underline{u}_i com $i = 1, 2, \dots, N$, pois \underline{u}_1 e \underline{u}_2 seriam sempre independentes por serem duas funções de conjuntos independentes de variáveis aleatórias.
- (ii) $n(\mathcal{I}) = 1$: Aplicando-se o Lema 5.1 a (5.10), tem-se que a função $\Psi_{\underline{u}_i}$ para $i \in \mathcal{I}$ é um polinômio de grau máximo igual a um. A partir do Teorema 5.2, \underline{u}_i é variável aleatória constante. De fato, pode-se demonstrar que apenas a variável aleatória constante é independente de si mesma, como ocorre nesse caso.
- (iii) $n(\mathcal{I}) > 1$; $i, k \in \mathcal{I} \mid \forall i \neq k, a_i b_k - a_k b_i \neq 0$: Inicialmente, aplica-se o Lema 5.1 a (5.10). Disso, decorre que todas as funções $\Psi_{\underline{u}_i}$, para $i \in \mathcal{I}$, são polinômios complexos de grau máximo $n(\mathcal{I}) > 1$. Agora, conforme o Teorema 5.2, as funções $\Psi_{\underline{u}_i}$, para $i \in \mathcal{I}$, possuem grau máximo igual a dois. Logo, as variáveis aleatórias \underline{u}_i , para $i \in \mathcal{I}$, são constantes ou, então, são gaussianas.
- (iv) $n(\mathcal{I}) > 1$; $i, k \in \mathcal{I} \mid \exists i \neq k, a_i b_k - a_k b_i = 0$: Em cada caso em que isso ocorrer, pode-se sempre definir uma variável aleatória combinada $\underline{u}_{i,k}$ tal que

$$\begin{cases} \alpha_{i,k} \underline{u}_{i,k} = a_i \underline{u}_i + a_k \underline{u}_k \\ \beta_{i,k} \underline{u}_{i,k} = b_i \underline{u}_i + b_k \underline{u}_k \end{cases},$$

com $\alpha_{i,k} = 1/b_i$ e $\beta_{i,k} = 1/a_i$. Realizando-se, exaustivamente, todas as combinações possíveis de variáveis aleatórias para índices pertencentes a \mathcal{I} em (5.7), podem-se então seguir passos similares ao caso (iii) para as variáveis aleatórias resultantes. A saber, aplicam-se o Lema 5.1 e o Teorema 5.2 a cada variável aleatória resultante. Para as variáveis individuais, tem-se que são constantes ou gaussianas, analogamente ao caso (iii). No entanto, para as variáveis aleatórias combinadas, a partir do procedimento do caso (iii) obtém-se apenas que a combinação é constante ou gaussiana. Se a combinação for constante (com probabilidade um), então as variáveis aleatórias individuais sendo combinadas também são constantes, pois são mutuamente independentes. Trata-se de uma particularização do Teorema 5.1 para gaussianas de variância nula, *i.e.*, variáveis aleatórias constantes com probabilidade um. Em contrapartida, se a combinação for gaussiana, aplica-se o Teorema 5.1 e obtém-se que obrigatoriamente uma das variáveis individuais é gaussiana, e as demais variáveis individuais podem ser constantes ou gaussianas.

□

Esse teorema foi inicialmente demonstrado em 1953 nas publicações de Darmois (1953), Skitovich (1954). Apesar disso, a relação entre não gaussianidade e independência de variáveis aleatórias já vinha sendo estudada desde muito antes; *e.g.*, J. C. Maxwell, no século XIX, investigou essa questão no estudo de distribuições de velocidades de moléculas no espaço tridimensional (FELLER, 1968–1971). Eventualmente, o teorema de Darmois–Skitovich foi generalizado para diversos casos, como para combinações lineares de vetores aleatórios e para formas lineares com coeficientes aleatórios (KAGAN; LINNIK; RAO, 1973).

Em diversas áreas de estatística, o teorema de Darmois–Skitovich é relevante — em especial, nas áreas de análise fatorial e decomposição de variáveis aleatórias. Sua relevância se justifica, principalmente, pelo fato de que esse teorema consiste em uma caracterização da distribuição gaussiana a partir da independência de duas formas lineares (KAGAN; LINNIK; RAO, 1973). Isso significa que, além das variáveis aleatórias constantes, apenas as variáveis aleatórias gaussianas não são necessariamente isoladas quando v_1 e v_2 são independentes.

No problema de BSS para o modelo de misturas lineares e instantâneas com fontes iid e mutuamente independentes no espaço, a aplicação do teorema de Darmois–Skitovich permite extrair as condições sob as quais a imposição de independência, à saída do sistema separador, implica a separação adequada das fontes. No entanto, antes de aplicar esse teorema ao contexto de BSS, enuncia-se o seguinte lema auxiliar.

Lema 5.2. *Seja \mathbf{s} o vetor aleatório de fontes não constantes e mutuamente independentes e seja \mathbf{y} o vetor aleatório de fontes estimadas, ambos com N elementos, tais que $\mathbf{y} = \mathbf{M}\mathbf{s}$ sendo $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ a matriz inversível de resposta combinada. Se as variáveis aleatórias em \mathbf{y} forem não correlacionadas, então*

$$\mathbf{M} = \mathbf{\Lambda}_{\mathbf{y}}^{1/2} \widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{\Lambda}_{\mathbf{s}}^{-1/2}, \quad (5.11)$$

em que $\mathbf{\Lambda}_{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ e $\mathbf{\Lambda}_{\mathbf{s}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ são matrizes diagonais positivas definidas e $\widetilde{\mathbf{M}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é uma matriz ortogonal.

Demonstração. Partindo-se da relação $\mathbf{y} = \mathbf{M}\mathbf{s}$ e aplicando-se a Proposição 3.1, tem-se

$$\mathbf{C}_{\mathbf{y}} = \mathbf{M}\mathbf{C}_{\mathbf{s}}\mathbf{M}^T, \quad (5.12)$$

em que $\mathbf{C}_{\mathbf{y}}, \mathbf{C}_{\mathbf{s}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ denotam as matrizes de covariância de \mathbf{y} e \mathbf{s} , respectivamente, de acordo com a Definição 3.2. Como as variáveis em \mathbf{s} são mutuamente independentes e não constantes, tem-se $\mathbf{C}_{\mathbf{s}} = \mathbf{\Lambda}_{\mathbf{s}}$, em que $\mathbf{\Lambda}_{\mathbf{s}}$ é matriz diagonal positiva definida. Além disso, como as variáveis em \mathbf{y} são não correlacionadas e não constantes (pois \mathbf{M} é inversível e \mathbf{s}

não é constante), tem-se $\mathbf{C}_y = \mathbf{A}_y$, em que \mathbf{A}_y também é matriz diagonal positiva definida. Logo, a expressão (5.12) pode ser reescrita como

$$\mathbf{A}_y = \mathbf{M}\mathbf{A}_s\mathbf{M}^\top. \quad (5.13)$$

Multiplicando-se (5.13) à esquerda e à direita por $\mathbf{A}_y^{-1/2}$, obtém-se

$$\mathbf{I}_N = (\mathbf{A}_y^{-1/2}\mathbf{M}\mathbf{A}_s^{1/2})(\mathbf{A}_y^{-1/2}\mathbf{M}\mathbf{A}_s^{1/2})^\top. \quad (5.14)$$

Definindo-se

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \mathbf{A}_y^{-1/2}\mathbf{M}\mathbf{A}_s^{1/2}, \quad (5.15)$$

a expressão (5.14) pode ser reescrita como $\widetilde{\mathbf{M}}\widetilde{\mathbf{M}}^\top = \mathbf{I}_N$. De acordo com Golub e Van Loan (2013, p. 66), tem-se por definição que $\widetilde{\mathbf{M}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é uma matriz ortogonal. Isolando-se a matriz \mathbf{M} em (5.15), obtém-se (5.11). \square

Resumidamente, esse lema estabelece que a condição de fontes estimadas não correlacionadas — decorrente da hipótese de independência mútua — impõe um “formato especial” à matriz de resposta combinada, dado por (5.11). Trata-se de um resultado baseado apenas em estatísticas de ordem dois³, porém útil no contexto de BSS se considerado em conjunto com o teorema de Darmois–Skitovich. No exemplo a seguir, mostra-se como esses resultados podem ser aplicados em conjunto a um exemplo simples de separação cega de fontes.

Exemplo 5.3. Seja o problema de separação de fontes para $N = 2$ conforme mostrado na Figura 6. Considera-se que as fontes s_1 e s_2 são variáveis aleatórias independentes e não constantes. Adicionalmente, considera-se que as matrizes $\mathbf{H}, \mathbf{W} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ são inversíveis. O objetivo deste exemplo é verificar sob quais condições a imposição de independência espacial à saída do sistema separador é capaz de separar as fontes dadas de maneira adequada.

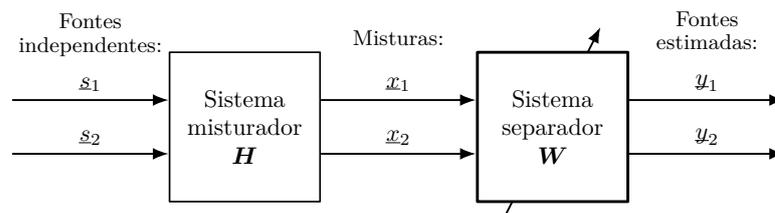


Figura 6 – Esquema simplificado dos principais elementos envolvidos no problema de separação cega de fontes para o modelo de sistema misturador linear e instantâneo, com duas fontes iid e mutuamente independentes no espaço.

Fonte: autoria própria.

Inicialmente, a relação entre o vetor de fontes estimadas e o vetor de fontes — ou seja, $\mathbf{y} = \mathbf{M}\mathbf{s}$ — pode ser expandida convenientemente como

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ b_1 & b_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \end{bmatrix}. \quad (5.16)$$

³ Na Seção 6.1, ao abordar o efeito que a decorrelação das misturas possui na separação, uma linha de raciocínio análoga àquela seguida na demonstração do Lema 5.2 é aplicada para obter condições sobre outras matrizes envolvidas no problema de separação.

Variando-se os coeficientes do sistema separador em \mathbf{W} , os elementos de $\mathbf{M} = \mathbf{W}\mathbf{H}$ também se alteram pois \mathbf{H} é inversível. Garantindo-se que a escolha de \mathbf{W} é tal que y_1 é independente de y_2 , o Teorema 5.3 pode ser aplicado a (5.16), levando à condição

$$a_i b_i \neq 0 \Rightarrow \underline{s}_i \text{ é gaussiana}$$

para $i \in \{1, 2\}$. Em outras palavras, se ambos os elementos da i -ésima coluna de \mathbf{M} forem não nulos, então a variável aleatória \underline{s}_i é gaussiana. Como \mathbf{M} é uma matriz 2×2 e satisfaz uma fatoração da forma (5.11) segundo o Lema 5.2, tem-se que

$$a_1 b_1 \neq 0 \Leftrightarrow a_2 b_2 \neq 0.$$

Consequentemente, os seguintes casos são analisados:

- ◇ Todos os elementos de \mathbf{M} são não nulos: De acordo com o Teorema 5.3, segue que \underline{s}_1 e \underline{s}_2 são gaussianas. Nesse caso, nenhuma das fontes foi adequadamente separada, já que ambas apresentam contribuições não nulas em y_1 e y_2 .
- ◇ \mathbf{M} é diagonal ou antidiagonal: o Teorema 5.3 é inconclusivo e nada se pode afirmar sobre \underline{s}_1 e \underline{s}_2 . No entanto, nesse caso ambas as fontes são separadas, exceto por eventuais ambiguidades de permutação e de escala.

Embora a estrutura de \mathbf{M} tenha sido relacionada com a gaussianidade das fontes na análise anterior, essa relação fica mais evidente ao considerar a contrapositiva do Teorema 5.3, *i.e.*,

$$\underline{s}_i \text{ não é gaussiana} \Rightarrow a_i b_i = 0$$

para $i \in \{1, 2\}$. Em outras palavras, se a variável aleatória \underline{s}_i não for gaussiana, então a i -ésima coluna de \mathbf{M} possui pelo menos um elemento nulo. Novamente, pelo Lema 5.2 segue que

$$a_1 b_1 = 0 \Leftrightarrow a_2 b_2 = 0.$$

Agora, os seguintes casos são considerados:

- ◇ \underline{s}_1 e \underline{s}_2 não gaussianas: Nesse caso, pela contrapositiva, tem-se $a_1 b_1 = a_2 b_2 = 0$. Como y_1 e y_2 não são constantes, as colunas de \mathbf{M} não podem ser nulas. Sendo assim, \mathbf{M} será necessariamente diagonal ou antidiagonal, de modo que as fontes são separadas por imposição de independência a menos de ambiguidades de permutação e de escala.
- ◇ \underline{s}_1 não gaussiana e \underline{s}_2 gaussiana: A aplicação da contrapositiva apenas implica $a_1 b_1 = 0$. Em contrapartida, a condição sobre \mathbf{M} implica $a_2 b_2 = 0$. Sendo assim, novamente \mathbf{M} é diagonal ou antidiagonal, de modo que as fontes são separadas. Por simetria, o caso em que \underline{s}_1 é gaussiana e \underline{s}_2 é não gaussiana é análogo.

- ◇ \underline{s}_1 e \underline{s}_2 gaussianas: A aplicação da contrapositiva não permite obter condições sobre os coeficientes de \mathbf{M} .

Para concluir esse exemplo, deve-se notar que a aplicação do teorema de Darmois–Skitovich a esse problema de BSS permitiu a verificação de situações em que a separabilidade das fontes é possível via imposição de independência espacial à saída do sistema separador. Em particular, a separação é garantida, a menos de ambiguidades, se no máximo uma fonte for gaussiana. Adicionalmente, nada pode ser dito se ambas as fontes forem gaussianas — eventualmente, elas podem ser separadas por imposição de independência, mas nem sempre isso pode ser garantido. ◁

Os resultados para $N = 2$, obtidos no exemplo considerado, podem ser estendidos para quando há $N > 2$ fontes. Nesse contexto mais geral, as condições teóricas que o modelo de mistura deve satisfazer para que a separação adequada de fontes possa ocorrer são dadas pelo teorema de separabilidade das fontes. Trata-se de um resultado importante em BSS, demonstrado pela primeira vez por Comon (1994).

5.3 Teorema de separabilidade das fontes

No teorema de separabilidade das fontes, são apresentadas condições adicionais que o modelo de sistema misturador linear e instantâneo, com fontes iid e mutuamente independentes no espaço, deve satisfazer para que a imposição de independência sobre o vetor de fontes estimadas permita obter a adequada recuperação das fontes. Inicialmente, tomando-se por base o Teorema 5.3 aplicado ao modelo particular de separação de fontes aqui considerado, obtém-se o lema intermediário apresentado a seguir (COMON, 1992).

Lema 5.3 (Comon, 1992). *Seja $\underline{\mathbf{s}}$ o vetor aleatório de fontes não constantes e mutuamente independentes e seja $\underline{\mathbf{y}}$ o vetor aleatório de fontes estimadas, ambos com N elementos, tais que $\underline{\mathbf{y}} = \mathbf{M}\underline{\mathbf{s}}$ sendo $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ a matriz de resposta combinada. Supõe-se, adicionalmente, que as variáveis aleatórias em $\underline{\mathbf{y}}$ são independentes em pares. Se a i -ésima coluna da matriz \mathbf{M} possuir pelo menos dois elementos não nulos, então \underline{s}_i é uma variável aleatória constante ou gaussiana.*

Demonstração. Seja $m_{k,i} = [\mathbf{M}]_{k,i}$, com $k, i = 1, 2, \dots, N$. Supõe-se que \mathbf{M} possui, na sua i -ésima coluna, dois elementos não nulos nas linhas k_1 e k_2 , com $k_1 \neq k_2$ — i.e., $m_{k_1,i}m_{k_2,i} \neq 0$. Pode-se aplicar o Teorema 5.3 apenas às linhas k_1 e k_2 , visto que y_{k_1} e y_{k_2} são independentes por hipótese. Sendo assim, \underline{s}_i é variável aleatória constante ou gaussiana. ◻

O Lema 5.3 é uma variante do teorema de Darmois–Skitovich (Teorema 5.3). Agora, com base nos Lemas 5.2 e 5.3, é possível demonstrar o teorema de separabilidade das fontes baseando-se em Comon (1994).

Teorema 5.4 (Comon, 1994). *Seja \underline{s} o vetor aleatório de fontes não constantes e mutuamente independentes, das quais no máximo uma é gaussiana, e seja \underline{y} o vetor aleatório de fontes estimadas, ambos com N elementos, tais que $\underline{y} = \mathbf{M}\underline{s}$ sendo $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ a matriz inversível de resposta combinada. As seguintes proposições são equivalentes:*

- (i) *As fontes estimadas em \underline{y} são independentes em pares.*
- (ii) *As fontes estimadas em \underline{y} são mutuamente independentes.*
- (iii) *$\mathbf{M} = \mathbf{A}\mathbf{P}$, em que $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é matriz diagonal inversível e $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é matriz de permutação.*

Demonstração.

- ◇ (iii) \Rightarrow (ii): Se $\mathbf{M} = \mathbf{A}\mathbf{P}$, então cada um dos elementos de \underline{y} corresponde a apenas um dos elementos de \underline{s} multiplicado por um escalar real não nulo. Além disso, quaisquer elementos distintos de \underline{y} não correspondem a um mesmo elemento de \underline{s} multiplicado por um escalar qualquer. Como as fontes em \underline{s} são mutuamente independentes, tem-se que as fontes estimadas em \underline{y} também são mutuamente independentes.
- ◇ (ii) \Rightarrow (i): Como as fontes estimadas em \underline{y} são mutuamente independentes, então elas também são independentes em pares, conforme a demonstração da Proposição 2.1.
- ◇ (i) \Rightarrow (iii): Apresenta-se, aqui, uma prova por contradição. Sejam as fontes estimadas em \underline{y} independentes em pares e seja $\mathbf{M} \neq \mathbf{A}\mathbf{P}$ com $N \geq 2$. Como $\mathbf{M} \neq \mathbf{A}\mathbf{P}$, mas possui a fatoração dada pela Equação (5.11) do Lema 5.2 por ser inversível, essa matriz necessariamente possui dois elementos distintos não nulos em pelo menos duas colunas distintas. Aplicando-se o Teorema 5.3 às duas fontes correspondentes a essas duas colunas, tem-se que \underline{s} possui pelo menos duas fontes gaussianas. Trata-se de uma contradição com a hipótese original do teorema, de que no máximo uma das componentes de \underline{s} é gaussiana.

□

Esse teorema garante que, sob certas condições, o princípio de separação baseado em imposição de independência espacial à saída do sistema separador é capaz de separar adequadamente as fontes. Em particular, essa estratégia é sempre válida se \mathbf{M} for inversível e no máximo uma das fontes for gaussiana e nenhuma delas for constante. Esse resultado está de acordo com o que foi obtido no Exemplo 5.3 para o caso particular de $N = 2$.

Além disso, o Teorema 5.4 estabelece que as fontes podem ser separadas a menos de ambiguidades de escala ou permutação, representadas pelas matrizes \mathbf{A} e \mathbf{P} , respectivamente. Trata-se de ambiguidades inerentes do problema de separação cega para misturas lineares

e instantâneas com fontes iid e mutuamente independentes no espaço. Essas limitações apenas podem ser evitadas se hipóteses adicionais forem incluídas no modelo estatístico das fontes (COMON, 1992; CARDOSO, 1998; HYVÄRINEN; OJA, 2000). .

Por fim, segundo o Teorema 5.4, não é necessário recuperar a independência espacial mútua das fontes para separá-las — apenas a recuperação de independência em pares já é suficiente.

5.4 Conclusões

Desde o início dos anos 1980, várias soluções interessantes vêm sendo propostas para resolver o problema de BSS com modelo de sistema misturador linear e instantâneo e com fontes iid. Muitas dessas soluções são baseadas em princípios de extração de componentes independentes. Os limites teóricos e os princípios de funcionamento dessas soluções foram esclarecidos por Comon (1994), graças ao teorema de Darmois–Skitovich (DARMOIS, 1953). Esse teorema estabelece a relação muito pouco evidente entre independência estatística e não gaussianidade de variáveis aleatórias. Até a atualidade, o teorema de Darmois–Skitovich é assunto de pesquisa em processamento de sinais e estatística (THEIS, 2004; MAZUR, 2013). Em separação cega de fontes, esse teorema já foi estendido de diferentes formas visando a sua posterior aplicação à obtenção de condições de separabilidade em problemas envolvendo fontes complexas (ERIKSSON; KOIVUNEN, 2006) ou tipos particulares de misturas não lineares (TALEB; JUTTEN, 1999; ERIKSSON; KOIVUNEN, 2002; JUTTEN; BABAIE-ZADEH; HOSSEINI, 2004; ERIKSSON; KOIVUNEN, 2005), por exemplo.

É oportuno recordar, nesse momento, que ao longo desse capítulo foi considerado o problema de BSS com modelo de sistema misturador linear e instantâneo e com fontes iid e mutuamente independentes no espaço. Conforme visto por meio de exemplos ao longo do capítulo, o teorema de Darmois–Skitovich, quando trazido para esse contexto, permitiu compreender sob que hipóteses as fontes iid e mutuamente independentes no espaço podem ser separadas via imposição de independência à saída do sistema separador. Em suma, a condição suficiente para a separação é que no máximo uma das fontes mutuamente independentes seja gaussiana. Conforme se verificou no Exemplo 5.3, entretanto, essa condição não é necessária.

A obtenção de condições de separabilidade para fontes iid e mutuamente independentes no espaço, a partir do teorema de separabilidade das fontes, inspirou uma ramificação no conjunto de técnicas de separação cega de fontes para misturas lineares e instantâneas. Basicamente, houve uma subdivisão em duas vertentes distintas:

- (i) *Separção de fontes iid, independentes e não gaussianas.* Essas técnicas são baseadas em uso de estatísticas de ordem superior para a imposição de independência estatística à saída do sistema separador — visto que variáveis aleatórias não gaussianas não são conjuntamente descritas de forma completa apenas com estatísticas até a ordem

dois. As condições de separabilidade, para essas técnicas, são dadas pelo Teorema 5.4 apresentado na Seção 5.3. Na literatura, esse conjunto de técnicas é denominado análise de componentes independentes (ICA).

- (ii) *Separação de fontes não iid, independentes e gaussianas.* Existe um conjunto de técnicas voltado à separação cega de fontes que são gaussianas; em alguns casos práticos, esse tipo de problema pode ocorrer (ABED-MERAIM; XIANG; HUA, 2000; PHAM; CARDOSO, 2001; COMON; JUTTEN, 2010). De acordo com o teorema de separabilidade das fontes, se as fontes forem iid, independentes e gaussianas, então não se garante a sua correta separação por imposição de independência. Entretanto, abandonando-se a hipótese de fontes iid, é possível separar fontes conjuntamente gaussianas. O segredo está em considerar a autoestrutura temporal dos processos estocásticos gaussianos correspondentes às fontes, ao contrário do que é feito sob a hipótese de fontes iid, em que essa estrutura é ignorada (HYVÄRINEN, 2013). Para processos estocásticos gaussianos, a caracterização estatística é simplificada pois pode ser feita de forma completa até a ordem dois (*i.e.*, com funções de autocovariância ou autocorrelação, modelos temporais, etc.). Além disso, a imposição de independência espacial também pode ser feita apenas considerando-se estatísticas até a ordem dois, dada a gaussianidade dos processos. Sendo assim, o conjunto de técnicas dedicado a esse problema, em particular, é conhecido como separação de fontes baseada em estatísticas de ordem dois. A questão da separabilidade das fontes, nesse contexto, é discutida por Tong e Liu (1990), Abed-Meraim, Xiang e Hua (2000).

Neste trabalho, enfoque é dado ao primeiro caso (*i.e.*, ao modelo de sistema misturador linear e instantâneo, com fontes iid, mutuamente independentes no espaço e não gaussianas). De acordo com o teorema de separabilidade apresentado na Seção 5.3 (Teorema 5.4), pode-se prever que os métodos de separação nesse contexto devem envolver, inevitavelmente, algum sistema separador que imponha independência estatística em sua saída. Porém, dependendo do método de separação considerado, esse tipo de imposição pode aparecer de forma implícita.

No capítulo a seguir, abordam-se métodos baseados em propriedades algébricas de cumulantes para a realização da separação cega de fontes por imposição de independência. Trata-se de uma abordagem do problema de separação que pode ser compreendida como uma extensão à ordem superior de métodos clássicos em processamento estatístico de sinais baseados em estatísticas de segunda ordem. A abordagem dada ao longo desse capítulo às condições de separabilidade das fontes se provará muito útil para a interpretação e o entendimento dos métodos de separação abordados nos próximos dois capítulos.

6 SEPARAÇÃO DE FONTES E A MATRIZ DE QUADRICOVARIÂNCIA

Seja o problema de separação cega de fontes (BSS) esquematizado na Figura 7, a qual corresponde a uma particularização da Figura 5 do Capítulo 4 para o caso igualmente determinado.

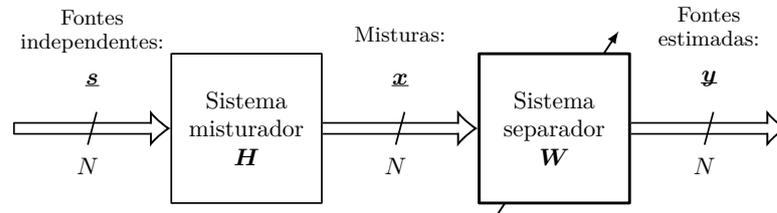


Figura 7 – Esquema simplificado dos principais elementos envolvidos no problema de BSS igualmente determinado, com sistema misturador linear e instantâneo, fontes iid e independentes no espaço. Fonte: autoria própria.

Vislumbrando-se o entendimento de técnicas de análise de componentes independentes (ICA) propostas na literatura, neste capítulo abordam-se os princípios da separação cega de fontes via imposição de independência. Ênfase é dada a métodos de separação baseados em propriedades algébricas de cumulantes. Trata-se de fundamentos clássicos na literatura de BSS (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; CARDOSO, 1999; DE LATHAUWER, 1997), mas que aqui são revisitados e reinterpretados com base no arcabouço teórico considerado nos Capítulos 2, 3 e 5.

Historicamente, a separação baseada em propriedades algébricas de cumulantes é comumente dividida em duas etapas. Na Seção 6.1, apresenta-se a etapa inicial conhecida como pré-processamento, a qual é baseada em cumulantes de ordens um e dois das misturas. Nessa etapa, destaca-se o procedimento de branqueamento das misturas, cujo efeito na separação é abordado na Seção 6.2. Na Seção 6.3, relaciona-se o efeito do branqueamento às condições de separabilidade das fontes. Na Seção 6.4, aborda-se a etapa posterior ao pré-processamento. Nessa etapa, empregam-se cumulantes de ordem quatro, convenientemente representados de forma matricial, para obter a separação. Na Seção 6.5, aborda-se a influência que a representação matricial possui sobre a identificabilidade da matriz de mistura no problema cego. Na Seção 6.6, aprofunda-se essa discussão relacionando-se a completude da representação matricial utilizada à questão da identificabilidade. Na Seção 6.7, apresentam-se as conclusões do capítulo.

6.1 Pré-processamento

A primeira etapa usualmente considerada em grande parte dos métodos de separação baseados na estrutura algébrica de cumulantes é o pré-processamento (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; COMON, 1994; HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001). Classicamente, essa etapa envolve dois passos denominados centralização e branqueamento.

No primeiro passo, as misturas são centralizadas impondo-se

$$\boxed{E[\mathbf{x}] = \mathbf{0}_N.} \quad (6.1)$$

No decorrer deste capítulo, considera-se que a centralização foi previamente realizada e, portanto, o vetor aleatório \mathbf{x} tem média nula. Dessa forma, supõe-se implicitamente que ambos \mathbf{s} e \mathbf{y} também têm médias nulas, pois se relacionam com \mathbf{x} por meio de transformações lineares inversíveis segundo (4.22) e (4.23), respectivamente.

No passo seguinte, as misturas são branqueadas. Classicamente, o branqueamento é feito por meio da aplicação de uma transformação linear inversível, representada pela matriz de branqueamento $\mathbf{A}_w \in \mathbb{R}^{N \times N}$, ao vetor de misturas conforme

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{A}_w \mathbf{x}, \quad (6.2)$$

resultando em um vetor de misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}} = [\tilde{x}_1 \ \tilde{x}_2 \ \cdots \ \tilde{x}_N]^\top$ com matriz de covariância identidade, *i.e.*,

$$\boxed{\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{x}}} = E[\tilde{\mathbf{x}} \tilde{\mathbf{x}}^\top] = \mathbf{I}_N.} \quad (6.3)$$

Basicamente, nesse procedimento anulam-se as covariâncias entre misturas distintas e iguala-se a variância de cada mistura a um (COMON, 1994). Trata-se, portanto, de um passo baseado unicamente em cumulantes de ordem dois. Um esquema simplificado dessa etapa é mostrado na Figura 8.

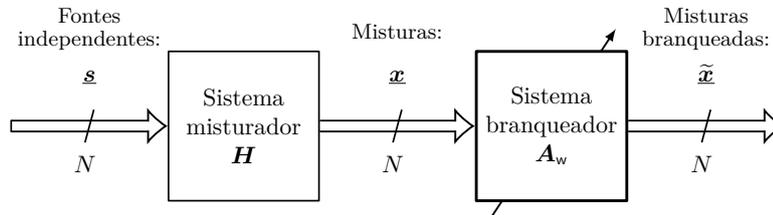


Figura 8 – Esquema simplificado da etapa de branqueamento das misturas no pré-processamento.
Fonte: autoria própria.

A imposição da condição (6.3) é feita a partir da escolha adequada da matriz de branqueamento \mathbf{A}_w . Substituindo-se (6.2) na esperança de (6.3), obtém-se

$$\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{x}}} = \mathbf{A}_w \mathbf{C}_{\mathbf{x}} \mathbf{A}_w^\top, \quad (6.4)$$

sendo $\mathbf{C}_{\mathbf{x}} = E[\mathbf{x} \mathbf{x}^\top]$ a matriz de covariância das misturas. Sob a hipótese de que não há fontes constantes e a matriz de mistura é inversível, pode-se mostrar que $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ é positiva definida. Conforme (3.14), essa matriz admite a decomposição em autovalores e autovetores

$$\mathbf{C}_{\mathbf{x}} = \boldsymbol{\Theta} \boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\Theta}^\top, \quad (6.5)$$

em que $\boldsymbol{\Theta} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é uma matriz ortogonal e $\boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é uma matriz diagonal positiva definida. Nas colunas de $\boldsymbol{\Theta}$ estão os autovetores de $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ e na diagonal principal de $\boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{x}}$ estão

os autovalores associados a cada autovetor. Substituindo-se (6.5) em (6.4), tem-se

$$\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{x}}} = (\mathbf{A}_w \boldsymbol{\Theta} \boldsymbol{\Lambda}_{\tilde{\mathbf{x}}}^{1/2}) (\mathbf{A}_w \boldsymbol{\Theta} \boldsymbol{\Lambda}_{\tilde{\mathbf{x}}}^{1/2})^\top. \quad (6.6)$$

Definindo-se

$$\tilde{\mathbf{A}}_w = \mathbf{A}_w \boldsymbol{\Theta} \boldsymbol{\Lambda}_{\tilde{\mathbf{x}}}^{1/2} \quad (6.7)$$

e igualando (6.6) à identidade, obtém-se $\tilde{\mathbf{A}}_w \tilde{\mathbf{A}}_w^\top = \mathbf{I}_N$. De acordo com Golub e Van Loan (2013, p. 66), tem-se por definição que $\tilde{\mathbf{A}}_w \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é uma matriz ortogonal. Isolando-se a matriz \mathbf{A}_w em (6.7), obtém-se

$$\mathbf{A}_w = \tilde{\mathbf{A}}_w \boldsymbol{\Lambda}_{\tilde{\mathbf{x}}}^{-1/2} \boldsymbol{\Theta}^\top. \quad (6.8)$$

Essa equação consiste em uma maneira de calcular a matriz de branqueamento \mathbf{A}_w de modo que a matriz de covariância das misturas branqueadas satisfaça (6.3). A matriz $\tilde{\mathbf{A}}_w$ pode ser interpretada como uma matriz ortogonal arbitrária; portanto, \mathbf{A}_w não é única. Sem perda de generalidade, daqui em diante considera-se que $\tilde{\mathbf{A}}_w = \mathbf{I}_N$. Logo, (6.8) se reduz a

$$\boxed{\mathbf{A}_w = \boldsymbol{\Lambda}_{\tilde{\mathbf{x}}}^{-1/2} \boldsymbol{\Theta}^\top.} \quad (6.9)$$

A matriz \mathbf{A}_w é completamente obtida a partir da determinação da decomposição em autovalores e autovetores (6.5) da matriz de covariância das misturas $\tilde{\mathbf{x}}$. Sendo assim, o branqueamento pode ser feito sem conhecer as fontes ou o sistema misturador no esquema da Figura 8.

Nesse ponto, cabe verificar a influência que o branqueamento realizado com a matriz (6.9) possui sobre a relação entre as misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$ e as fontes \mathbf{s} . Para tanto, as misturas branqueadas podem ser expressas em função das fontes independentes substituindo-se $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{H} \mathbf{s}$ em (6.2), de onde obtém-se

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{A}_w \mathbf{H} \mathbf{s}. \quad (6.10)$$

Substituindo-se essa relação na esperança de (6.3), a matriz de covariância das misturas branqueadas pode ser escrita como

$$\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{x}}} = (\mathbf{A}_w \mathbf{H}) \boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{s}} (\mathbf{A}_w \mathbf{H})^\top, \quad (6.11)$$

em que $\boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{s}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ denota a matriz de covariância diagonal do vetor aleatório de fontes. Como essa matriz é positiva definida sob a hipótese de que não há fontes constantes, a Equação (6.11) pode ser reescrita como

$$\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{x}}} = (\mathbf{A}_w \mathbf{H} \boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{s}}^{1/2}) (\mathbf{A}_w \mathbf{H} \boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{s}}^{1/2})^\top. \quad (6.12)$$

Definindo-se

$$\boxed{\mathbf{U} = \mathbf{A}_w \mathbf{H} \boldsymbol{\Lambda}_{\mathbf{s}}^{1/2}} \quad (6.13)$$

e igualando (6.12) à identidade, chega-se a $\mathbf{U}\mathbf{U}^\top = \mathbf{I}_N$. Novamente conforme Golub e Van Loan (2013, p. 66), por definição tem-se que \mathbf{U} é matriz ortogonal. Por sua vez, essa matriz pode ser utilizada para relacionar as misturas branqueadas às fontes, a partir de (6.10), conforme

$$\tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{A}_w \mathbf{H} \mathbf{\Lambda}_s^{1/2}) (\mathbf{\Lambda}_s^{-1/2} \mathbf{s}) = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}_s^{-1/2} \mathbf{s}. \quad (6.14)$$

Agora, define-se $\tilde{\mathbf{s}} = [\tilde{s}_1 \ \tilde{s}_2 \ \cdots \ \tilde{s}_N]^\top$ como o vetor de fontes independentes e normalizadas para variância unitária, *i.e.*,

$$\tilde{\mathbf{s}} = \mathbf{\Lambda}_s^{-1/2} \mathbf{s}. \quad (6.15)$$

Substituindo-se (6.15) em (6.14), chega-se a

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{U} \tilde{\mathbf{s}}. \quad (6.16)$$

De acordo com a relação (6.16), a matriz \mathbf{U} relaciona as misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$ às fontes independentes e normalizadas para variância unitária $\tilde{\mathbf{s}}$. Dessa forma, (6.16) admite uma interpretação conforme esquematizado na Figura 9. Como \mathbf{U} é ortogonal, as misturas branqueadas podem ser interpretadas como uma versão rotacionada e refletida das fontes normalizadas para variância unitária. Embora a matriz ortogonal \mathbf{U} dependa da matriz de mistura \mathbf{H} e da matriz de covariância das fontes $\mathbf{\Lambda}_s$ conforme (6.13), a escolha da matriz de branqueamento \mathbf{A}_w tal que a condição (6.3) seja satisfeita impõe que \mathbf{U} seja sempre ortogonal.

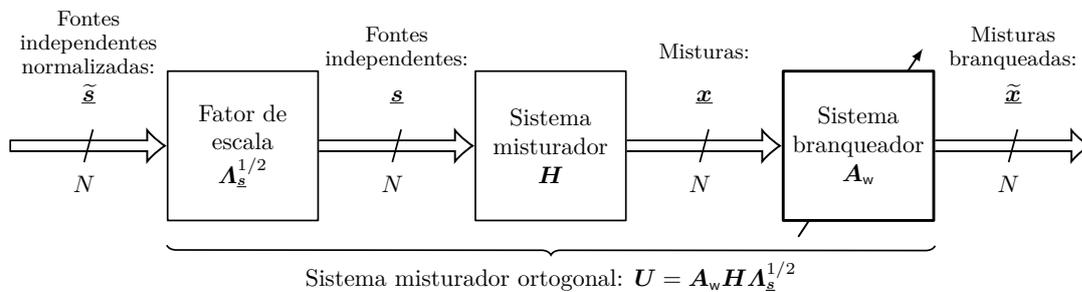


Figura 9 – Esquema simplificado da relação entre misturas branqueadas e fontes independentes normalizadas.

Fonte: autoria própria.

6.2 Efeito do pré-processamento na separação

O branqueamento é usualmente considerado como uma etapa facilitadora do processo de separação cega de fontes (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; COMON, 1994). Seja a configuração de separação da Figura 10-(a) levando-se em conta a etapa de pré-processamento abordada na seção anterior. A fim de separar as fontes após a etapa de pré-processamento, resta determinar uma matriz de separação pós-branqueamento $\widetilde{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ tal que a

matriz de separação global $\mathbf{W} = \widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{A}_w$ separe adequadamente as fontes. Para tanto, o vetor aleatório de fontes estimadas

$$\mathbf{y} = \widetilde{\mathbf{W}}\tilde{\mathbf{x}} \quad (6.17)$$

deve resultar em boas estimativas das fontes. Substituindo-se (6.16) em (6.17), tem-se

$$\mathbf{y} = \widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{U}\tilde{\mathbf{s}}. \quad (6.18)$$

Como \mathbf{U} é ortogonal, a escolha de $\widetilde{\mathbf{W}} = \mathbf{U}^\top$, também ortogonal, implica $\mathbf{y} = \tilde{\mathbf{s}}$. Pode-se mostrar que a busca por uma matriz de separação $\widetilde{\mathbf{W}}$ pode ser feita, sem prejuízo, sobre o conjunto das matrizes ortogonais (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). Levando-se em conta essa simplificação, uma configuração de separação equivalente à da Figura 10-(a) é mostrada na Figura 10-(b).

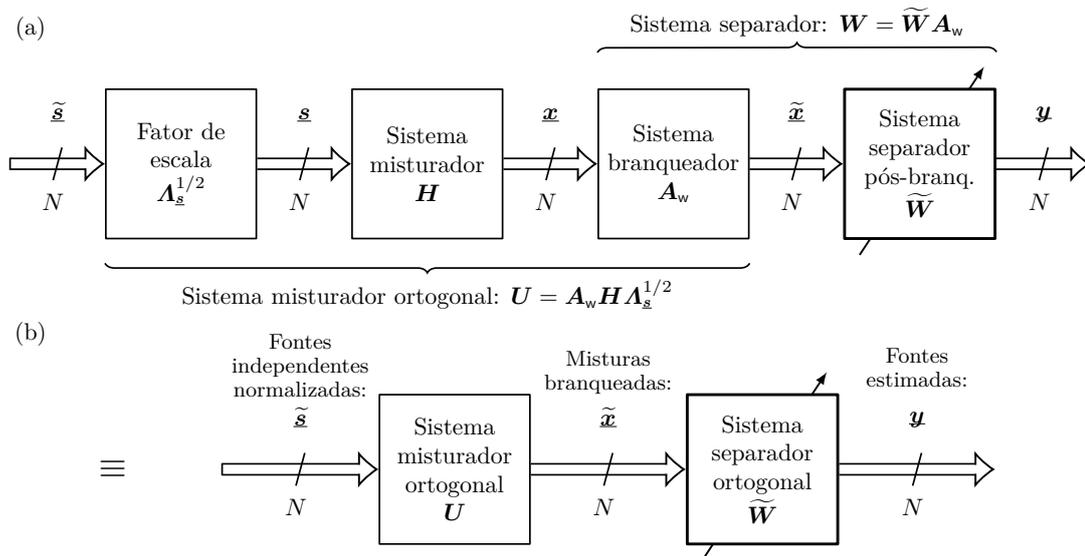


Figura 10 – (a) Esquema simplificado da relação entre fontes estimadas e fontes independentes normalizadas na separação cega de fontes, (b) esquema simplificado equivalente com sistema separador ortogonal.

Fonte: autoria própria.

Recorda-se que, de acordo com o Exemplo 4.1, sem branqueamento são necessárias N^2 equações linearmente independentes para determinar todos os elementos da matriz de mistura \mathbf{H} (ou de $\mathbf{W} = \mathbf{H}^{-1}$). Porém, no problema esquematizado na Figura 10-(b), a determinação cega da matriz de mistura \mathbf{U} (ou de $\widetilde{\mathbf{W}} = \mathbf{U}^\top$), dado que ela é ortogonal, requer apenas $N(N-1)/2$ parâmetros (HORN; JOHNSON, 2013; CARDOSO, 1998). Os demais parâmetros são contemplados pela matriz de branqueamento \mathbf{A}_w , obtida conforme (6.9) a partir da decomposição em autovalores e autovetores de \mathbf{C}_x . Por sua vez, há $N(N+1)/2$ graus de liberdade na obtenção dessa decomposição e, portanto, na determinação de \mathbf{A}_w . Assim, costuma-se dizer que, para N suficientemente grande, o branqueamento resolve um pouco mais da metade do problema de separação cega (HYVÄRINEN; OJA, 2000).

No problema particular considerado na Figura 10-(b), deseja-se usualmente recuperar o vetor aleatório de fontes independentes normalizadas $\tilde{\mathbf{s}}$ a partir do vetor aleatório de misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$. Conforme a relação (6.15), as fontes independentes normalizadas $\tilde{\mathbf{s}}$ correspondem a cópias das fontes independentes \mathbf{s} a menos de fatores de escala. Portanto, na separação após pré-processamento, as fontes são usualmente recuperadas a menos de fatores de escala. Essa ambiguidade, porém, não é um problema particular decorrente da separação com pré-processamento. Trata-se, na verdade, de uma limitação teórica prevista pelo teorema de Darmois–Skitovich e notada por Comon (1994); essa limitação também foi revisitada no Capítulo 5 com base no trabalho de Pavan e Miranda (2018).

Ao contrário da matriz de branqueamento \mathbf{A}_w da Equação (6.9), a matriz ortogonal \mathbf{U} da expressão (6.13) depende da matriz de mistura \mathbf{H} e da matriz de covariância das fontes \mathbf{A}_s . Ambas essas matrizes são desconhecidas no problema de separação cega de fontes considerado na Figura 8. Assim, há necessidade de determinar a matriz ortogonal \mathbf{U} de maneira alternativa a (6.13). Para tanto, é preciso recorrer a estatísticas de ordem superior a dois; afinal, com o branqueamento só é possível determinar as fontes a menos da transformação ortogonal \mathbf{U} segundo (6.16). Em separação cega de fontes, é muitas vezes conveniente o uso de cumulantes para representar estatísticas de ordem superior (CARDOSO, 1999). A etapa seguinte do procedimento usual de separação, que envolve o uso de cumulantes de ordem superior, é abordada na Seção 6.4. Antes, porém, cabe uma digressão sobre as relações existentes entre a etapa de branqueamento e as condições teóricas de separabilidade abordadas no Capítulo 5.

6.3 Branqueamento e separabilidade

Seja o esquema da Figura 8 com $N = 2$. Considera-se que as fontes \mathbf{s} são misturadas conforme $\mathbf{x} = \mathbf{H}\mathbf{s}$, em que \mathbf{x} é o vetor aleatório de misturas e a matriz de mistura é dada por

$$\mathbf{H} = [\mathbf{h}_1 \quad \mathbf{h}_2] = \begin{bmatrix} 0,1302 & 0,9683 \\ -0,5191 & -0,3545 \end{bmatrix}. \quad (6.19)$$

Em seguida, a partir da decomposição em autovalores e autovetores da matriz de covariância das misturas \mathbf{x} , calcula-se a matriz de branqueamento \mathbf{A}_w conforme (6.9) e obtém-se o vetor de misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$.

Na Figura 11, são mostrados os diagramas de dispersão para 1000 realizações independentes das fontes \mathbf{s}_1 e \mathbf{s}_2 , bem como para as realizações decorrentes das misturas observadas \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 e das misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}_1$ e $\tilde{\mathbf{x}}_2$. São considerados três cenários distintos correspondendo a diferentes tipos de distribuições do par de fontes independentes. Esses cenários são representados ao longo das colunas (a), (b) e (c) da Figura 11. Na coluna (a), consideram-se duas fontes com distribuição uniforme; na coluna (b), duas

fontes com distribuições distintas, sendo que uma delas possui distribuição bimodal; e na coluna (c), considera-se um par de fontes conjuntamente gaussianas.

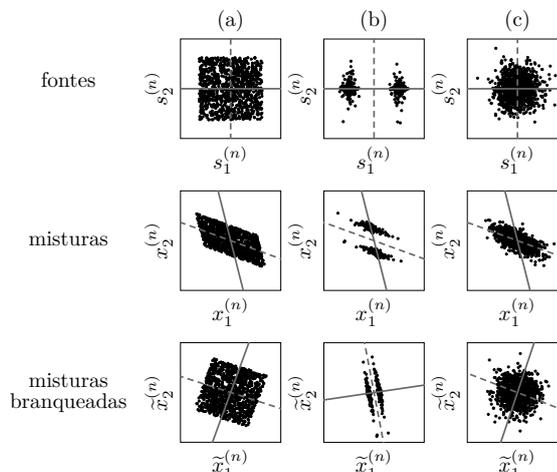


Figura 11 – Diagramas de dispersão de observações das fontes independentes, misturas e misturas branqueadas para $N = 2$ e (a) fontes com distribuição uniforme, (b) fontes com distribuições distintas e (c) fontes conjuntamente gaussianas.

Fonte: autoria própria.

As abscissas e ordenadas dos diagramas de dispersão das fontes, mostradas respectivamente em linha cheia e tracejada nos três gráficos da primeira linha da Figura 11, são também representadas após sofrerem ação das transformações lineares que dão origem às misturas e às misturas branqueadas. Para os diagramas de dispersão das misturas, dispostos ao longo da segunda linha da Figura 11, pode-se demonstrar que esses eixos apontam na direção das colunas da matriz \mathbf{H} ; em particular, em linha cheia é mostrada a direção do vetor \mathbf{h}_1 e, em linha tracejada, a direção do vetor \mathbf{h}_2 .

Comparando-se a primeira e a terceira linhas da Figura 11, verifica-se que a técnica de branqueamento é capaz de recuperar a “estrutura geral” do suporte da distribuição das fontes, a menos de uma rotação ou transformação ortogonal — conforme abordado na Seção 6.2. O passo seguinte de separação de fontes, que envolve a recuperação da independência espacial à saída do sistema separador, é responsável por determinar qual é a rotação que, aplicada às misturas branqueadas, permite obter estimativas mais adequadas das fontes independentes — *i.e.*, a transformação que implicará a independência estatística das componentes separadas.

Percebe-se que há mais de uma rotação possível a ser feita nas misturas branqueadas para que seja recuperado o formato original dos diagramas de dispersão das correspondentes fontes independentes. Dependendo da rotação escolhida, as fontes podem ser recuperadas com uma permutação em relação às fontes originais, *i.e.*, a fonte 2 no lugar da fonte 1, e a fonte 1 no lugar da fonte 2. Trata-se da ambiguidade de permutação na solução do problema cego, representada pela matriz de permutação \mathbf{P} no Teorema 5.4. Essa ambiguidade ocorre pois a imposição de independência é insensível a mudanças na ordem das variáveis aleatórias sendo consideradas.

Observa-se que, no caso da coluna (b), o diagrama de dispersão das misturas branqueadas apresenta um alongamento na direção do eixo em linha tracejada, em relação ao eixo em linha cheia, se comparado ao diagrama das fontes independentes da mesma coluna. Isso representa a ambiguidade de escala, que ocorre na solução do problema cego e é representada pela matriz diagonal \mathbf{A} no Teorema 5.4. Em outras palavras, a independência estatística das variáveis aleatórias é insensível a alterações de suas variâncias (*i.e.*, produtos por escalar). Essa mesma ambiguidade não é observada nas colunas (a) e (c) pois, nesses casos, cada par de fontes possui a mesma variância.

Por fim, é importante notar que, para fontes conjuntamente gaussianas como na coluna (c), o diagrama de dispersão das fontes independentes é simétrico em relação a qualquer eixo passando pela origem. Nesse caso particular, o branqueamento da mistura é suficiente para garantir a independência estatística. Inicialmente, seria possível pensar que o problema de BSS estaria então resolvido, já que dois sinais independentes são recuperados a partir da decorrelação e normalização das misturas. No entanto, qualquer rotação que for aplicada às misturas branqueadas da terceira linha da coluna (c) resultará, também, em variáveis estatisticamente independentes. Como o problema é cego e as fontes não são observadas na prática, é impossível a determinação da rotação adequada que recupera precisamente as fontes independentes originais — a não ser que haja algum conhecimento adicional englobado no modelo (COMON, 1992; COMON, 1994). Portanto, no caso de fontes conjuntamente gaussianas, a etapa posterior ao pré-processamento e correspondente à separação cega de fontes não é capaz de recuperar as fontes independentes originais. Essa é uma forma alternativa, e também complementar, de se convencer da condição do Teorema 5.4 — *i.e.*, de que no máximo uma das fontes pode ser gaussiana para garantir que a imposição de independência implique a separação correta das fontes.

6.4 Separação cega baseada em cumulantes de ordem quatro

Nesta seção, abordam-se os princípios teóricos da aplicação da matriz de quadricovariância à resolução do problema de separação cega de fontes considerado na Figura 10-(b). Basicamente, deseja-se determinar, com base nas estatísticas de ordem quatro das misturas, a matriz ortogonal de mistura

$$\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \cdots \ \mathbf{u}_N] \in \mathbb{R}^{N \times N} \quad (6.20)$$

de modo a separar as fontes com a escolha da matriz ortogonal de separação $\widetilde{\mathbf{W}} = \mathbf{U}^T$. Conforme aborda-se a seguir, a representação dos cumulantes de ordem quatro por meio da matriz de quadricovariância é muito conveniente para atingir esse objetivo. Inicia-se considerando a definição generalizada da matriz de quadricovariância dada pela Equação (3.39), a qual é aplicada ao vetor de misturas branqueadas conforme segue.

Definição 6.1. A matriz de quadricovariância do vetor aleatório de misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$, denotada por $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$, é definida como

$$\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}^{k,\ell}[\mathbf{V}]_{k,\ell},$$

em que $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é uma matriz de pesos. \triangleleft

Considerando-se a expressão (6.16) que relaciona as misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$ às fontes independentes normalizadas $\tilde{\mathbf{s}}$, *i.e.*, $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{U}\tilde{\mathbf{s}}$, pode-se aplicar a Proposição 3.7 para obter uma fatoração da matriz de quadricovariância das misturas branqueadas conforme

$$\boxed{\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) = \mathbf{U}\mathbf{A}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \mathbf{U})\mathbf{U}^T} \quad (6.21)$$

com

$$\boxed{\mathbf{A}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \mathbf{U}) = \text{diag}(\mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{s}}_1,4} \mathbf{u}_1^T \mathbf{V} \mathbf{u}_1, \mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{s}}_2,4} \mathbf{u}_2^T \mathbf{V} \mathbf{u}_2, \dots, \mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{s}}_N,4} \mathbf{u}_N^T \mathbf{V} \mathbf{u}_N)}, \quad (6.22)$$

em que $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_N$ denotam as colunas da matriz \mathbf{U} de acordo com (6.20). Quanto às matrizes que aparecem na fatoração (6.21), observa-se que

- (i) a matriz de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ é simétrica conforme a Proposição 3.4;
- (ii) a matriz de mistura \mathbf{U} considerada, definida em (6.13), é ortogonal;
- (iii) a matriz diagonal $\mathbf{A}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \mathbf{U})$, definida em (6.22), possui elementos reais.

Da álgebra linear, sabe-se que uma matriz é simétrica se, e somente se, ela for ortogonalmente diagonalizável e possuir autovalores reais (GOLUB; VAN LOAN, 2013). Levando-se em conta as afirmações feitas a respeito das matrizes que aparecem em (6.21), pode-se interpretar essa fatoração como uma decomposição em autovalores e autovetores de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$, válida para toda matriz de pesos $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ considerada. Portanto, as matrizes \mathbf{U} e $\mathbf{A}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \mathbf{U})$ podem ser interpretadas, respectivamente, como a matriz de autovetores e a matriz de autovalores de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$. Além disso, independentemente da matriz utilizada na diagonalização da matriz de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$, seus autovalores são sempre dados pelos elementos da diagonal principal de $\mathbf{A}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \mathbf{U})$ (HOFFMAN; KUNZE, 1971).

Como $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ pode ser determinada a partir da observação das misturas branqueadas, pode-se tentar diagonalizá-la a fim de determinar \mathbf{U} a partir da comparação com a expressão (6.21). Entretanto, a diagonalização de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ nem sempre permite determinar \mathbf{U} adequadamente (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). Por um lado, segundo (6.21), $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ é sempre diagonalizável pela matriz ortogonal \mathbf{U} . Por outro, nem sempre se pode garantir que essa decomposição é única. Isso significa que, em certas situações, pode haver matrizes que também diagonalizem a matriz de quadricovariância, mas que não levem à separação adequada das fontes (CARDOSO, 1990).

A fim de estabelecer condições teóricas para \mathbf{U} ser obtida a partir da decomposição em autovalores e autovetores de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ com unicidade, enuncia-se o seguinte resultado da álgebra linear e teoria de matrizes (GOLUB; VAN LOAN, 2013; ZHANG, 2017), aplicado aqui à matriz de quadricovariância das misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$.

Proposição 6.1. *Seja $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ a matriz de quadricovariância das misturas branqueadas, com decomposição em autovalores e autovetores $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \mathbf{U}) \mathbf{U}^T$, em que $\mathbf{\Lambda}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \mathbf{U})$ é definida em (6.22). A menos de*

- (i) mudanças na ordem dos autovalores em $\mathbf{\Lambda}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \mathbf{U})$ e das respectivas colunas de \mathbf{U} e
- (ii) trocas de sinal das colunas de \mathbf{U} ,

a decomposição dada é única se, e somente se, todos os autovalores de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$, dados pelos elementos da diagonal principal de $\mathbf{\Lambda}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \mathbf{U})$, forem distintos.

Demonstração. Veja a Seção A.3 do Apêndice A.

Observa-se que as ambiguidades de permutação e de sinal consideradas na Proposição 6.1 para a determinação cega da matriz ortogonal \mathbf{U} são coerentes com o teorema de separabilidade abordado no Capítulo 5. Recorda-se que, conforme comentado na Seção 6.2, haverá também ambiguidade de escala na recuperação das fontes devido à normalização no passo de branqueamento.

6.5 Identificabilidade da matriz ortogonal de mistura

Destaca-se a importância que a unicidade da decomposição (6.21) possui na determinação da matriz ortogonal de mistura \mathbf{U} a partir dos cumulantes de ordem quatro das misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$. Por esse motivo, é útil adotar a seguinte definição (LACOUME; AMBLARD; COMON, 1997, sect. 7.1.2).

Definição 6.2. *Seja a matriz ortogonal $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ que relaciona as misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$ às fontes independentes normalizadas $\tilde{\mathbf{s}}$ conforme $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{U} \tilde{\mathbf{s}}$. Essa matriz é denominada identificável se, e somente se, puder ser determinada com unicidade a menos de permutações e trocas de sinal de suas colunas. \triangleleft*

Dessa definição e da Proposição 6.1, decorre a seguinte proposição.

Proposição 6.2. *A matriz ortogonal $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é identificável a partir da diagonalização de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ se, e somente se, todos os autovalores de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ forem distintos.*

Demonstração. É direta a partir da consideração da Proposição 6.1 em conjunto com a Definição 6.2. \square

Observando-se os autovalores de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ em (6.22), se valer $\mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{x}},4} = 0$ para mais de uma fonte, então a matriz de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ terá obrigatoriamente mais de um autovalor nulo — e, portanto, repetido. Nessa situação, independentemente da matriz de pesos \mathbf{V} considerada, \mathbf{U} nunca será identificável. Com base nisso, enuncia-se a proposição a seguir (CARDOSO, 1990).

Proposição 6.3. *Se duas ou mais fontes possuírem autocumulantes de ordem quatro nulos, então a matriz ortogonal $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ não é identificável a partir da diagonalização de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$, independentemente da escolha de $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$.*

Felizmente, exceto pelo caso gaussiano que pode ser desconsiderado por limitações teóricas conforme abordado no Capítulo 5, distribuições com autocumulantes de ordem quatro nulos são pouco usuais (CARDOSO, 1999; HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001). Excluído esse caso, resta saber como garantir que $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ tenha autovalores distintos sempre, independentemente das estatísticas das fontes e das colunas da matriz ortogonal \mathbf{U} . Observando-se os elementos da diagonal principal de (6.22), nota-se a presença da matriz de pesos \mathbf{V} nas expressões dos autovalores de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$. Da Subseção 3.4.4, recorda-se que, pelo menos preliminarmente, há liberdade na escolha dos pesos em \mathbf{V} . Na verdade, essa escolha deve ser feita buscando contemplar, na matriz de quadricovariância correspondente, a descrição estatística necessária à resolução do problema considerado. A seguir, aborda-se o efeito aparentemente complicado que a matriz de pesos \mathbf{V} possui na identificabilidade da matriz ortogonal de mistura \mathbf{U} . Inicia-se por meio de dois exemplos numéricos.

Exemplo 6.1 (Autocumulantes de ordem quatro iguais). Seja o problema de separação de fontes da Figura 10-(a) com $N = 2$. Ambas as fontes \underline{s}_1 e \underline{s}_2 possuem distribuição binária assumindo valores ± 1 com a mesma probabilidade. As fontes são misturadas por um sistema com coeficientes

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 0,64 & -0,77 \\ -0,81 & 0,59 \end{bmatrix}$$

resultando no vetor de misturas $\underline{\mathbf{x}} = \mathbf{H}\underline{\mathbf{s}}$. As misturas branqueadas $\tilde{\underline{\mathbf{x}}}_1$ e $\tilde{\underline{\mathbf{x}}}_2$ são obtidas conforme $\tilde{\underline{\mathbf{x}}} = \mathbf{A}_w \underline{\mathbf{x}}$, em que a matriz de branqueamento, calculada com base em (6.9), é dada por

$$\mathbf{A}_w \approx \begin{bmatrix} -4,04 & -4,04 \\ -0,50 & 0,50 \end{bmatrix}.$$

Nas Figuras 12-i.(a), (b) e (c), são mostrados gráficos de 50 observações feitas ao longo do tempo das fontes, misturas e misturas branqueadas, respectivamente. As observações são denotadas por um índice temporal n entre parênteses e sobrescrito. Nas Figuras 12-ii.(a), (b) e (c), são mostrados diagramas de dispersão de cada par de fontes, misturas e misturas branqueadas, respectivamente.

Deseja-se verificar se a diagonalização de diferentes matrizes de quadricovariância permite determinar a matriz ortogonal $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ que relaciona as misturas branqueadas às

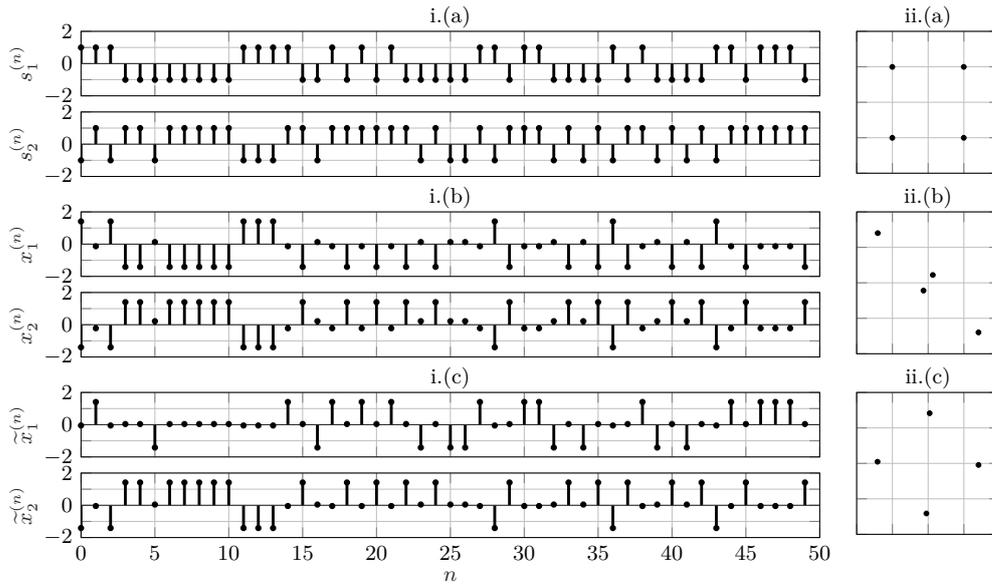


Figura 12 – i. Observações ao longo do tempo e ii. diagramas de dispersão de (a) fontes discretas de mesma distribuição, (b) misturas e (c) misturas branqueadas.

Fonte: autoria própria.

fontes normalizadas segundo $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{U}\tilde{\mathbf{s}}$. Consideram-se duas matrizes de quadricovariância das misturas branqueadas $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a)$ e $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_b)$ com

$$\mathbf{V}_a = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{V}_b = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

As fontes estimadas y_1 e y_2 são obtidas segundo $\mathbf{y} = \widetilde{\mathbf{W}}\tilde{\mathbf{x}}$. São consideradas as alternativas de separação

$$(A) \widetilde{\mathbf{W}} = \widehat{\mathbf{U}}_a^T \quad \text{e} \quad (B) \widetilde{\mathbf{W}} = \widehat{\mathbf{U}}_b^T,$$

em que $\widehat{\mathbf{U}}_a, \widehat{\mathbf{U}}_b$ são matrizes de autovetores calculadas numericamente para $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a)$ e $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_b)$, respectivamente. Essas matrizes de autovetores são assim denotadas para indicar que se trata de candidatas à matriz ortogonal de mistura \mathbf{U} . Sua validade, porém, dependerá da unicidade da decomposição em autovalores e autovetores das matrizes de quadricovariância. Nas Figuras 13-i.(a) e (b), são mostrados gráficos de 50 observações feitas ao longo do tempo das fontes e fontes estimadas para as alternativas (A) e (B), respectivamente. Nas Figuras 13-ii.(a) e (b), são mostrados os diagramas de dispersão correspondentes a cada caso. Para facilitar a comparação, a ordem e os sinais das observações das fontes estimadas foram ajustados para corresponder, quando possível, às observações das respectivas fontes.

A partir das Figuras 13-i.(a) e ii.(a) referentes à alternativa (A), nota-se que as fontes não são separadas adequadamente ao considerar $\widetilde{\mathbf{W}} = \widehat{\mathbf{U}}_a^T$ obtida a partir da diagonalização de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a)$. No entanto, a partir das Figuras 13-i.(b) e ii.(b) referentes à alternativa (B), nota-se que as fontes são separadas adequadamente ao considerar $\widetilde{\mathbf{W}} = \widehat{\mathbf{U}}_b^T$ obtida a partir da diagonalização de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_b)$. Sendo assim, nesse caso apenas $\widehat{\mathbf{U}}_b$ corresponde a uma versão válida, a menos de ambiguidades, da matriz ortogonal de mistura \mathbf{U} . \triangleleft

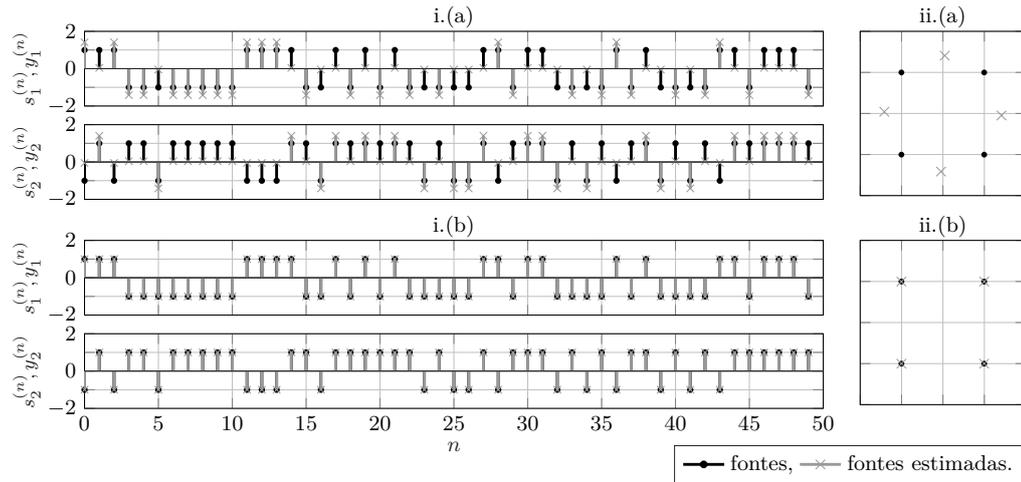


Figura 13 – i. Observações ao longo do tempo e ii. diagramas de dispersão das fontes e fontes estimadas obtidas a partir da diagonalização das matrizes (a) $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a)$ e (b) $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_b)$.
Fonte: autoria própria.

Exemplo 6.2 (Autocumulantes de ordem quatro distintos). Seja novamente o problema de separação de fontes da Figura 10-(a) em que $N = 2$, agora considerando-se que a fonte s_1 possui distribuição logística de parâmetro $s = \sqrt{3}/\pi$ e a fonte s_2 possui distribuição laplaciana de parâmetro $b = 1/\sqrt{2}$. Nesse exemplo, as fontes são misturadas por um sistema com coeficientes

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 0,39 & 0,92 \\ -0,91 & -0,42 \end{bmatrix}$$

resultando no vetor de misturas $\mathbf{x} = \mathbf{H}\mathbf{s}$. As misturas branqueadas \tilde{x}_1 e \tilde{x}_2 são obtidas a partir de uma matriz de branqueamento dada por

$$\mathbf{A}_w \approx \begin{bmatrix} -1,39 & -1,38 \\ -0,53 & 0,54 \end{bmatrix},$$

a qual é aplicada às misturas conforme $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{A}_w\mathbf{x}$. Nas Figuras 14-i.(a), (b) e (c), são mostrados gráficos de 50 observações feitas ao longo do tempo das fontes, misturas e misturas branqueadas, respectivamente. Nas Figuras 14-ii.(a), (b) e (c), são mostrados diagramas de dispersão com 10^3 observações de cada par de fontes, misturas e misturas branqueadas, respectivamente.

Agora, consideram-se as matrizes de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a)$ e $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_b)$ com

$$\mathbf{V}_a = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{V}_b = \begin{bmatrix} 1 & -0,4 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Verificam-se as alternativas de separação

$$(A) \widetilde{\mathbf{W}} = \widehat{\mathbf{U}}_a^T \quad \text{e} \quad (B) \widetilde{\mathbf{W}} = \widehat{\mathbf{U}}_b^T,$$

em que $\widehat{\mathbf{U}}_a, \widehat{\mathbf{U}}_b$ são matrizes de autovetores calculadas numericamente para $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a)$ e $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_b)$, respectivamente. Nas Figuras 15-i.(a) e (b), são mostrados gráficos de 50 observações feitas ao longo do tempo das fontes e fontes estimadas para as alternativas (A) e (B),

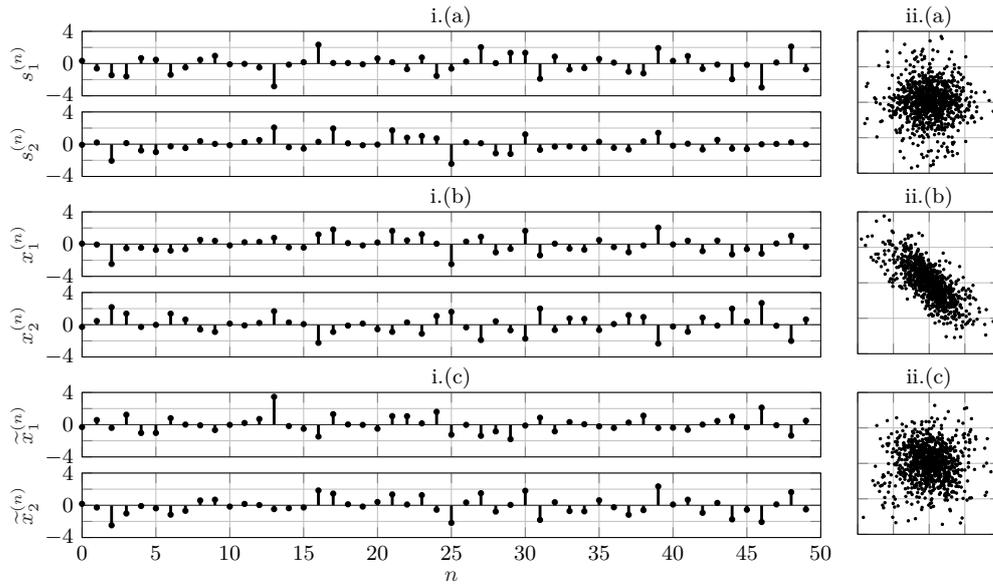


Figura 14 – i. Observações ao longo do tempo e ii. diagramas de dispersão com 10^3 observações de (a) fontes contínuas com autocumulantes de ordem quatro distintos, (b) misturas e (c) misturas branqueadas.

Fonte: autoria própria.

respectivamente. Nas Figuras 15-ii.(a) e (b), são mostrados os diagramas de dispersão correspondentes a cada caso.

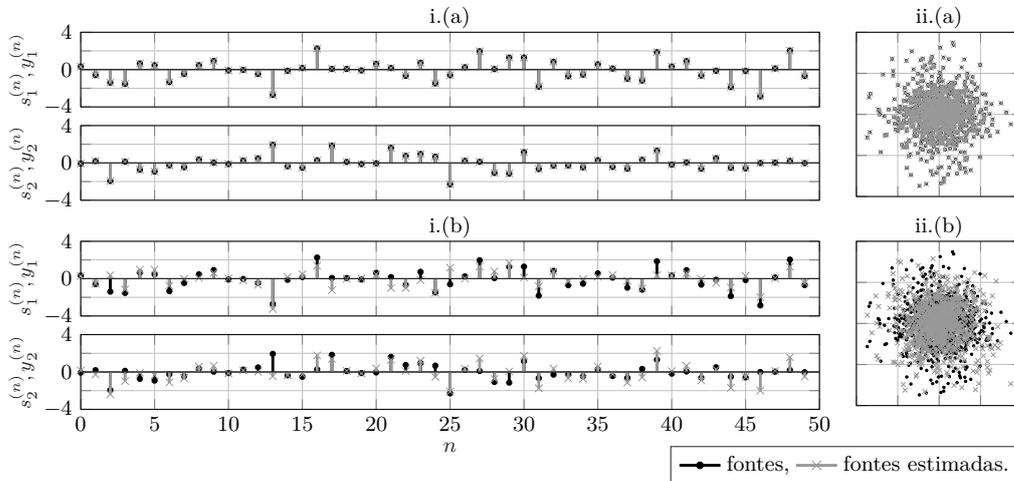


Figura 15 – i. Observações ao longo do tempo e ii. diagramas de dispersão das fontes e fontes estimadas obtidas a partir da diagonalização das matrizes (a) $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a)$ e (b) $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_b)$.

Fonte: autoria própria.

Observando-se as Figuras 15-i.(a) e ii.(a) referentes à alternativa (A), nota-se que as fontes são separadas adequadamente ao considerar $\tilde{\mathbf{W}} = \hat{\mathbf{U}}_a^\top$ obtida a partir da diagonalização de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a)$. Logo, $\hat{\mathbf{U}}_a$ é uma candidata que corresponde, a menos de ambiguidades, à matriz ortogonal de mistura \mathbf{U} . Entretanto, a partir das Figuras 15-i.(b) e ii.(b) referentes à alternativa (B), nota-se que as fontes não são separadas adequadamente ao considerar $\tilde{\mathbf{W}} = \hat{\mathbf{U}}_b^\top$ obtida a partir da diagonalização de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_b)$. \triangleleft

Com os exemplos apresentados, obtêm-se pistas de como as estatísticas das fontes e

as matrizes de pesos adotadas intervêm na obtenção adequada da matriz ortogonal que leva à separação. Particularmente, considerando-se uma matriz de pesos identidade, *i.e.*, $\mathbf{V} = \mathbf{I}_N$, a partir de (6.22) obtém-se

$$\mathbf{A}_{\bar{x},4}(\mathbf{I}_N, \mathbf{U}) = \text{diag}(\mathcal{C}_{\bar{x}_1,4}, \mathcal{C}_{\bar{x}_2,4}, \dots, \mathcal{C}_{\bar{x}_N,4}). \quad (6.23)$$

Nesse caso, os autovalores de $\mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V})$ são distintos se, e somente se, as fontes normalizadas possuírem autocumulantes de ordem quatro distintos (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). Isso permite compreender o resultado dos diagramas i.(c) e ii.(c) da Figura 13 e leva à seguinte proposição (CARDOSO, 1990).

Proposição 6.4. *A matriz ortogonal $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é identificável a partir da diagonalização de $\mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{I}_N)$ se, e somente se, todas as fontes normalizadas possuírem autocumulantes de ordem quatro distintos.*

Técnicas obtidas a partir da escolha de matriz de pesos identidade começaram a ser estudadas no final dos anos 1980 e são historicamente denominadas identificação cega de quarta ordem (FOBI, do inglês *fourth-order blind identification*) (CARDOSO, 1990; MIETTINEN et al., 2015). O caminho usual para sua obtenção é similar ao apresentado até esse ponto no texto, embora muitas interpretações e deduções inseridas até aqui sejam usualmente omitidas em referências mais avançadas. Ressalta-se que a abordagem do FOBI funciona em um caso muito específico: quando as fontes normalizadas possuem estatísticas de ordem quatro distintas. Uma solução aceitável para o problema de BSS, no entanto, deve garantir a separação para o conjunto mais amplo possível de estatísticas das fontes e para quaisquer coeficientes do sistema misturador, observadas as condições teóricas de separabilidade abordadas no Capítulo 5.

6.6 Completude da representação matricial no contexto de separação

A questão da completude da matriz de quadricovariância¹, considerada na Subseção 3.4.5, é abordada nesta seção do ponto de vista do problema de separação cega de fontes esquematizado na Figura 10-(b). Nesse problema, a presença ou não da completude se manifesta na extensão das condições de identificabilidade da matriz ortogonal de mistura (LACOUME; AMBLARD; COMON, 1997; CARDOSO, 1999). Basicamente, haverá completude da representação matricial se essa representação permitir atingir condições de identificabilidade o mais próximas possível da limitação teórica de separabilidade abordada no Capítulo 5.

¹ Recordar-se que a descrição completa dos cumulantes de ordem quatro de um vetor aleatório é contemplada pelo operador de quadricovariância e não necessariamente por uma matriz de quadricovariância particular, *i.e.*, tomada sobre uma matriz de pesos específica. Em muitos casos práticos, é importante garantir que toda a descrição estatística presente no tensor de cumulantes de ordem quatro seja contemplada pela representação matricial utilizada na resolução de um determinado problema.

A fim de estender a condição de identificabilidade da Proposição 6.4 para fontes normalizadas com autocumulantes de ordem quatro iguais, propôs-se em Cardoso e Souloumiac (1993), Cardoso (1999) a consideração de um conjunto de matrizes de quadricovariância e a sua posterior diagonalização simultânea. Argumentou-se que essas matrizes devem ser adequadamente escolhidas de modo a refletirem coletivamente a descrição completa dos cumulantes de ordem quatro dada pelo operador de quadricovariância (CARDOSO, 1999). Segundo essa abordagem, foi possível estender as condições de identificabilidade para fontes com mesmas estatísticas. Além disso, verificou-se a possibilidade de representar matricialmente toda a descrição estatística de ordem quatro presente no operador de quadricovariância ao considerar um conjunto adequado de matrizes do espaço imagem desse operador.

Inicialmente, mostra-se na Subseção 6.6.1 como é possível estender a Proposição 6.4 a partir da verificação de propriedades especiais de certas matrizes de pesos e de sua consideração em conjunto (CARDOSO, 1999). Posteriormente, na Subseção 6.6.2, enunciam-se propriedades adicionais do operador de quadricovariância a fim de, na Subseção 6.6.3, obter representações completas de estatísticas de ordem quatro no contexto de separação cega de fontes.

6.6.1 Ampliando as condições de identificabilidade

Supõe-se inicialmente que as colunas $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_N$ da matriz ortogonal de mistura \mathbf{U} são conhecidas. Observando-se os autovalores de $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ em (6.22), sugere-se considerar um conjunto de N matrizes de pesos simétricas

$$\boxed{\mathbf{V}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^T} \quad (6.24)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$. Devido à ortogonalidade e à norma unitária dos vetores $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_N$, tem-se

$$\mathbf{A}_{\bar{\mathbf{x}},4}(\mathbf{V}_i, \mathbf{U}) = \text{diag}(0, \dots, 0, \mathcal{C}_{\bar{\mathbf{x}},4}, 0, \dots, 0) \quad (6.25)$$

com elemento não necessariamente nulo apenas na i -ésima posição da diagonal principal. Esse comportamento se repete, analogamente, para cada $i = 1, 2, \dots, N$ considerado. Com base na Proposição 6.1, a identificação da direção \mathbf{u}_i a partir da diagonalização de $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_i)$ será possível desde que $\mathcal{C}_{\bar{\mathbf{x}},4} \neq 0$. Como a diagonalização de cada matriz $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_i)$ garante a identificabilidade da direção \mathbf{u}_i para $\mathcal{C}_{\bar{\mathbf{x}},4} \neq 0$, a diagonalização simultânea das matrizes $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_1), \mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_2), \dots, \mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_N)$ por uma mesma matriz ortogonal implicará a identificabilidade da matriz de mistura \mathbf{U} por completo — desde que nenhuma fonte possua autocumulante de ordem quatro nulo. Além disso, no caso particular em que a i -ésima fonte é a única que possui $\mathcal{C}_{\bar{\mathbf{x}},4} = 0$, pode-se desconsiderar a diagonalização da matriz $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_i)$, que por sua vez resultará nula. Após a identificação de todas as outras direções a partir da diagonalização simultânea das demais matrizes de quadricovariância,

é possível identificar \mathbf{u}_i completando-se a base ortonormal com a direção restante. Tem-se, então, a seguinte proposição (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993).

Proposição 6.5. *A matriz ortogonal $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é identificável a partir da diagonalização simultânea de todas as matrizes*

$$\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_1), \mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_2), \dots, \mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_N) \quad (6.26)$$

com $\mathbf{V}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top$ para $i = 1, 2, \dots, N$ se, e somente se, no máximo uma fonte possuir autocumulante de ordem quatro nulo.

A condição dada pela Proposição 6.5 é mais abrangente do que a do FOBI, em cujo caso \mathbf{U} não é identificável se duas ou mais fontes possuírem as mesmas estatísticas (CARDOSO, 1989). Considerar a diagonalização simultânea das matrizes de quadricovariância conforme a Proposição 6.5 representa levar em conta toda a descrição estatística de ordem quatro contemplada pelo operador de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$. A fim de compreender melhor essa afirmação, considera-se a Equação (6.21) com $\mathbf{V} = \mathbf{V}_i$, juntamente com (6.20) e (6.25), para obter

$$\boxed{\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_i) = \mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{x}},4} \mathbf{V}_i} \quad (6.27)$$

com $\mathbf{V}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top$. Do ponto de vista algébrico, é possível interpretar \mathbf{V}_i como um autovetor do operador linear $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}} : \mathbb{R}^{N \times N} \rightarrow \mathbb{R}^{N \times N}$. Devido ao espaço matricial em que o operador de quadricovariância atua, os autovetores de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$ são denominados automatrizes (CARDOSO, 1990; CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). O autovalor ao qual a automatriz \mathbf{V}_i está associada é, portanto, igual a $\mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{x}},4}$. Além disso, substituindo-se (6.20) e (6.22) em (6.21), consideradas aqui para uma matriz de pesos qualquer \mathbf{V} , a matriz de quadricovariância pode sempre ser escrita como

$$\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) = \sum_{i=1}^N (\mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{x}},4} \mathbf{u}_i^\top \mathbf{V} \mathbf{u}_i) \mathbf{V}_i. \quad (6.28)$$

Finalmente, substituindo-se (6.27) em (6.28), obtém-se

$$\boxed{\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) = \sum_{i=1}^N (\mathbf{u}_i^\top \mathbf{V} \mathbf{u}_i) \mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_i).} \quad (6.29)$$

De acordo com (6.28) e (6.29), o operador de quadricovariância pode sempre ser escrito como uma combinação linear de suas automatrizes \mathbf{V}_i , ou então das matrizes de quadricovariância correspondentes $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_i)$. Logo, o conjunto das matrizes $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_i)$ para $i = 1, 2, \dots, N$ deve levar em conta toda a informação acerca das estatísticas de ordem quatro do vetor aleatório $\tilde{\mathbf{x}}$. Intuitivamente, pode-se interpretar a diagonalização simultânea das matrizes $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_1), \mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_2), \dots, \mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_N)$ como uma forma de considerar toda essa informação na identificação da matriz \mathbf{U} . Isso, por sua vez, resulta na ampliação da condição de identificabilidade para aquela considerada na Proposição 6.5. A exceção ocorre apenas para o

caso degenerado de duas ou mais fontes com autocumulantes de ordem quatro nulos, sendo no máximo uma fonte gaussiana. Nesse caso, a identificabilidade não é possível devido à ordem das estatísticas utilizadas (CARDOSO, 1999), podendo-se recorrer a estatísticas de ordens maiores do que quatro caso necessário.

Exemplo 6.3. Seja o problema de separação de fontes da Figura 10-(b) com $N = 2$. Considera-se que a matriz ortogonal de mistura é variada conforme

$$\mathbf{U}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (6.30)$$

para $0 \leq \theta < \pi$. Na Figura 16, são mostrados gráficos correspondentes à diferença entre os autovalores da matriz de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V})$ em dois casos: (a) fontes com distribuições iguais e (b) fontes com autocumulantes de ordem quatro distintos. Em cada

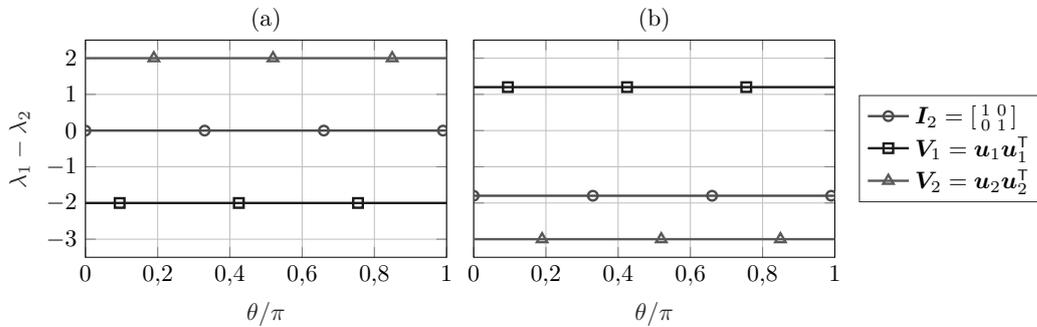


Figura 16 – Diferença entre os autovalores da matriz de quadricovariância para diferentes matrizes de pesos com fontes independentes tais que (a) $\mathcal{C}_{\underline{s}_1,4} = \mathcal{C}_{\underline{s}_2,4} = -2$ e (b) $\mathcal{C}_{\underline{s}_1,4} = 1,2$ e $\mathcal{C}_{\underline{s}_2,4} = 3$. Fonte: autoria própria.

caso, consideram-se ainda três matrizes de pesos \mathbf{V} distintas no cálculo da matriz de quadricovariância, *i.e.*, a matriz identidade \mathbf{I}_2 e as automatrizes \mathbf{V}_1 e \mathbf{V}_2 . A diferença de autovalores de $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V})$, em ambos os cenários e para todas as matrizes de pesos consideradas, é constante com a variação do ângulo θ . Isso corrobora o fato de que as expressões (6.23) e (6.25), referentes aos autovalores nas situações consideradas, independem dos coeficientes da matriz de mistura. Porém, essa independência não necessariamente é algo desejável; por exemplo, no caso (a) com matriz de pesos identidade, a diferença entre os autovalores é nula para qualquer ângulo. Logo, os autovalores são sempre iguais e não há identificabilidade conforme previsto pela Proposição 6.4. Também como previsto por essa proposição, a identificabilidade para a matriz de pesos identidade é recuperada no caso (b) de fontes com estatísticas distintas. \triangleleft

Em problemas práticos de separação, as direções \mathbf{u}_i que se deseja determinar para $i = 1, 2, \dots, N$ são desconhecidas. Felizmente, embora as automatrizes \mathbf{V}_i dependam dessas direções, é possível determinar essas matrizes sem conhecer \mathbf{u}_i . Isso pode ser feito considerando-se um operador linear auxiliar análogo a $\mathbf{Q}_{\underline{x}}$, mas atuando no espaço vetorial de coordenadas \mathbb{R}^{N^2} . Na obtenção do operador análogo, é usual considerar um mapeamento

bijetor (*i.e.*, isomorfismo) do espaço de matrizes $\mathbb{R}^{N \times N}$ em \mathbb{R}^{N^2} por meio do empilhamento das colunas de cada matriz. Com isso, os elementos das automatrizes \mathbf{V}_i podem ser obtidos diagonalizando-se o operador análogo definido em \mathbb{R}^{N^2} e representado por uma matriz $N^2 \times N^2$ de cumulantes (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). Apesar disso, em virtude de erros numéricos e de estimação de cumulantes, o que se obtêm são estimativas das automatrizes \mathbf{V}_i — as quais devem posteriormente ser utilizadas na separação de fato, *i.e.*, na obtenção das matrizes de quadricovariância e sua diagonalização. Esse erro prévio cometido ao estimar as automatrizes faz com que a separação seja mais difícil para alguns sistemas misturadores do que outros (CARDOSO, 1999). Na prática, deseja-se que o método de separação cega seja equivariante, *i.e.*, que seu desempenho independa dos elementos da matriz de mistura de um dado problema (CARDOSO, 1995). Logo, é desvantajoso considerar as automatrizes estimadas via isomorfismo no procedimento de separação (CARDOSO, 1999).

Com base na escolha de matrizes de pesos da Proposição 6.5 e na diagonalização simultânea das respectivas matrizes de quadricovariância, propôs-se no início dos anos 1990 uma técnica amplamente utilizada e conhecida como diagonalização conjunta aproximada de automatrizes (JADE, do inglês *joint approximate diagonalization of eigenmatrices*) (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). Somente após a proposição inicial dessa técnica que problemas de equivariância foram identificados (CARDOSO, 1999; MIETTINEN et al., 2015). Em virtude disso, sugeriu-se substituir as automatrizes por um conjunto de matrizes de pesos independentes das direções \mathbf{u}_i , mas que mantivessem as condições de identificabilidade da Proposição 6.5. A seguir, verifica-se algebricamente a possibilidade de preservar a identificabilidade da matriz ortogonal de mistura com uma escolha alternativa de matrizes de pesos. Antes de prosseguir, porém, apresentam-se algumas propriedades algébricas do operador de quadricovariância. Essas propriedades são principalmente úteis no desenvolvimento algébrico subsequente.

6.6.2 Espaços vetoriais associados ao operador de quadricovariância

Inicialmente, o produto interno² das automatrizes do operador de quadricovariância, devido à propriedade de invariância do traço a permutações cíclicas, satisfaz

$$\langle \mathbf{V}_i, \mathbf{V}_j \rangle = \text{tr}(\mathbf{V}_i \mathbf{V}_j^T) = \text{tr}(\mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j \mathbf{u}_j^T) = \delta_{i,j}$$

² Por conveniência, adota-se nesta subseção o produto interno usual do espaço vetorial de matrizes reais $N \times N$ (HOFFMAN; KUNZE, 1971) definido como

$$\begin{aligned} \langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{R}^{N \times N} \times \mathbb{R}^{N \times N} &\rightarrow \mathbb{R} \\ (\mathbf{A}, \mathbf{B}) &\mapsto \text{tr}(\mathbf{A} \mathbf{B}^T). \end{aligned} \tag{6.31}$$

para $i, j = 1, 2, \dots, N$. Como consequência, a sequência de matrizes $\{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N\}$ é ortonormal. A partir de (6.28), observa-se que o espaço imagem de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$ está contido no subespaço com base $\{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N\}$. Além disso, destaca-se que:

- ◇ Se $\mathcal{C}_{\tilde{s}_i,4} \neq 0$ para $i = 1, 2, \dots, N$, então

$$\{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N\}$$

é uma base ortonormal do espaço imagem de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$. Nesse caso, o posto do operador $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$ é igual a N .

- ◇ Se $\mathcal{C}_{\tilde{s}_i,4} = 0$ apenas para a i -ésima fonte, então retira-se \mathbf{V}_i da sequência anteriormente considerada conforme

$$\{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N\} \setminus \{\mathbf{V}_i\},$$

que corresponde a uma base ortonormal do espaço imagem de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$. Nesse caso, o posto do operador $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$ passa a ser igual a $N - 1$.

Como o operador de quadricovariância atua em um espaço vetorial de matrizes $\mathbb{R}^{N \times N}$ cuja dimensão é N^2 , sabe-se que o núcleo de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$ tem dimensão igual a $N^2 - \text{posto}(\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}})$. Por construção, matrizes do tipo

$$\boxed{\mathbf{V}_{i,j} = \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j^\top} \quad (6.32)$$

para $i, j = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$, anulam $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$ e podem ser interpretadas como automatrizes associadas a autovalores nulos. De fato, a partir de (6.28), tem-se

$$\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_{i,j}) = \sum_{k=1}^N (\mathcal{C}_{\tilde{s}_k,4} \mathbf{u}_k^\top \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j^\top \mathbf{u}_k) \mathbf{V}_k = \mathbf{0}_{N \times N}.$$

Conforme a definição do produto interno (6.31), para $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$ e $k \neq \ell$ valem $\langle \mathbf{V}_{i,j}, \mathbf{V}_k \rangle = 0$ e $\langle \mathbf{V}_{i,j}, \mathbf{V}_{k,\ell} \rangle = \delta_{i,k} \delta_{j,\ell}$. Com base nisso, observa-se que:

- ◇ Se $\mathcal{C}_{\tilde{s}_i,4} \neq 0$ para $i = 1, 2, \dots, N$, então

$$\{\mathbf{V}_{1,2}, \mathbf{V}_{1,3}, \dots, \mathbf{V}_{1,N}, \dots, \mathbf{V}_{N,1}, \mathbf{V}_{N,2}, \dots, \mathbf{V}_{N,N-1}\}$$

é uma base ortonormal do núcleo de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$ contendo $N(N - 1) = N^2 - N$ matrizes.

- ◇ Em contrapartida, se $\mathcal{C}_{\tilde{s}_i,4} = 0$ apenas para a i -ésima fonte, então

$$\{\mathbf{V}_{1,2}, \mathbf{V}_{1,3}, \dots, \mathbf{V}_{1,N}, \dots, \mathbf{V}_{N,1}, \mathbf{V}_{N,2}, \dots, \mathbf{V}_{N,N-1}\} \cup \{\mathbf{V}_i\}$$

é uma base ortonormal do núcleo de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$ contendo $N(N - 1) + 1 = N^2 - (N - 1)$ matrizes.

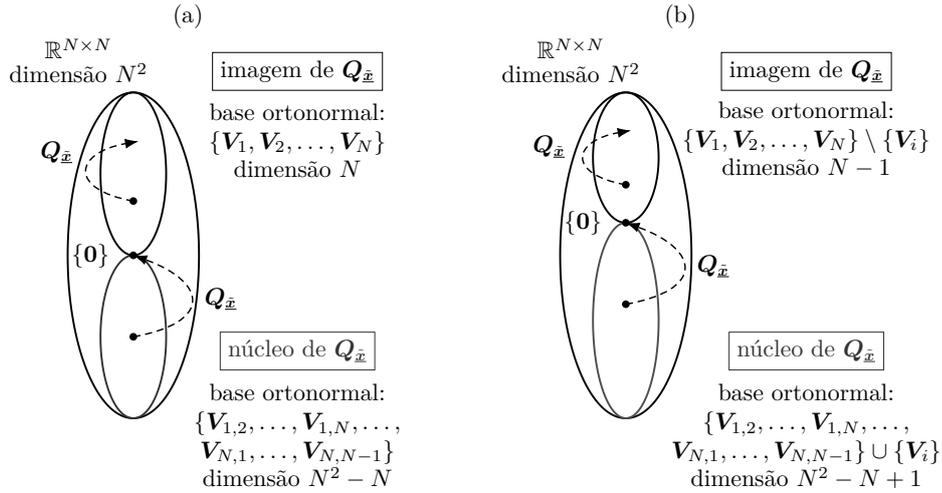


Figura 17 – Esquema resumido dos espaços vetoriais associados ao operador de quadricovariância; (a) $\mathcal{C}_{\underline{x},4} \neq 0$ para todas as fontes e (b) $\mathcal{C}_{\underline{x},4} = 0$ apenas para a i -ésima fonte.

Fonte: autoria própria.

Na Figura 17 é mostrado um esquema resumido dos espaços associados ao operador de quadricovariância abordados até aqui.

Independentemente das estatísticas das fontes ou dos coeficientes do sistema misturador, pode-se mostrar que o operador $\mathbf{Q}_{\underline{x}}$ não é inversível para $N > 1$, dado que não é injetivo nem sobrejetivo. Porém, trata-se de um operador simétrico conforme abordado a seguir.

Proposição 6.6. *O operador de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\underline{x}}$ é simétrico sob o produto interno usual, i.e.,*

$$\text{tr}(\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_a) \mathbf{V}_b^\top) = \text{tr}(\mathbf{V}_a \mathbf{Q}_{\underline{x}}^\top(\mathbf{V}_b)) \quad \forall \mathbf{V}_a, \mathbf{V}_b \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

Demonstração. Veja a Seção A.3 do Apêndice A.

Recorda-se que o tensor de cumulantes de ordem quatro $\mathcal{C}_{\underline{a},4}$, a partir do qual o operador de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\underline{x}}$ foi obtido algebricamente nas Subseções 3.4.3 e 3.4.4, é um tensor simétrico. A Proposição 6.6 decorre da simetria do tensor que dá origem à representação matricial. A simetria do operador é uma propriedade algébrica mais forte do que a simples simetria da matriz de quadricovariância dada pela Proposição 3.4. Por exemplo, o fato de o operador sempre admitir uma sequência ortonormal de N^2 automatrizes constituindo uma base do $\mathbb{R}^{N \times N}$, conforme esquematizado na Figura 17, decorre de sua simetria (HOFFMAN; KUNZE, 1971). Por sua vez, a existência dessa base equivale a dizer que o operador de quadricovariância é ortogonalmente diagonalizável. Trata-se de uma extensão do conceito de diagonalizabilidade da álgebra linear, usualmente aplicado a matrizes, para o caso de um operador linear que atua sobre matrizes. A simetria do operador de quadricovariância e suas implicações são particularmente úteis na interpretação algébrica da completude da representação matricial, abordada a seguir considerando-se a aplicação específica de separação cega de fontes.

6.6.3 Representações completas alternativas

Basicamente, deseja-se obter escolhas alternativas de matrizes de pesos que preservem a identificabilidade da matriz ortogonal \mathbf{U} ; ou, em outras palavras, que preservem a completude da representação matricial aplicada ao problema de separação de fontes considerado. Primeiramente, é importante se convencer de que uma demonstração para esse tipo de resultado não é evidente. Por exemplo, seja uma sequência de M matrizes de pesos alternativas $N \times N$ dada por

$$\{\mathbf{V}'_1, \mathbf{V}'_2, \dots, \mathbf{V}'_M\}.$$

Cada matriz de quadricovariância tomada sobre uma dessas matrizes pesos, *i.e.*, $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}'_k)$ para $k = 1, 2, \dots, M$, possui conforme (6.22) os seguintes N autovalores:

$$\begin{aligned} \lambda_1(\mathbf{V}'_k, \mathbf{u}_1) &= \mathcal{C}_{\bar{s}_1,4} \mathbf{u}_1^\top \mathbf{V}'_k \mathbf{u}_1, \\ \lambda_2(\mathbf{V}'_k, \mathbf{u}_2) &= \mathcal{C}_{\bar{s}_2,4} \mathbf{u}_2^\top \mathbf{V}'_k \mathbf{u}_2, \\ &\vdots \\ \lambda_N(\mathbf{V}'_k, \mathbf{u}_N) &= \mathcal{C}_{\bar{s}_N,4} \mathbf{u}_N^\top \mathbf{V}'_k \mathbf{u}_N. \end{aligned}$$

Considerando-se a diagonalização simultânea das matrizes de quadricovariância

$$\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}'_1), \mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}'_2), \dots, \mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}'_M), \quad (6.33)$$

seria preciso mostrar, baseando-se na Proposição 6.2, que o i -ésimo autovalor $\lambda_i(\mathbf{V}'_k, \mathbf{u}_i)$, para $i = 1, 2, \dots, N$, é diferente de todos os autovalores pertencentes a

$$\{\lambda_1(\mathbf{V}'_k, \mathbf{u}_1), \lambda_2(\mathbf{V}'_k, \mathbf{u}_2), \dots, \lambda_N(\mathbf{V}'_k, \mathbf{u}_N)\} \setminus \{\lambda_i(\mathbf{V}'_k, \mathbf{u}_i)\}$$

para, pelo menos, um valor de $k = 1, 2, \dots, M$. Além disso, essa condição deve ser satisfeita para qualquer base ortonormal $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_N\}$ do \mathbb{R}^N e quaisquer autocumulantes de ordem quatro das fontes $\mathcal{C}_{\bar{s}_1,4}, \mathcal{C}_{\bar{s}_2,4}, \dots, \mathcal{C}_{\bar{s}_N,4}$ tais que no máximo um seja nulo. Trata-se de um caminho inviável para realizar a demonstração, dada a quantidade considerável de igualdades a serem verificadas, principalmente para M e N grandes.

Diferentemente dessa proposta inicial, a ideia que permitiu realizar a demonstração do resultado que segue é baseada em obter uma condição equivalente à condição mais geral de identificabilidade dada pela Proposição 6.5. Em outras palavras, propõe-se mostrar que a diagonalização simultânea das matrizes de quadricovariância (6.33), tomadas sobre as matrizes de pesos alternativas \mathbf{V}'_k , equivale à diagonalização simultânea das matrizes originais (6.26) da Proposição 6.5, tomadas sobre matrizes de pesos $\mathbf{V}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top$, *i.e.*, as automatrizes do operador. Com base nessa estratégia, apresenta-se a seguir uma proposição acerca da equivalência da diagonalização simultânea de dois conjuntos distintos de matrizes de quadricovariância. Posteriormente, essa proposição é considerada na obtenção da condição de identificabilidade para as matrizes de pesos alternativas.

Proposição 6.7. *Seja a matriz ortogonal $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \cdots \ \mathbf{u}_N] \in \mathbb{R}^{N \times N}$ e seja a seqüência ortonormal de automatrizes do operador $\mathbf{Q}_{\underline{x}}$ dada por $\{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N\}$ com $\mathbf{V}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \in \mathbb{R}^{N \times N}$ para $i = 1, 2, \dots, N$. Considera-se, adicionalmente, uma seqüência $\{\mathbf{V}'_1, \mathbf{V}'_2, \dots, \mathbf{V}'_M\}$ de $M \geq N$ matrizes $N \times N$ tal que*

$$\llbracket \mathbf{V}'_1, \mathbf{V}'_2, \dots, \mathbf{V}'_M \rrbracket \supset \llbracket \mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N \rrbracket, \quad (6.34)$$

em que $\llbracket \cdot \rrbracket$ denota o subespaço vetorial gerado por (\cdot) . Trata-se da situação esquematizada na Figura 18. Uma matriz ortogonal $\boldsymbol{\Theta} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ diagonaliza simultaneamente as matrizes $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_1), \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_2), \dots, \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_M)$ se, e somente se, essa matriz também diagonalizar simultaneamente as matrizes $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_1), \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_2), \dots, \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_N)$.

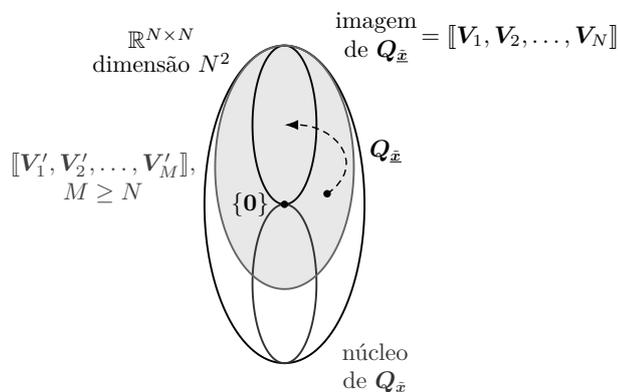


Figura 18 – Esquema resumido dos espaços vetoriais considerados na Proposição 6.7.
Fonte: autoria própria.

Demonstração.

- ◇ Diagonalização de $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_i) \Rightarrow$ Diagonalização de $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_k)$: Aplicando-se (6.29) para expandir $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_k)$, obtém-se

$$\boldsymbol{\Theta}^\top \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_k) \boldsymbol{\Theta} = \sum_{i=1}^N (\mathbf{u}_i^\top \mathbf{V}'_k \mathbf{u}_i) \boldsymbol{\Theta}^\top \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_i) \boldsymbol{\Theta}. \quad (6.35)$$

A diagonalização simultânea das matrizes $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_i)$ com $i = 1, 2, \dots, N$, no lado direito dessa expressão, implica a diagonalização da matriz $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_k)$ no lado esquerdo, ambas pela mesma matriz ortogonal $\boldsymbol{\Theta}$. Como a expressão obtida é válida para todas as matrizes $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_k)$ com $k = 1, 2, \dots, M$, tem-se a diagonalização simultânea dessas matrizes. A demonstração da recíproca dessa afirmação, no entanto, é mais trabalhosa.

- ◇ Diagonalização de $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_i) \Leftarrow$ Diagonalização de $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_k)$: Essa demonstração é dividida em duas partes, cujas linhas de raciocínio são resumidas a seguir. As demonstrações detalhadas de cada uma das partes são apresentadas na Seção A.3 do Apêndice A.

- (i) Inicia-se supondo que existe Θ ortogonal que diagonaliza simultaneamente as matrizes $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_1), \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_2), \dots, \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_M)$, *i.e.*,

$$\Theta^\top \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_k) \Theta = \Lambda_{\underline{s},4}(\mathbf{V}'_k, \mathbf{U}) \quad (6.36)$$

para $k = 1, 2, \dots, M$, em que $\Lambda_{\underline{s},4}(\mathbf{V}'_k, \mathbf{U}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ denota a matriz diagonal de autovalores de $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_k)$. Com base na interpretação dos espaços imagem e núcleo do operador de quadricovariância da Subseção 6.6.2, mostra-se que a Equação (6.36) implica a equação matricial

$$(\mathbf{\Gamma} \otimes \mathbf{I}_N) \begin{bmatrix} \Theta^\top \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_1) \Theta \\ \Theta^\top \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_2) \Theta \\ \vdots \\ \Theta^\top \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_N) \Theta \end{bmatrix} = \mathbf{\Gamma} \odot \Lambda_{\underline{s},4}(\mathbf{I}_N, \mathbf{U}) \quad (6.37)$$

em que $\mathbf{\Gamma} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ é uma matriz cujas linhas correspondem às coordenadas da projeção ortogonal de cada \mathbf{V}'_k no subespaço vetorial com base ortonormal $\{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N\}$ e os símbolos \otimes e \odot denotam, respectivamente, os produtos matriciais de Kronecker e Khatri–Rao³.

- (ii) A Equação (6.37) pode ser interpretada como N sistemas lineares simultâneos. Por meio das propriedades das matrizes envolvidas e com base nas propriedades algébricas do operador de quadricovariância abordadas na Subseção 6.6.2, mostra-se que (6.37) possui solução única. Com base nas propriedades da matriz pseudoinversa e dos produtos de Kronecker e Khatri–Rao (ZHANG, 2017), obtém-se a solução

$$\begin{bmatrix} \Theta^\top \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_1) \Theta \\ \Theta^\top \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_2) \Theta \\ \vdots \\ \Theta^\top \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_N) \Theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Lambda_{\underline{s},4}(\mathbf{V}_1, \mathbf{U}) \\ \Lambda_{\underline{s},4}(\mathbf{V}_2, \mathbf{U}) \\ \vdots \\ \Lambda_{\underline{s},4}(\mathbf{V}_N, \mathbf{U}) \end{bmatrix} \quad (6.40)$$

que independe da matriz $\mathbf{\Gamma}$. Essa equação corresponde à diagonalização simultânea das matrizes de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_1), \dots, \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_N)$, finalizando a demonstração.

³ Conforme Zhang (2017), o produto de Kronecker das matrizes $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{P \times Q}$ e $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{J \times K}$ é definido como

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{1,1}\mathbf{B} & a_{1,2}\mathbf{B} & \cdots & a_{1,Q}\mathbf{B} \\ a_{2,1}\mathbf{B} & a_{2,2}\mathbf{B} & \cdots & a_{2,Q}\mathbf{B} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{P,1}\mathbf{B} & a_{P,2}\mathbf{B} & \cdots & a_{P,Q}\mathbf{B} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{PJ \times QK}, \quad (6.38)$$

em que $a_{i,j} = [\mathbf{A}]_{i,j}$, e o produto de Khatri–Rao das matrizes $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 \ \cdots \ \mathbf{a}_Q] \in \mathbb{R}^{P \times Q}$ e $\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1 \ \mathbf{b}_2 \ \cdots \ \mathbf{b}_Q] \in \mathbb{R}^{J \times Q}$ é definido como um produto de Kronecker coluna a coluna segundo

$$\mathbf{A} \odot \mathbf{B} = [\mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{b}_1 \ \mathbf{a}_2 \otimes \mathbf{b}_2 \ \cdots \ \mathbf{a}_Q \otimes \mathbf{b}_Q] \in \mathbb{R}^{PJ \times Q}. \quad (6.39)$$

□

O enunciado dessa proposição é inspirado em comentários de Cardoso (1999), que demonstrou como preservar a identificabilidade com uma escolha alternativa de matrizes de pesos (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). Nessa demonstração, porém, recorreu-se a argumentos de otimização aplicados a funções objetivo conhecidas, no contexto de separação cega de fontes, como contrastes⁴. A abordagem conduzida na demonstração da Proposição 6.7, no entanto, é original e consiste em uma contribuição deste trabalho. Em particular, a partir da abordagem tensorial considerada no Capítulo 3, juntamente com as propriedades algébricas do operador de quadricovariância enunciadas na Subseção 6.6.2, notou-se a possibilidade de demonstrar a Proposição 6.7 somente com base nas propriedades algébricas do operador de quadricovariância.

A partir da Proposição 6.7, é direto obter a condição de identificabilidade para o conjunto alternativo de matrizes. Trata-se da proposição apresentada a seguir. As propriedades algébricas dos cumulantes são suficientes para determinar as condições de identificabilidade para a diagonalização simultânea de matrizes de quadricovariância alternativas. Não é necessário, portanto, recorrer a contrastes para determinar essas condições.

Proposição 6.8. *A matriz ortogonal $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \cdots \ \mathbf{u}_N] \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é identificável a partir da diagonalização simultânea de todas as matrizes $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_1), \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_2), \dots, \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_M)$ com $[\mathbf{V}'_1, \mathbf{V}'_2, \dots, \mathbf{V}'_M] \supset [\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N]$ e $\mathbf{V}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \in \mathbb{R}^{N \times N}$ para $i = 1, 2, \dots, N \leq M$ se, e somente se, no máximo uma fonte possuir autocumulante de ordem quatro nulo.*

Demonstração. Com base na Proposição 6.7, garante-se que se escolhido um conjunto de $M \geq N$ matrizes de pesos \mathbf{V}'_k cujo subespaço contenha aquele gerado pelas N autmatrizes \mathbf{V}_i do operador $\mathbf{Q}_{\underline{x}}$, então a diagonalização simultânea das matrizes $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_k)$ equivale à diagonalização simultânea das matrizes $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_i)$. Isso significa que a mesma matriz ortogonal Θ que diagonaliza um conjunto também diagonalizará o outro.

Conforme abordado na Proposição 6.5, a condição mais ampla de identificabilidade da matriz de mistura \mathbf{U} no problema de separação é garantida para a diagonalização simultânea das matrizes $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_i)$ com $i = 1, 2, \dots, N$. Logo, essa condição ampliada também será válida para as matrizes alternativas $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_k)$ com $k = 1, 2, \dots, M$. □

Aqui, é oportuno retornar à Proposição 6.7 e observar que ela é válida para quaisquer valores de autocumulantes de ordem quatro das fontes, inclusive nulos. Toma-se, por exemplo, o caso particular em que $\mathcal{C}_{\underline{x}_i, 4} = 0$ apenas para a i -ésima fonte. Trata-se de um caso de interesse, visto que é contemplado pela condição de identificabilidade da Proposição 6.5. Nessa situação, decorre de (6.27) que $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_i) = \mathbf{0}_{N \times N}$ e, portanto, $\Theta^\top \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}_i) \Theta = \mathbf{0}_{N \times N}$. A demonstração da Proposição 6.7 continuará válida nesse caso, apenas com a ressalva

⁴ No Capítulo 7, trata-se dessas funções e de suas relações com os métodos de separação baseados em cumulantes.

de que uma das matrizes sendo diagonalizada simultaneamente, *i.e.*, $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_i)$, poderá ser ignorada por ser nula. A proposição pode ainda ser adaptada considerando-se esse caso específico. Especificamente, se $\mathcal{C}_{\bar{\mathbf{x}},4} = 0$ apenas para a i -ésima fonte, é possível considerar a sequência de matrizes $\{\mathbf{V}'_1, \mathbf{V}'_2, \dots, \mathbf{V}'_M\}$ com $M \geq N - 1$ tal que

$$[[\mathbf{V}'_1, \mathbf{V}'_2, \dots, \mathbf{V}'_M]] \supset [[\{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N\} \setminus \{\mathbf{V}_i\}]].$$

Nesse caso, mantém-se a validade das Proposições 6.7 e 6.8, considerando-se agora que as novas matrizes de pesos alternativas devem gerar um subespaço de dimensão mínima $N - 1$ e não mais N .

A vantagem ao considerar um conjunto alternativo de matrizes na diagonalização simultânea é que as novas matrizes de pesos podem ser escolhidas de modo a não dependerem explicitamente dos coeficientes da matriz de mistura e, portanto, da estimação de cumulantes conforme comentado ao final da Subseção 6.6.1 (CARDOSO, 1999). Como as automatrizes \mathbf{V}_i são simétricas, Cardoso (1999) sugeriu substituí-las por uma base canônica do subespaço de matrizes simétricas contido em $\mathbb{R}^{N \times N}$. Como a dimensão desse subespaço é igual a $N(N + 1)/2$ e maior do que N para $N > 1$, torna-se necessária a diagonalização simultânea de um conjunto maior de matrizes de quadricovariância alternativas. Por um lado, perde-se em termos de custo computacional; por outro, garante-se segundo Cardoso (1995), Cardoso (1999) melhor desempenho estatístico do estimador. Na literatura, essas técnicas são usualmente denominadas diagonalização conjunta aproximada (AJD, do inglês *approximate joint diagonalization*) (MIETTINEN et al., 2015).

Exemplo 6.4. Considera-se o cenário do Exemplo 6.3 em que $N = 2$ e a variação da matriz ortogonal de mistura, em função do ângulo θ , é dada por (6.30). Agora, consideram-se três matrizes de pesos alternativas \mathbf{V}'_1 , \mathbf{V}'_2 e \mathbf{V}'_3 que compõem a base canônica do espaço das matrizes $\mathbb{R}^{2 \times 2}$ simétricas (GOLUB; VAN LOAN, 2013). Na Figura 19, são mostrados gráficos correspondentes à diferença entre os autovalores das matrizes de quadricovariância tomadas sobre as matrizes de pesos alternativas em dois casos: (a) fontes com distribuições iguais e (b) fontes com autocumulantes de ordem quatro distintos.

Diferentemente do Exemplo 6.3, agora as curvas correspondentes à diferença de autovalores da matriz de quadricovariância possuem uma variação em função do ângulo θ . Além disso, em ambos os casos e para todas as matrizes de quadricovariância consideradas, a diferença de autovalores assume valor nulo para certos ângulos específicos. Porém, analisando-se (a) e (b) individualmente, sempre que há uma ou mais curvas passando por $\lambda_1 - \lambda_2 = 0$ para algum ângulo θ , há pelo menos outra curva com diferença de autovalores não nula para esse mesmo ângulo. Isso equivale a dizer que, em ambos os casos (a) e (b), há sempre pelo menos uma matriz de quadricovariância com autovalores distintos independentemente da matriz ortogonal de mistura $\mathbf{U}(\theta)$ considerada. Logo, ao considerar conjuntamente a diagonalização das três matrizes de quadricovariância alternativas $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}'_1)$, $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}'_2)$ e $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}'_3)$, garante-se a identificabilidade de qualquer uma das matrizes

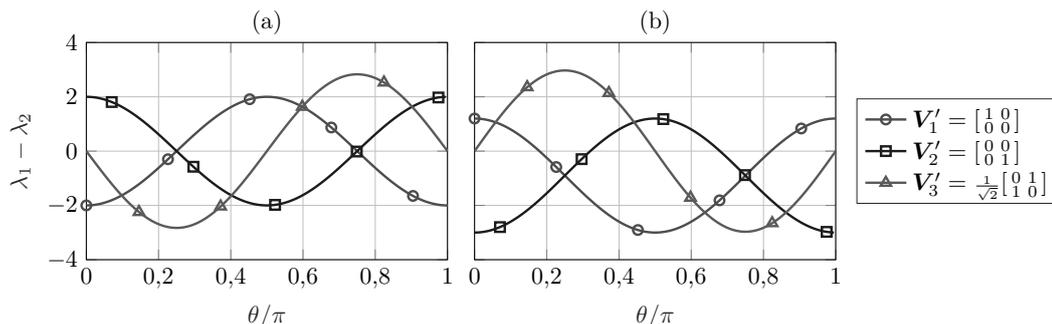


Figura 19 – Diferença entre os autovalores da matriz de quadricovariância para escolha alternativa de matrizes de pesos com fontes independentes tais que (a) $\mathcal{C}_{\tilde{s}_1,4} = \mathcal{C}_{\tilde{s}_2,4} = -2$ e (b) $\mathcal{C}_{\tilde{s}_1,4} = 1,2$ e $\mathcal{C}_{\tilde{s}_2,4} = 3$.

Fonte: autoria própria.

ortogonais de mistura consideradas. Isso ocorre até mesmo para o caso (a) de fontes com mesmas estatísticas. Trata-se de um exemplo da validade da Proposição 6.8, visto que a base canônica das matrizes $\mathbb{R}^{2 \times 2}$ simétricas contém, necessariamente, o espaço imagem do operador de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\underline{x}}$. \triangleleft

A Proposição 6.8 e o Exemplo 6.4, correspondentes à questão da completude da representação matricial no contexto de separação cega de fontes, podem ser relacionados com a Seção 3.4.5, em que a questão da completude foi abordada de maneira mais geral. Lá, notou-se que apenas uma matriz de quadricovariância não necessariamente permite representar toda a informação estatística de ordem quatro contemplada pelo tensor de cumulantes. Aqui, verifica-se como a questão da completude se manifesta no problema específico de separação cega de fontes da Figura 10-(b). Em particular, tanto a Proposição 6.5 quanto a Proposição 6.8 garantem a condição de identificabilidade mais ampla possível que se pode ter com o uso de cumulantes de ordem quatro, observadas as limitações do teorema de separabilidade abordadas no Capítulo 5. Ao mesmo passo, em ambas as proposições são consideradas representações matriciais completas para o tensor de cumulantes. Particularmente, essas representações correspondem a matrizes de quadricovariância ora tomadas sobre as automatrizes do operador de quadricovariância, ora sobre as matrizes de pesos alternativas que geram o espaço imagem desse operador.

6.7 Conclusões

Nesse capítulo, abordaram-se métodos de separação cega de fontes baseados em propriedades algébricas de cumulantes e suas representações matriciais. Embora se trate de um assunto já considerado de variadas formas na literatura de separação de fontes (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; DE LATHAUWER, 1997; CARDOSO, 1999), ele reserva questões teóricas e interpretações a serem ainda exploradas. De fato, tanto extensões — *e.g.*, para dados tensoriais ou misturas convolutivas — quanto particularizações dos métodos considerados nesse capítulo continuam atraindo interesse científico; veja, por

exemplo, os trabalhos de Miettinen et al. (2013), Miettinen et al. (2015), Maurandi e Moreau (2017), Van Eeghem, Sørensen e De Lathauwer (2017), Virta et al. (2018), Van Eeghem et al. (2018). Em contrapartida, os conceitos teóricos necessários à compreensão dos métodos algébricos de separação podem parecer complicados e pouco acessíveis, o que pode desencorajar a sua utilização. Acredita-se que a exposição feita nesse capítulo, bem como as interpretações e relações apresentadas, facilitem a aplicação desses métodos a problemas de estimação cega que eventualmente ainda não tenham sido abordados dessa forma.

Na Seção 6.1, apresentou-se a etapa inicial clássica para métodos de separação baseados em propriedades algébricas de cumulantes, conhecida como pré-processamento. Destaque foi dado ao passo de branqueamento, considerando-se nas Seções 6.2 e 6.3, respectivamente, sua influência no procedimento posterior de separação e sua interpretação sob o ponto de vista da separabilidade das fontes. Conforme o esquema mostrado na Figura 10-(b), o problema de separação após o branqueamento é reduzido à determinação de uma matriz de mistura ortogonal. Na prática, o branqueamento das misturas é feito utilizando-se procedimentos muito similares àqueles empregados em técnicas de análise de componentes principais (PCA). No Apêndice B, abordam-se os fundamentos de PCA do ponto de vista clássico conforme Jolliffe (2002).

A partir da abordagem feita nas Seções 6.2 e 6.3, foi possível evidenciar algebricamente que o uso de estatísticas de ordem dois não é suficiente para obter a separação adequada das fontes no problema esquematizado na Figura 7. Isso corrobora as condições de separabilidade por imposição de independência consideradas no Capítulo 5. Ressalta-se que a separação a partir da identificação cega da matriz ortogonal de mistura é equivalente à imposição de independência à saída do sistema separador apenas se as condições de separabilidade do Teorema 5.4 forem satisfeitas. Especificamente, no máximo uma fonte pode ser gaussiana. Embora também reste uma transformação ortogonal para separar duas ou mais fontes gaussianas, em conformidade com a Seção 6.2, tal separação não pode ser feita de maneira cega — *i.e.*, pela imposição de independência das fontes estimadas (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; COMON, 1994).

Na Seção 6.4, inspirando-se em Cardoso e Souloumiac (1993), Cardoso (1999), abordou-se como propriedades algébricas de cumulantes de ordem quatro podem ser utilizadas para a realização da separação de fontes após o pré-processamento. Em particular, considerou-se a matriz de quadricovariância, definida genericamente no Capítulo 3, como representação conveniente para os cumulantes de ordem quatro das misturas branqueadas. Em seguida, a diagonalização dessa matriz foi relacionada à identificação cega da matriz de mistura ortogonal. Isso só foi possível graças às Proposições 3.7 e 6.1, referentes à fatoração da matriz de quadricovariância e à unicidade de sua decomposição em autovetores e autovalores.

Na Seção 6.5, abordaram-se questões referentes à identificabilidade da matriz ortogonal

de mistura. Por meio dos exemplos numéricos apresentados, foi possível explicitar a relevância que a escolha da matriz de pesos tem na identificabilidade cega da matriz ortogonal de mistura. Trata-se de uma questão relevante do ponto de vista de separação (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; CARDOSO, 1999), relacionada à unicidade da decomposição em autovalores e autovetores da matriz de quadricovariância das misturas branqueadas.

Na Seção 6.6, atenção especial foi dada à completude da representação matricial utilizada na descrição das estatísticas de ordem quatro das misturas branqueadas. Em particular, interpretou-se a identificabilidade da matriz ortogonal de mistura como uma decorrência, na aplicação particular de separação cega, da completude da representação matricial dos cumulantes de ordem quatro abordada inicialmente no Capítulo 3. Com base no trabalho de Cardoso (1999), inicialmente mostrou-se como as condições de identificabilidade podem ser ampliadas a partir da diagonalização simultânea das automatrizes do operador de quadricovariância. Posteriormente, após uma exposição algébrica sobre espaços vetoriais relacionados a esse operador, foi possível demonstrar com base na Proposição 6.7 que outras matrizes de pesos podem ser consideradas para compor um conjunto de matrizes de quadricovariância completo, *i.e.*, que mantenha as condições mais amplas de identificabilidade. A possibilidade de realizar essa escolha alternativa possui importância do ponto de vista prático, principalmente a fim de garantir a equivariância do método de separação considerado (CARDOSO, 1995; CARDOSO, 1999). No Apêndice C, abordam-se técnicas numéricas de diagonalização úteis para a implementação dos métodos de separação considerados nesse capítulo.

As Subseções 6.6.2 e 6.6.3, e em particular a Proposição 6.7 e sua demonstração, são contribuições originais desse trabalho. Trata-se de uma formalização e, até certo ponto, extensão dos comentários feitos por Cardoso e Souloumiac (1993), Cardoso (1999) sobre a escolha de matrizes de pesos alternativas que garantam a completude da representação matricial. Em vez de uma demonstração baseada apenas em propriedades algébricas de cumulantes, conforme feito na Proposição 6.7, Cardoso e Souloumiac (1993) recorreram a uma interpretação do ponto de vista de otimização para embasar a consideração de um conjunto alternativo de matrizes de quadricovariância que garanta a condição mais ampla de identificabilidade. No capítulo a seguir, o problema de separação de fontes, até então abordado do ponto de vista algébrico, é formulado do ponto de vista de otimização. Além de essa formulação permitir a obtenção de outros tipos de técnicas de separação, ela permite complementar a interpretação dos métodos algébricos considerados nesse capítulo.

7 CRITÉRIOS DE SEPARAÇÃO BASEADOS EM INDEPENDÊNCIA

No Capítulo 6, abordou-se como as propriedades algébricas de cumulantes podem ser aplicadas à resolução do problema de separação cega de fontes (BSS) esquematizado na Figura 7. Em particular, considerou-se como e sob que condições a diagonalização da matriz de quadricovariância permite, após o branqueamento das misturas, determinar algebricamente os coeficientes do sistema separador que recupera adequadamente as fontes. Segundo as condições de separabilidade consideradas no Capítulo 5, essa abordagem pode ser interpretada como a imposição de independência à saída do sistema separador. Essa imposição, entretanto, aparece até então de maneira implícita, dada a natureza algébrica dos métodos de separação baseados em propriedades de cumulantes.

Uma outra maneira de obter soluções para o problema de BSS, especialmente útil quando não se lida diretamente com propriedades algébricas de cumulantes, consiste em formulá-lo sob um ponto de vista de otimização. Na literatura de separação cega de fontes baseada em imposição de independência, isso é usualmente feito da seguinte forma: (i) estabelece-se uma maneira consistente de quantificar a independência das fontes estimadas e (ii) traça-se uma estratégia para a maximização dessa independência com base na quantidade indicadora. Além de essa abordagem mais geral permitir a obtenção de uma grande variedade de métodos de separação, ela permite relacionar esses métodos por meio dos critérios de separação que empregam. Adicionalmente, os métodos algébricos abordados no Capítulo 6 também podem ser colocados sob uma roupagem de otimização, proporcionando uma maneira alternativa de interpretá-los e relacioná-los com outras estratégias de separação. Neste capítulo, abordam-se critérios clássicos de separação por independência e suas relações, a fim de complementar, sob um ponto de vista de otimização, a interpretação dos métodos considerados no Capítulo 6.

Na Seção 7.1, apresentam-se definições usuais das funções objetivo classicamente empregadas na separação, conhecidas como contrastes. Consideram-se, particularmente, definições de contrastes baseados em independência. Na Seção 7.2, abordam-se os principais contrastes entrópicos baseados em independência e, na Seção 7.3, apresentam-se maneiras aproximadas úteis de representar esses contrastes. Na Seção 7.4, abordam-se contrastes aproximados provenientes dos métodos algébricos de separação abordados no Capítulo 6. Na Seção 7.5, apresenta-se a conclusão do capítulo.

7.1 Definições de contrastes baseados em independência

Na Subseção 7.1.1, apresentam-se definições preliminares à abordagem do problema de separação de fontes sob o ponto de vista de otimização. Nessa subseção, aborda-se uma primeira definição de contraste conforme Comon (1994). Outras definições de contraste também podem ser estabelecidas, desde que consistentes no contexto em que são

consideradas (CARDOSO, 1998; COMON; JUTTEN, 2010). Nas Subseções 7.1.2 e 7.1.3, abordam-se dois casos usuais de definições alternativas. Na Subseção 7.1.4, apresenta-se um exemplo a fim de enfatizar os principais conceitos abordados nesta seção.

7.1.1 Definições preliminares

Genericamente, as funções contraste, conhecidas no contexto de separação de fontes também como contrastes discriminantes ou apenas contrastes, são funções cuja otimização leva à adequada separação cega das fontes à saída do sistema separador (COMON, 1992; COMON, 1994; CARDOSO, 1998; COMON; JUTTEN, 2010). O nome “contraste” se deve ao fato de que a otimização dessas funções deve permitir distinguir as fontes não observadas das misturas observadas. No contexto de separação por imposição de independência estatística, é usual denotar um contraste tomado sobre um vetor aleatório qualquer \mathbf{a} por um escalar

$$\phi(f_{\mathbf{a}}),$$

em que $f_{\mathbf{a}}$ corresponde à função densidade de probabilidade de \mathbf{a} . Sendo assim, o contraste é definido como uma função da distribuição da grandeza aleatória considerada. Isso se deve ao fato de que, visando à separação conforme as condições abordadas no Capítulo 5, o contraste deve quantificar a independência mútua dos elementos de \mathbf{a} . Por sua vez, a independência é contemplada na distribuição do vetor aleatório e não no vetor aleatório em si. Uma notação conveniente e alternativa para levar esse fato em conta, usualmente considerada na literatura (CARDOSO, 1999), é dada por

$$\phi[\mathbf{a}],$$

em que os colchetes englobando o vetor aleatório \mathbf{a} são utilizados para sinalizar a dependência do contraste com a distribuição de probabilidade desse vetor.

Retoma-se o problema de separação abordado no início do Capítulo 6 e esquematizado na Figura 7. Nesse problema, deseja-se obter fontes estimadas \mathbf{y} que correspondam às fontes independentes \mathbf{s} a partir apenas da observação das misturas \mathbf{x} . Recordando-se das ambiguidades inerentes à separação cega de fontes abordadas no Teorema 5.4, entende-se por separação adequada a recuperação de uma cópia das fontes conforme a seguinte definição (CARDOSO, 1998).

Definição 7.1. Uma cópia do vetor de fontes \mathbf{s} de N elementos é um vetor $\mathbf{y}_{\text{opt.}}$, também de N elementos, tal que $\mathbf{y}_{\text{opt.}} = \mathbf{A}\mathbf{P}\mathbf{s}$, em que $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é matriz diagonal inversível e $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é matriz de permutação. \triangleleft

Recorda-se que, na Figura 7, a relação global entre fontes estimadas e fontes independentes é dada por

$$\mathbf{y} = \mathbf{M}\mathbf{s}, \tag{7.1}$$

em que $\mathbf{M} = \mathbf{W}\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é a matriz de resposta combinada misturador-separador, $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é a matriz de mistura e $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é a matriz de separação. Com o objetivo de quantificar a proximidade do vetor de fontes estimadas \mathbf{y} com a cópia almejada \mathbf{y}_{opt} , usualmente os contrastes são tomados sobre \mathbf{y} , *i.e.*,

$$\phi[\mathbf{y}].$$

De acordo com a relação entre vetores aleatórios (7.1), a distribuição das fontes estimadas depende tanto da matriz de resposta combinada \mathbf{M} quanto da distribuição do vetor de fontes \mathbf{s} . Em contrapartida, para estabelecer a separação adequada das fontes, apenas é possível variar os coeficientes do sistema separador dispostos em \mathbf{W} . Por sua vez, esses coeficientes têm influência direta sobre a matriz de resposta combinada \mathbf{M} e, conseqüentemente, sobre a distribuição de \mathbf{y} . Tendo isso em vista, a abordagem de otimização de contraste no problema considerado consiste em, por meio da variação de \mathbf{W} , atingir um ponto extremo de $\phi[\mathbf{y}]$ que corresponda à recuperação de uma cópia do vetor de fontes conforme a Definição 7.1.

Por convenção e conforme Cardoso (1999), considera-se nesse texto que a minimização do contraste $\phi[\mathbf{y}]$ deve implicar a recuperação de uma cópia do vetor de fontes. No contexto aqui abordado, portanto, o problema de separação de fontes por imposição de independência via minimização de contrastes pode ser colocado na seguinte forma:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{minimize} \\ \mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N \times N} \end{array}} \phi[\mathbf{y}]. \quad (7.2)$$

Por se buscar a sua minimização, o contraste pode ser interpretado como uma função custo no contexto de otimização. Em algumas referências, como os trabalhos de Comon (1992), Comon e Jutten (2010), define-se que a maximização do contraste implica a recuperação de uma cópia das fontes. Trata-se, no entanto, apenas de uma questão de convenção sobre o sinal da função contraste e que não tem implicações significativas no procedimento de otimização em si. A seguir, apresenta-se uma definição matemática genérica formal do que caracteriza, de fato, um contraste cuja minimização recupera adequadamente as fontes no contexto de imposição por independência. Essa definição foi proposta, inicialmente, por Comon (1994); por conveniência, considera-se nessa definição o contraste atuando sobre um vetor aleatório genérico denotado por \mathbf{a} .

Definição 7.2. Seja uma função $\phi : \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}$, em que \mathcal{P} denota um conjunto de funções distribuição de probabilidade. A função ϕ é um contraste, se, e somente se,

- (i) ϕ for invariante à permutação, *i.e.*,

$$\phi[\mathbf{P}\mathbf{a}] = \phi[\mathbf{a}]$$

para todo vetor aleatório \mathbf{a} de N elementos e qualquer matriz de permutação $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N \times N}$;

(ii) ϕ for invariante à mudança de escala, *i.e.*,

$$\phi[\mathbf{A}\mathbf{a}] = \phi[\mathbf{a}]$$

para todo vetor aleatório \mathbf{a} de N elementos e qualquer matriz diagonal inversível $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$;

(iii) se os N elementos de um vetor aleatório qualquer \mathbf{a} forem variáveis aleatórias mutuamente independentes, então

$$\phi[\mathbf{a}] \leq \phi[\mathbf{A}\mathbf{a}]$$

para toda matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ inversível; e

(iv) se os N elementos de um vetor aleatório qualquer \mathbf{a} forem variáveis aleatórias mutuamente independentes e existir $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ tal que $\phi[\mathbf{A}\mathbf{a}] = \phi[\mathbf{a}]$, então

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{P}$$

com $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ matriz diagonal inversível e $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ matriz de permutação.

◁

As condições (i) e (ii) da Definição 7.2 levam em conta que permutações ou mudanças de escala sobre o vetor aleatório não devem ter efeito sobre o valor do contraste — visto que, na resolução do problema cego, existem ambiguidades inerentes de escala e de permutação. Em contrapartida, a condição (iii) vem da consideração que o valor do contraste não pode diminuir se as variáveis independentes, interpretadas aqui como as fontes, forem misturadas. De fato, a partir da relação $\mathbf{y} = \mathbf{M}\mathbf{s}$ e da Definição 7.2-(iii), tem-se no domínio da resposta combinada que

$$\phi[\mathbf{y}] = \phi[\mathbf{M}\mathbf{s}] \geq \phi[\mathbf{s}],$$

pois os elementos de \mathbf{s} são mutuamente independentes. Em outras palavras, o contraste aplicado às fontes $\phi[\mathbf{s}]$ não pode ser maior do que o contraste tomado sobre as fontes estimadas $\phi[\mathbf{y}]$.

Apesar disso, dependendo da matriz de resposta combinada \mathbf{M} , pode-se eventualmente ter $\phi[\mathbf{y}] = \phi[\mathbf{s}]$ segundo a condição (iii). Por isso, na condição (iv), estabelece-se que o contraste assume seu valor mínimo somente se uma cópia do vetor de fontes independentes é recuperada. Nesse sentido, garante-se que quaisquer pontos de mínimo do contraste ocorrem, obrigatoriamente, quando há a adequada separação das fontes. Adicionalmente, em conjunto com as condições (i) e (ii), segundo a condição (iv) o valor do contraste é mínimo se tomado sobre qualquer cópia de \mathbf{s} . De fato, se a matriz de resposta combinada possuir a forma $\mathbf{M} = \mathbf{A}\mathbf{P}$, então $\mathbf{y} = \mathbf{y}_{\text{opt.}}$ conforme a Definição 7.1 e

$$\phi[\mathbf{y}_{\text{opt.}}] = \phi[\mathbf{A}\mathbf{P}\mathbf{s}] = \phi[\mathbf{s}].$$

Portanto, segundo o conjunto de condições da Definição 7.2, pode-se resumidamente afirmar que o contraste assume valor mínimo se, e somente se, for tomado sobre uma cópia do vetor de fontes.

A Definição 7.2 é feita sob medida para contrastes a serem utilizados no problema da Figura 7, e possui uma relação próxima com Teorema 5.4 de separabilidade. Segundo esse teorema, se no máximo uma fonte for gaussiana e nenhuma for constante, a condição $\mathbf{M} = \mathbf{A}\mathbf{P}$ equivale à condição de independência mútua, ou em pares, das fontes estimadas. Logo, para no máximo uma fonte gaussiana e nenhuma fonte constante, o contraste é mínimo se, e somente se, a independência mútua, ou em pares, for recuperada à saída do sistema separador. Portanto, sob as condições advindas do Teorema 5.4, além de indicadores da qualidade de separação, os contrastes podem ser compreendidos como quantificadores da independência de \mathbf{y} . Essa interpretação de contrastes, sob a luz do teorema de separabilidade, inspira a proposição de funções contraste que permitam quantificar, de forma direta ou indireta, a independência estatística dos elementos de um vetor aleatório.

7.1.2 Contrastes ortogonais

Conforme considerado na Seção 6.1, o problema de separação de fontes pode ser abordado considerando-se uma etapa prévia de pré-processamento das misturas. Nessa etapa, é usualmente feita a imposição de não correlação espacial com normalização de variância sobre as misturas, procedimento esse denominado branqueamento. As funções custo particulares que consideram a separação feita a partir de misturas branqueadas são denominadas contrastes ortogonais conforme a definição a seguir.

Definição 7.3. A função ϕ° é um contraste ortogonal se, quando aplicada a um vetor aleatório branqueado qualquer, satisfizer as propriedades de contraste da Definição 7.2. \triangleleft

Recorda-se que, conforme abordado na Seção 6.2, o branqueamento das misturas permite considerar o problema de separação conforme mostrado na Figura 10-(b), em que deseja-se separar as fontes aplicando-se ao vetor de misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$ uma transformação ortogonal de separação $\widetilde{\mathbf{W}}$. Do ponto de vista de otimização, essa transformação é determinada variando-se $\widetilde{\mathbf{W}}$ ortogonal e verificando-se se o contraste aplicado ao vetor de fontes estimadas

$$\mathbf{y} = \widetilde{\mathbf{W}}\tilde{\mathbf{x}} \quad (7.3)$$

atinge um mínimo. Como $\widetilde{\mathbf{W}}$ é ortogonal, *i.e.* $\widetilde{\mathbf{W}}^{-1} = \widetilde{\mathbf{W}}^\top$, então \mathbf{y} também será um vetor aleatório branqueado. Em conformidade com a Definição 7.3, é sobre esse vetor branqueado que se toma o contraste ortogonal. Sendo assim, o problema de otimização de (7.2), quando se aplica a matriz $\widetilde{\mathbf{W}}$ às misturas branqueadas conforme (7.3), pode ser

colocado na forma particular

$$\begin{array}{l} \underset{\substack{\widetilde{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}^{N \times N} \\ \widetilde{\mathbf{W}}^{-1} = \widetilde{\mathbf{W}}^T}}{\text{minimize}} \quad \phi^\circ[\mathbf{y}] \end{array} \quad (7.4)$$

com $\mathbf{y} = \widetilde{\mathbf{W}}\tilde{\mathbf{x}}$. Ainda é possível exprimir o problema de (7.4) da seguinte forma equivalente

$$\boxed{\begin{array}{l} \underset{\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N \times N}}{\text{minimize}} \quad \phi^\circ[\mathbf{y}] \\ \text{sujeito a} \quad \text{E}[\mathbf{y}\mathbf{y}^T] = \mathbf{I}_N, \end{array}} \quad (7.5)$$

em que aqui retorna-se à configuração esquematizada na Figura 7 com $\mathbf{y} = \mathbf{W}\mathbf{x}$. Essa forma alternativa é válida visto que, com base em (7.3), verifica-se que manter a matriz de separação $\widetilde{\mathbf{W}}$ ortogonal equivale a uma restrição de branqueamento do vetor aleatório de fontes estimadas \mathbf{y} .

Conforme abordado nas Seções 6.2 e 6.3, o branqueamento já faz uma parte do processo de separação. A parte restante, mas não menos importante, é representada pelos contrastes ortogonais. Em geral, esses contrastes consistem em versões simplificadas de contrastes análogos para o caso geral, *i.e.*, sem levar em conta uma etapa prévia de branqueamento (CARDOSO, 1999).

7.1.3 Contrastes não simétricos

Um exemplo importante de generalização da definição usual de contraste é o de contraste não simétrico definido a seguir (COMON; JUTTEN, 2010).

Definição 7.4. Uma função é denominada contraste não simétrico se não for invariante à permutação, mas satisfizer as demais condições de contraste da Definição 7.2. \triangleleft

O conceito de contraste não simétrico é mais abrangente que o conceito de contraste usual da Definição 7.2. Os contrastes não simétricos podem ser úteis, por exemplo, em problemas de separação em que alguma informação *a priori* sobre a distribuição das fontes possa ser considerada no modelo de mistura (CARDOSO, 2000). Dispondo-se dessa informação adicional, o contraste não simétrico pode ser utilizado para traduzir a necessidade de não apenas recuperar uma cópia do vetor de fontes, mas também de recuperar as fontes na ordem correta. Em consequência, por não satisfazerem a condição de invariância à permutação, contrastes não simétricos não necessariamente assumem valor mínimo quando tomados sobre permutações do vetor de fontes (eventualmente, com mudanças de escala). Entretanto, de acordo com as condições (iii) e (iv) da Definição 7.2, qualquer mínimo que um contraste não simétrico venha a ter ocorre necessariamente quando ele é tomado sobre uma cópia do vetor de fontes. Em síntese, o contraste não simétrico assume valor mínimo apenas sobre cópias do vetor de fontes, mas não necessariamente sobre todas as cópias possíveis.

7.1.4 Exemplos simples de contrastes

A fim de ilustrar e interpretar o comportamento qualitativo de algumas funções contraste aplicadas a um problema simplificado de separação de fontes, apresenta-se o seguinte exemplo inspirado em Cardoso (1998).

Exemplo 7.1. Seja o problema de separação de fontes com pré-processamento considerado na Figura 10-(b) particularizado para $N = 2$. A partir da Equação (6.18), recorda-se que as fontes estimadas \mathbf{y} são relacionadas às fontes independentes e normalizadas $\tilde{\mathbf{s}}$, de média nula, segundo

$$\mathbf{y} = \widetilde{\mathbf{M}}\tilde{\mathbf{s}}, \quad (7.6)$$

em que define-se a matriz de resposta combinada como

$$\widetilde{\mathbf{M}} = \widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{U} \quad (7.7)$$

sendo $\widetilde{\mathbf{W}}$ a matriz ortogonal de separação e \mathbf{U} a matriz ortogonal de mistura. Por ser um produto de matrizes ortogonais, a matriz $\widetilde{\mathbf{M}}$ também é ortogonal (HORN; JOHNSON, 2013). Considera-se que a matriz de separação $\widetilde{\mathbf{W}}$ é variada, para \mathbf{U} mantida constante, de modo que globalmente tem-se

$$\widetilde{\mathbf{M}}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

para $\theta \in [0, \pi]$. Neste exemplo, deseja-se verificar o comportamento de algumas funções candidatas a contrastes ortogonais em função do ângulo θ com que as fontes são recuperadas rotacionadas. Em todos os casos abordados a seguir, são consideradas as mesmas quatro funções candidatas a contrastes ortogonais ϕ_1^o , ϕ_2^o , ϕ_3^o e ϕ_4^o para três diferentes distribuições conjuntas das fontes independentes $\tilde{\mathbf{s}}$ consideradas a seguir.

- ◇ *Ambas as fontes com distribuição arco seno.* Na Figura 20-(a), todas as funções candidatas possuem mínimos em $\theta = 0, \pi/2$ e π . Esses ângulos correspondem a todas as situações, com $\theta \in [0, \pi]$, em que \mathbf{y} é uma cópia de $\tilde{\mathbf{s}}$ — como se nota a partir dos diagramas de dispersão de \mathbf{y} das Figuras 20-(b), (d) e (f). Sendo assim, todas as funções candidatas são contrastes ortogonais nessa situação. Além disso, o comportamento de diferentes contrastes em torno dos pontos de mínimo é diferente — alguns possuem variações mais bruscas, enquanto outros possuem variações mais suaves. Finalmente, as direções de pior separação ou maior dependência entre y_1 e y_2 se dão para os valores máximos dos contrastes, que ocorrem para ângulos $\theta = \pi/4$ e $3\pi/4$, cujos diagramas de dispersão podem ser observados respectivamente nas Figuras 20-(c) e (e).
- ◇ *Uma fonte com distribuição arco seno e a outra fonte gaussiana.* Novamente, conforme a Figura 21-(a), as funções ϕ_1^o , ϕ_2^o e ϕ_3^o são contrastes ortogonais válidos nesse

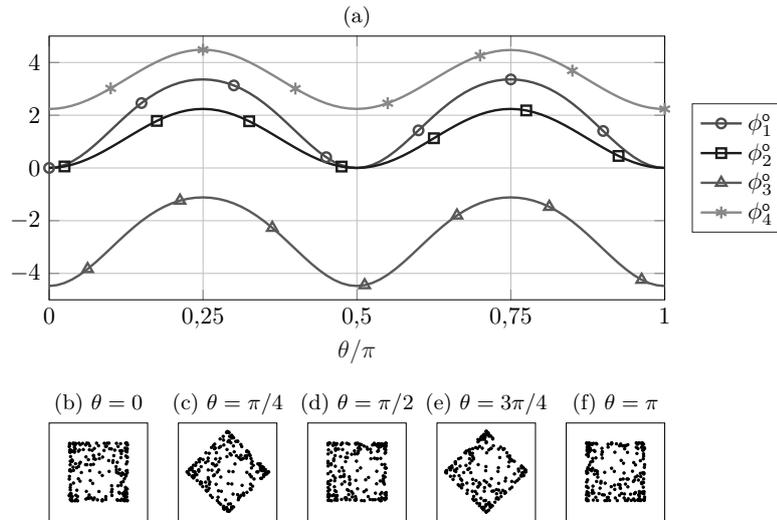


Figura 20 – Duas fontes independentes, ambas com distribuição arco seno: (a) Curvas dos contrastes ϕ_1^o , ϕ_2^o , ϕ_3^o e ϕ_4^o , (b)–(f) diagramas de dispersão de \mathbf{y} para diferentes ângulos de rotação e 1000 realizações independentes.

Fonte: autoria própria.

caso, pois possuem mínimos se, e somente se, for recuperada uma cópia das fontes. Entretanto, a função ϕ_4^o possui mínimos para $\theta = 0$ e π , mas não para $\theta = \pi/2$. De acordo com as Figuras 21-(b), (d) e (f), as fontes recuperadas para $\theta = 0$ e π possuem ordem distinta daquelas recuperadas para $\theta = \pi/2$. Logo, a invariância à permutação não vale para ϕ_4^o e não se trata de um contraste ortogonal segundo a Definição 7.3. No entanto, conforme a Definição 7.4, ϕ_4^o é um contraste ortogonal não simétrico. Nesse caso, é considerada em ϕ_4^o alguma informação hipotética sobre a distribuição de \mathbf{s} que restringe a recuperação de fontes distintas apenas em uma ordem específica. Em outras palavras, além de considerar a independência dos elementos de \mathbf{y} , esse contraste também leva em conta o “casamento da distribuição”¹ de \mathbf{y} com a distribuição hipotética de \mathbf{s} . No caso prévio da Figura 20, o contraste ϕ_4^o não possui mínimos apenas quando ocorre separação em uma ordem particular pois, mesmo sendo não simétrico, não consegue distinguir as fontes distintas já que ambas possuem a mesma distribuição.

- ◇ *Duas fontes conjuntamente gaussianas.* Conforme a Figura 22-(a), nenhuma das funções candidatas é um contraste ortogonal válido nesse caso, visto que todos são constantes em função de θ . Isso ocorre pois, independentemente do ângulo de rotação, y_1 e y_2 são sempre independentes — como é possível notar a partir da simetria dos diagramas de dispersão dos casos particulares das Figuras 22-(b)–(f). Trata-se de um caso em que as condições de separabilidade do Teorema 5.4 não são satisfeitas: a recuperação de independência à saída do sistema separador não é suficiente para separar fontes conjuntamente gaussianas. Logo, a minimização das

¹ O termo “casamento da distribuição” (do inglês *distribution matching*) refere-se a algum tipo de proximidade entre distribuições de probabilidade (CARDOSO, 1998).

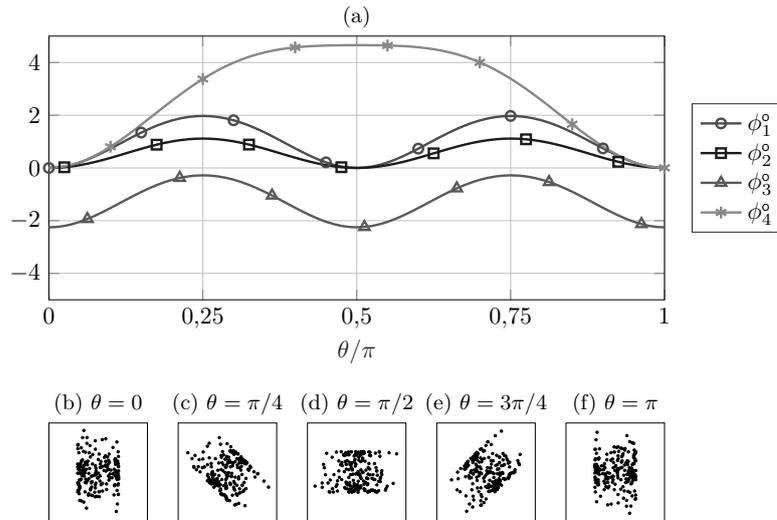


Figura 21 – Duas fontes independentes, uma com distribuição arco seno e a outra com distribuição gaussiana: (a) Curvas dos contrastes ϕ_1^o , ϕ_2^o , ϕ_3^o e ϕ_4^o , (b)–(f) diagramas de dispersão de \mathbf{y} para diferentes ângulos de rotação e 1000 realizações independentes.

Fonte: autoria própria.

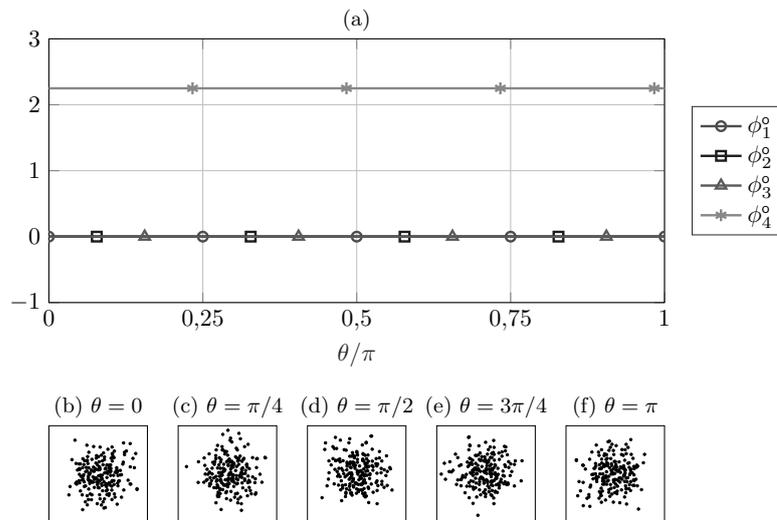


Figura 22 – Duas fontes independentes e conjuntamente gaussianas: (a) Curvas dos contrastes ϕ_1^o , ϕ_2^o , ϕ_3^o e ϕ_4^o , (b)–(f) diagramas de dispersão de \mathbf{y} para diferentes ângulos de rotação e 1000 realizações independentes.

Fonte: autoria própria.

funções indicadoras de independência ϕ_1^o , ϕ_2^o , ϕ_3^o e ϕ_4^o não implica a recuperação de uma cópia das fontes. \triangleleft

No Exemplo 7.1, a fim de discutir apenas algumas propriedades de contrastes, não foram apresentadas as expressões das quatro funções candidatas abordadas. Trata-se, porém, de contrastes bem conhecidos na literatura de separação de fontes e que são abordados nas seções seguintes. A saber, os contrastes ϕ_1^o , ϕ_2^o , ϕ_3^o e ϕ_4^o correspondem aos seguintes contrastes aproximados, respectivamente: máxima informação mútua, JADE, máxima negentropia e máxima verossimilhança (CARDOSO, 1999). A seguir, são apresentadas inicialmente as expressões de contrastes entrópicos — a partir das quais versões baseadas

em cumulantes, como aquelas consideradas no Exemplo 7.1, são obtidas nas Seções 7.3 e 7.4.

7.2 Contrastes entrópicos

Nesta seção, apresentam-se os principais contrastes para separação por imposição de independência que dependem explicitamente da distribuição de probabilidade do vetor aleatório de fontes estimadas \mathbf{y} . Esses contrastes são denominados entrópicos (CARDOSO, 1998) e são especialmente úteis para interpretar e comparar princípios de separação de maneira quantitativa. À luz dos quantificadores de independência tratados no Capítulo 2 e das condições de separabilidade das fontes abordadas no Capítulo 5, evidenciam-se e interpretam-se, a seguir, os princípios fundamentais em que se baseiam os contrastes entrópicos mais conhecidos na literatura.

Inicia-se pelo contraste de máxima verossimilhança na Subseção 7.2.1. Em seguida, abordam-se os contrastes de maximização de entropia diferencial e máxima informação mútua, respectivamente, nas Subseções 7.2.2 e 7.2.3. Na Subseção 7.2.4, apresentam-se os contrastes de máxima negentropia e mínima entropia marginal. Finalmente, na Subseção 7.2.5 apresenta-se um resumo com as principais relações entre os contrastes abordados nesta seção.

7.2.1 Máxima verossimilhança

Considera-se o problema de separação mostrado na Figura 7. Na Figura 23, são mostrados dois modelos estatísticos para as mesmas T observações $\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(T-1)}$ de sorteios independentes do vetor aleatório de misturas \mathbf{x} . Na Figura 23-(a), tem-se o modelo de mistura exato composto por fontes com função densidade de probabilidade verdadeira $f_{\mathbf{z}}$ e matriz de mistura verdadeira \mathbf{H} . Na Figura 23-(b), é mostrado o modelo de mistura hipotético do problema cego, em que as grandezas verdadeiras são desconhecidas. Esse modelo depende da função densidade de probabilidade $f_{\mathbf{z}}$ das fontes hipotéticas² $\check{\mathbf{z}}$ e da matriz de mistura hipotética $\check{\mathbf{H}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Consequentemente, tem-se uma função densidade de probabilidade hipotética $p_{\mathbf{x}}$ para o vetor aleatório de misturas \mathbf{x} , cuja densidade verdadeira é dada por $f_{\mathbf{x}}$.

Com base nos trabalhos de Kay (1993), Cardoso (1997), Cardoso (2000), define-se a função de verossimilhança para o contexto de separação aqui considerado.

² Nesta seção, tendo-se em vista o problema de análise de componentes independentes esquematizado na Figura 7, considera-se que as fontes hipotéticas são mutuamente independentes. No entanto, é importante destacar que a abordagem de máxima verossimilhança é mais geral e pode ser feita sem considerar essa hipótese. Além disso, ela também pode ser aplicada a problemas de separação envolvendo outros tipos de modelos de mistura (COMON; JUTTEN, 2010).

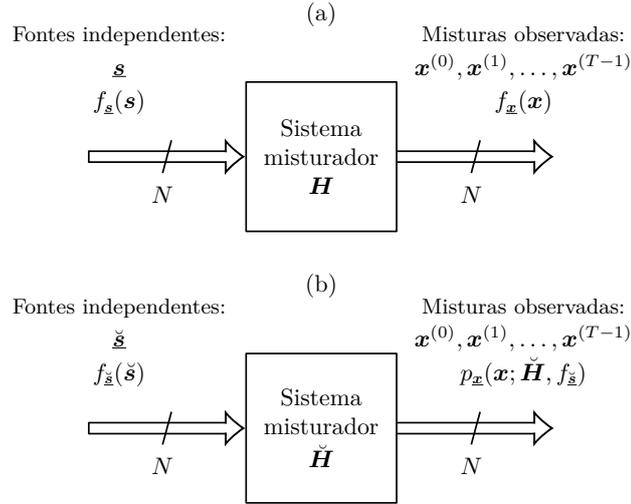


Figura 23 – Esquemas simplificados de (a) modelo exato de mistura e (b) modelo hipotético de mistura. Fonte: autoria própria.

Definição 7.5. Seja o modelo de mistura hipotético mostrado na Figura 23-(b) para T observações $\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(T-1)}$ de sorteios independentes do vetor aleatório de misturas $\underline{\mathbf{x}}$. Sejam vetores aleatórios auxiliares denotados por $\underline{\mathbf{x}}_0, \underline{\mathbf{x}}_1, \dots, \underline{\mathbf{x}}_{T-1}$, mutuamente independentes e com a mesma distribuição de $\underline{\mathbf{x}}$.

A função de verossimilhança $\mathcal{L}(\cdot)$ do modelo hipotético é definida como

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(T-1)}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}) = p_{\underline{\mathbf{x}}_0, \underline{\mathbf{x}}_1, \dots, \underline{\mathbf{x}}_{T-1}}(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(T-1)}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}) \quad (7.8)$$

em que $p_{\underline{\mathbf{x}}_0, \underline{\mathbf{x}}_1, \dots, \underline{\mathbf{x}}_{T-1}}$ é a função densidade de probabilidade conjunta hipotética dos vetores aleatórios $\underline{\mathbf{x}}_0, \underline{\mathbf{x}}_1, \dots, \underline{\mathbf{x}}_{T-1}$, $\check{\mathbf{H}}$ é a matriz hipotética de mistura e $f_{\check{\mathbf{s}}}$ é a função densidade de probabilidade hipotética das fontes.

Como os vetores aleatórios $\underline{\mathbf{x}}_0, \underline{\mathbf{x}}_1, \dots, \underline{\mathbf{x}}_{T-1}$ são mutuamente independentes e possuem a mesma distribuição que $\underline{\mathbf{x}}$ — tanto hipotética, quanto verdadeira —, a função de verossimilhança de (7.8) é usualmente expressa de forma equivalente como

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(T-1)}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}) = \prod_{i=0}^{T-1} p_{\underline{\mathbf{x}}}(\mathbf{x}^{(i)}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}), \quad (7.9)$$

em que $p_{\underline{\mathbf{x}}}$ é a função densidade de probabilidade hipotética do vetor aleatório de misturas $\underline{\mathbf{x}}$, dada por (PAPOULIS; PILLAI, 2002)

$$p_{\underline{\mathbf{x}}}(\mathbf{x}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}) = \frac{1}{|\det \check{\mathbf{H}}|} f_{\check{\mathbf{s}}}(\check{\mathbf{H}}^{-1} \mathbf{x}).$$

Por fim, em análises estatísticas (KAY, 1993), é conveniente considerar a função de verossimilhança tomada em vetores aleatórios, dada por

$$\mathcal{L}(\underline{\mathbf{x}}_0, \underline{\mathbf{x}}_1, \dots, \underline{\mathbf{x}}_{T-1}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}) = \prod_{i=0}^{T-1} p_{\underline{\mathbf{x}}}(\underline{\mathbf{x}}_i; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}), \quad (7.10)$$

que corresponde à função de verossimilhança de (7.9) considerando-se os vetores aleatórios independentes auxiliares $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{T-1}$ no lugar das correspondentes observações dadas por $\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(T-1)}$. \triangleleft

A função de verossimilhança, definida em (7.9), fornece a probabilidade de um conjunto de observações $\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(T-1)}$ (provenientes de sorteios independentes do mesmo vetor de misturas \mathbf{x}) satisfazer o modelo de mistura hipotético da Figura 23-(b). Trata-se da probabilidade de o modelo hipotético ter originado os dados correspondentes às observações das misturas. Em outras palavras, a função de verossimilhança indica a plausibilidade de o modelo hipotético ser o “gerador” dos dados observados. Por isso, faz sentido maximizá-la, para um conjunto de dados fixo, variando-se $\check{\mathbf{H}}$ e $f_{\check{\mathbf{z}}}$. Nesse sentido, a matriz $\check{\mathbf{H}}$ e a densidade $f_{\check{\mathbf{z}}}$ resultantes consistem em estimativas de \mathbf{H} e $f_{\mathbf{z}}$, respectivamente. No caso em que a função de verossimilhança é máxima, essas estimativas são denominadas estimativas de máxima verossimilhança.

Nesse ponto, cabe ressaltar que estimadores de máxima verossimilhança possuem propriedades estatísticas interessantes, como consistência (*i.e.*, as variâncias tendem a zero à medida que o número de observações tende ao infinito) e eficiência assintótica (*i.e.*, a matriz de covariância do erro tende ao limite inferior de Cramér–Rao) (KAY, 1993; HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001). Apesar disso, em aplicações práticas, usualmente não é possível encontrar uma expressão fechada para esses estimadores e eles devem ser obtidos numericamente. Nesse caso, não é possível garantir a convergência para o estimador de máxima verossimilhança a partir de procedimentos de maximização iterativa (*e.g.*, método de Newton–Raphson) (KAY, 1993; CARDOSO, 2000).

A partir de uma estimativa $\check{\mathbf{H}}$ da matriz de mistura, pode-se tentar separar as fontes adotando-se uma matriz de separação $\mathbf{W} = \check{\mathbf{H}}^{-1}$, por exemplo. A qualidade da separação depende da qualidade da estimativa obtida para a matriz de mistura. Existe, então, uma relação entre a estimação por máxima verossimilhança e a resolução do problema de separação. De fato, sob certas condições, é possível interpretar a maximização da função de verossimilhança como sendo equivalente à minimização de uma expressão que, sob certas condições, é um contraste denominado contraste de máxima verossimilhança (CARDOSO, 1997; CARDOSO, 1999). A expressão resultante, introduzida na seguinte proposição, é convenientemente representada em função da divergência de Kullback–Leibler (ou, apenas, divergência K-L).

Proposição 7.1. *O princípio de máxima verossimilhança aplicado ao modelo mostrado na Figura 23-(b), para $T \rightarrow +\infty$ observações, equivale à minimização da função*

$$\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}] = \text{K}[\mathbf{y}|\check{\mathbf{z}}] = \text{E} \left[\log \left(\frac{f_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})}{f_{\check{\mathbf{z}}}(\mathbf{y})} \right) \right] \quad (7.11)$$

em que K denota a divergência K-L segundo a Definição 2.10, \mathbf{y} é o vetor aleatório de fontes estimadas e $\check{\mathbf{z}}$ é o vetor aleatório de fontes hipotéticas, cujas funções densidade de

probabilidade são denotadas por $f_{\mathbf{y}}$ e $f_{\check{\mathbf{s}}}$, respectivamente. A minimização é feita variando-se tanto a matriz de mistura hipotética $\check{\mathbf{H}}$, tal que $\mathbf{y} = \mathbf{W}\mathbf{x}$ com $\mathbf{W} = \check{\mathbf{H}}^{-1}$, quanto a função densidade de probabilidade hipotética $f_{\check{\mathbf{s}}}$.

Demonstração. Veja a Seção A.4 do Apêndice A.

Uma dificuldade prática em relação à função apresentada em (7.11) é que a sua minimização deve ser feita variando-se tanto um parâmetro matricial $\check{\mathbf{H}}$ quanto uma grandeza paramétrica de dimensão infinita $f_{\check{\mathbf{s}}}$ — a qual depende, em geral, de uma quantidade infinita de parâmetros (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001). No contexto de separação, a densidade $f_{\check{\mathbf{s}}}$ é geralmente considerada um parâmetro de incômodo (do inglês *nuisance*) de dimensão infinita — *i.e.*, não se está interessado propriamente em sua estimação, mas apenas em estimar $\check{\mathbf{H}}$ que propicie a separação. Mesmo assim, em problemas gerais de inferência estatística, os parâmetros de incômodo devem ser estimados a fim de estimar os parâmetros de interesse de maneira consistente (CARDOSO, 2000). Entretanto, no caso específico de separação, é possível mostrar que a estimação não paramétrica de $f_{\check{\mathbf{s}}}$ pode ser evitada. Isso pode ser feito assumindo-se uma densidade hipotética fixa das fontes independentes (a partir de algum conhecimento *a priori* incluído no modelo ou de um “chute inicial”), ou então parametrizando-se uma família de densidades hipotéticas com base em um conjunto limitado de parâmetros (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001).

Por simplicidade, considera-se que a minimização da função $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ é feita variando-se apenas a matriz hipotética de mistura $\check{\mathbf{H}}$ e mantendo-se fixa a função densidade de probabilidade hipotética $f_{\check{\mathbf{s}}}$ das fontes independentes — como é usual em separação cega de fontes (CARDOSO, 1998; HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001). Assim, a partir de (7.11), obtém-se uma outra interpretação para o princípio de máxima verossimilhança aplicado à separação cega de fontes: encontrar $\check{\mathbf{H}}$ tal que a distribuição do vetor aleatório $\mathbf{y} = \check{\mathbf{H}}^{-1}\mathbf{x}$ seja o mais “próxima” possível, no sentido da minimização da divergência K-L, da distribuição das fontes hipotéticas $\check{\mathbf{s}}$ (CARDOSO, 1998).

Resta saber se esse procedimento garante sempre a separação adequada das fontes sob as condições do Teorema 5.4 de separabilidade apresentado no Capítulo 5. Inicialmente, de acordo com a Proposição 2.3-(i), recorda-se que a divergência K-L é não negativa, de modo que

$$\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}] = \text{K}[\mathbf{y}|\check{\mathbf{s}}] \geq 0.$$

De acordo com a Proposição 2.3-(ii), tem-se que a igualdade é satisfeita se, e somente se, a distribuição de \mathbf{y} for igual à distribuição de $\check{\mathbf{s}}$, exceto eventualmente em um conjunto de pontos com medida nula. Consideram-se os casos de distribuições de fontes elencados a seguir:

- ◇ $f_{\underline{\mathbf{s}}} = f_{\underline{\mathbf{s}}}$: No caso em que a função densidade de probabilidade hipotética das fontes é igual à do modelo exato, tem-se que

$$\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}] = K[\mathbf{y}|\underline{\mathbf{s}}]$$

de modo que quando o mínimo de $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ é atingido, *i.e.*, $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}] = 0$, tem-se que as distribuições de \mathbf{y} e de $\underline{\mathbf{s}}$ se igualam. Portanto, a independência é recuperada à saída do sistema separador e as fontes são adequadamente separadas sob as condições do Teorema 5.4. As fontes são separadas em uma ordem particular e com fatores de escala específicos dados por $f_{\underline{\mathbf{s}}}$. Nesse caso, $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ poderia ser denominado um contraste generalizado, para o qual não valem as condições de invariância à permutação e à mudança de escala da Definição 7.2.

- ◇ $f_{\underline{\mathbf{s}}} \neq f_{\underline{\mathbf{s}}}$: Nesse caso, a função $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ não deve possuir mínimo valendo zero, pois isso implicaria uma contradição de acordo com o Teorema 5.4: a recuperação das fontes independentes satisfazendo o modelo de distribuição hipotética no lugar do modelo exato. Nesse caso, $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ deve possuir mínimos em que a distribuição de \mathbf{y} mais se aproxime da distribuição de $\underline{\mathbf{s}}$, mas sem haver a igualdade das distribuições. No caso considerado, pode-se mostrar que quando $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ atinge um mínimo não nulo para alguma matriz $\check{\mathbf{H}}$, esse ponto extremo pode ou não corresponder à recuperação de uma cópia do vetor de fontes via $\mathbf{y} = \check{\mathbf{H}}^{-1}\underline{\mathbf{x}}$. Isso depende, essencialmente, da distribuição hipotética fixa adotada para as fontes no modelo (CARDOSO, 1998; CARDOSO, 2000).

Nos trabalhos de Cardoso (1998), Cardoso (2000), Hyvärinen, Karhunen e Oja (2001), são apresentadas condições quantitativas sobre a função densidade de probabilidade hipotética $f_{\underline{\mathbf{s}}}$ adotada para as fontes de modo que os mínimos de $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$, na vizinhança dos pontos de separação, correspondam à recuperação de cópias das fontes. Resumidamente, ressaltam-se as seguintes observações qualitativas sobre essas condições, que estão demonstradas nos trabalhos de Cardoso (2000), Hyvärinen, Karhunen e Oja (2001):

- ◇ Pequenos erros de especificação na densidade hipotética $f_{\underline{\mathbf{s}}}$ em relação à densidade verdadeira $f_{\underline{\mathbf{s}}}$ podem ser tolerados. Isso significa que não é preciso ter um modelo hipotético muito preciso (ou igual ao modelo exato) para a distribuição das fontes de modo que a minimização de $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ variando-se $\check{\mathbf{H}}$, na proximidade dos pontos de separação, resulte na recuperação de uma cópia adequada. Em geral, a recuperação das fontes em uma ordem particular, mas com eventuais mudanças de escala, corresponde a pontos estacionários de $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ (CARDOSO, 2000). Garante-se, ainda, que esses pontos são mínimos locais se for feita a escolha de um modelo tal que cada densidade hipotética $f_{\underline{\mathbf{s}}_i}$ possua decaimento assintótico (*i.e.*, decaimento de suas caudas) similar ao da correspondente densidade verdadeira $f_{\underline{\mathbf{s}}_i}$ (CARDOSO,

2000). Mais precisamente, consideram-se dois tipos de decaimento assintótico de uma função densidade de probabilidade: mais rápidos ou mais lentos do que o decaimento de uma gaussiana³. Como regra geral, $f_{\underline{s}_i}$ e $f_{\underline{s}_i}$ devem estar do “mesmo lado da gaussiana” (CARDOSO, 2000), *i.e.*, deve-se adotar um modelo cuja densidade possua decaimento assintótico, em relação à gaussiana, do mesmo tipo que a densidade verdadeira. Se essa condição for satisfeita, ϕ_{ML} pode ser compreendido, localmente, como um contraste não simétrico.

- ◇ A consideração de $f_{\underline{s}}$ com fontes hipotéticas conjuntamente gaussianas não é suficiente para permitir a recuperação adequada de cópias das fontes. Pode-se mostrar que, nesse caso, $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ possui mínimos locais para fontes estimadas não correlacionadas. Sabe-se, a partir das condições de separabilidade estabelecidas no Capítulo 5, que a não correlação imposta à saída do sistema separador não implica a separação de fontes independentes. Logo, o modelo hipotético de distribuição não deve ser gaussiano (CARDOSO, 1998).
- ◇ Se as fontes verdadeiras com densidade de probabilidade $f_{\underline{s}}$ forem conjuntamente gaussianas, pode-se demonstrar que a consideração de qualquer densidade hipotética $f_{\underline{s}}$ não é suficiente para que se tenha separação adequada nos mínimos de $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ (CARDOSO, 1998). Isso também está em acordo com o Teorema 5.4, que estabelece que não se garante a separação cega de fontes iid e mutuamente independentes no espaço a partir da imposição de independência, quando essas fontes são conjuntamente gaussianas.

Na prática, se as distribuições verdadeiras das fontes não forem conhecidas, costumam-se escolher densidades $f_{\underline{s}_i}$, para $i = 1, 2, \dots, N$, que sejam o mais próximas possível das densidades verdadeiras das fontes (na medida do conhecimento *a priori* disponível). Além disso, também é importante escolher densidades que possam ser tratadas matematicamente de forma conveniente para a posterior obtenção de soluções (*e.g.*, densidades relacionadas a distribuições tangente hiperbólica ou sigmoidais) (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001). Quando não há qualquer conhecimento prévio disponível sobre a distribuição conjunta das fontes, um contraste baseado somente em independência estatística pode ser mais adequado (CARDOSO, 1999).

Finalmente, a representação do contraste de verossimilhança conforme (7.11) facilita o estabelecimento de relações entre contrastes aparentemente distintos. Nesse sentido, apresenta-se a seguir uma função contraste desenvolvida de forma independente em relação ao contraste de máxima verossimilhança, mas com o qual possui muitas semelhanças.

³ Na literatura, essas distribuições são denominadas subgaussianas ou supergaussianas, respectivamente. No caso univariado, um exemplo de distribuição subgaussiana é a uniforme; já um exemplo de distribuição supergaussiana é a laplaciana (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001). Em alguns casos específicos, cumulantes de ordem quatro podem ser utilizados para identificar e inferir o tipo de uma distribuição. Uma discussão mais aprofundada pode ser encontrada em Mansour e Jutten (1999).

7.2.2 Maximização de entropia diferencial (infomax)

O princípio de separação conhecido como infomax, originário da área de redes neurais, o utiliza uma não linearidade aplicada à saída do sistema separador para separar fontes (BELL; SEJNOWSKI, 1995; CARDOSO, 1999). Na Figura 24, é mostrada a configuração padrão para descrever o princípio infomax. A não linearidade aplicada à saída consiste em uma função vetorial particular fixa $\mathbf{g} : \mathbb{R}^N \rightarrow (0, 1)^N$, tomada elemento a elemento e dada por

$$\mathbf{g}(\mathbf{y}) = [g_1(y_1) \ g_2(y_2) \ \cdots \ g_N(y_N)]^T, \quad (7.12)$$

em que g_1, g_2, \dots, g_N são funções não lineares aplicadas, respectivamente, às saídas do sistema separador y_1, y_2, \dots, y_N que compõem o vetor aleatório $\mathbf{y} = \mathbf{W}\mathbf{x}$.

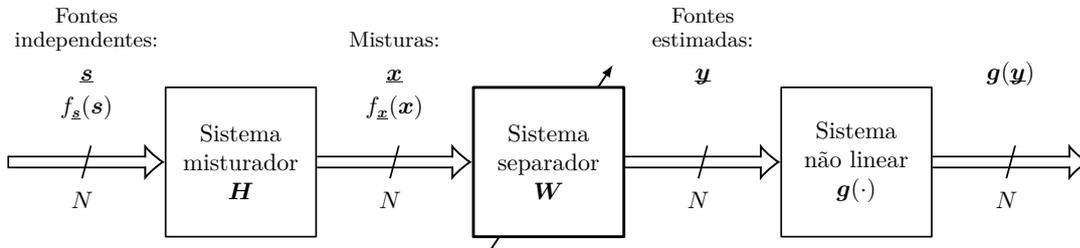


Figura 24 – Esquema simplificado da aplicação de uma não linearidade à saída do sistema separador para a descrição do critério infomax.

Fonte: autoria própria.

O objetivo do princípio infomax consiste em, variando-se a matriz de separação \mathbf{W} , minimizar-se a função (BELL; SEJNOWSKI, 1995; CARDOSO, 1997)

$$\phi_{\text{IM}}[\mathbf{y}] = -H[\mathbf{g}(\mathbf{y})] = -E[\log f_{\mathbf{g}(\mathbf{y})}(\mathbf{g}(\mathbf{y}))], \quad (7.13)$$

em que H denota a entropia diferencial segundo a Definição 2.9. As não linearidades em \mathbf{g} devem ser escolhidas de modo que $g_1, g_2, \dots, g_N : \mathbb{R} \rightarrow (0, 1)$ sejam funções estritamente crescentes. Se sob essas condições e para $i = 1, 2, \dots, N$ as funções g_i forem absolutamente contínuas (BREIMAN, 1992), então podem-se interpretá-las como funções distribuição de probabilidade dadas por

$$g_i(y_i) = \int_{-\infty}^{y_i} q_i(a) da$$

em que as respectivas funções densidade de probabilidade $q_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$ são definidas como

$$q_i(y_i) = \frac{dg_i(y_i)}{dy_i}.$$

A escolha da não linearidade \mathbf{g} possui um papel importante no desempenho da separação a partir da minimização de $\phi_{\text{IM}}[\mathbf{y}]$. A fim de compreender melhor a influência das não linearidades nos pontos de mínimo, considera-se a seguinte proposição.

Proposição 7.2. *Sejam r_1, r_2, \dots, r_N variáveis aleatórias mutuamente independentes com funções densidade de probabilidade dadas respectivamente por q_1, q_2, \dots, q_N e com funções distribuição de probabilidade correspondentes g_1, g_2, \dots, g_N . Com essas variáveis, compõe-se o vetor aleatório $\mathbf{r} = [r_1 \ r_2 \ \dots \ r_N]^T$. A função $\phi_{\text{IM}}[\mathbf{y}]$ de (7.13) pode ser expressa de maneira equivalente como*

$$\boxed{\phi_{\text{IM}}[\mathbf{y}] = K[\mathbf{y}|\mathbf{r}] = E \left[\log \left(\frac{f_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})}{f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y})} \right) \right]}, \quad (7.14)$$

em que K denota a divergência K-L apresentada na Definição 2.10 e \mathbf{y} é o vetor aleatório de fontes estimadas.

Demonstração. Veja a Seção A.4 do Apêndice A.

A partir da equivalência entre (7.13) e (7.14), tem-se que a maximização da entropia de $\mathbf{g}(\mathbf{y})$ equivale à minimização da distância, no sentido da divergência K-L, entre a distribuição de \mathbf{y} e a distribuição do vetor aleatório de elementos mutuamente independentes \mathbf{r} . Sabe-se que a distribuição de \mathbf{r} é determinada a partir da não linearidade \mathbf{g} escolhida.

Comparando-se (7.14) com o contraste de máxima verossimilhança (7.11), nota-se que se trata de expressões equivalentes se consideradas as seguintes correspondências (CARDOSO, 1997):

- ◇ $\mathbf{W} = \check{\mathbf{H}}^{-1}$, *i.e.*, a matriz de separação \mathbf{W} obtida via minimização de $\phi_{\text{IM}}[\mathbf{y}]$ corresponde à inversa da estimativa de máxima verossimilhança $\check{\mathbf{H}}$ da matriz de mistura, obtida a partir da minimização de $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$; e
- ◇ $q_i = f_{\check{s}_i}$ para $i = 1, 2, \dots, N$, *i.e.*, a função densidade de probabilidade de r_i corresponde à função densidade de probabilidade da i -ésima fonte hipotética \check{s}_i . Como tanto os elementos de \mathbf{r} quanto os elementos de $\check{\mathbf{s}}$ são mutuamente independentes, as não linearidades \mathbf{g} correspondem às funções distribuição de probabilidade de cada elemento correspondente do vetor de fontes hipotéticas $\check{\mathbf{s}}$. No princípio infomax, portanto, há um modelo hipotético implícito para a distribuição das fontes.

Por fim, sob condições análogas para o caso de máxima verossimilhança abordadas na Subseção 7.2.1, se escolhidas adequadamente as não linearidades \mathbf{g} — *i.e.*, suficientemente próximas das distribuições das fontes hipotéticas —, tem-se que a função $\phi_{\text{IM}}[\mathbf{y}]$ é, localmente, um contraste. Em outras palavras, desde que a escolha das não linearidades seja adequada, a minimização de $\phi_{\text{IM}}[\mathbf{y}]$ variando-se \mathbf{W} implica a adequada separação das fontes. Nessa situação, a função ϕ_{IM} é um contraste não simétrico, usualmente denominado contraste do infomax.

Até agora, a apresentação dos contrastes de máxima verossimilhança e infomax apenas permitiu compreender a relação existente entre a separação cega de fontes e o “casamento” da distribuição da saída do sistema separador com a distribuição das fontes hipotéticas.

Ainda não foi possível explicitar a relação direta entre a minimização desses contrastes e a imposição de independência à saída do sistema separador. No Capítulo 5, mostrou-se que essa imposição é o princípio fundamental que, de fato, permite separar fontes sob as condições do teorema de separabilidade (Teorema 5.4). A explicitação do mecanismo que permite a recuperação de independência por meio do uso desses contrastes inspira um outro princípio de separação, abordado na subseção a seguir (COMON, 1994).

7.2.3 Máxima informação mútua

A fim de explicitar que a imposição de independência à saída do sistema separador está implícita no contraste de máxima verossimilhança (ou, equivalentemente, no contraste do infomax), considera-se a seguinte proposição (CARDOSO, 1998).

Proposição 7.3. *O contraste de máxima verossimilhança ϕ_{ML} , dado por (7.11), admite a seguinte decomposição:*

$$\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}] = I[\mathbf{y}] + \sum_{i=1}^N K[y_i \|\check{\mathbf{s}}_i], \quad (7.15)$$

em que I denota a informação mútua conforme a Definição 2.11, K denota a divergência K - L conforme a Definição 2.10, \mathbf{y} é o vetor aleatório de fontes estimadas com i -ésimo elemento dado por y_i e $\check{\mathbf{s}}_i$ é o i -ésimo elemento do vetor aleatório de fontes hipotéticas $\check{\mathbf{s}}$ do modelo mostrado na Figura 23-(b).

Demonstração. Veja a Seção A.4 do Apêndice A.

A decomposição obtida para contraste ϕ_{ML} é útil para interpretar como a separação de fontes é de fato obtida a partir do princípio de máxima verossimilhança. Inicialmente, os dois termos principais do lado direito de (7.15) são não negativos — de acordo, respectivamente, com a Proposição 2.3-(i) e com a Proposição 2.4-(i). Com isso, ao maximizar a verossimilhança (*i.e.*, minimizar ϕ_{ML}), esses dois termos devem ser minimizados e podem-se interpretá-los como segue (CARDOSO, 1998):

◇ O primeiro termo, dado por

$$I[\mathbf{y}] = K \left(f_{\mathbf{y}} \left\| \prod_{i=1}^N f_{y_i} \right. \right) = \mathbb{E} \left[\log \left(\frac{f_{\mathbf{y}}(\mathbf{y})}{\prod_{i=1}^N f_{y_i}(y_i)} \right) \right],$$

é por definição a informação mútua do vetor de fontes estimadas \mathbf{y} cujo i -ésimo elemento é dado por y_i . Como decorrência da Proposição 2.4-(ii), trata-se de uma medida de independência mútua entre os elementos do vetor aleatório \mathbf{y} : tem-se $I[\mathbf{y}] = 0$ se, e somente se, os elementos de \mathbf{y} forem mutuamente independentes. Portanto, a minimização desse termo consiste apenas na maximização da independência mútua entre os elementos do vetor de fontes estimadas \mathbf{y} .

- ◇ O segundo termo é formado por uma soma de divergências K-L entre fontes estimadas y_i e fontes hipotéticas \check{s}_i , para $i = 1, 2, \dots, N$, conforme

$$\sum_{i=1}^N K[y_i || \check{s}_i] = \sum_{i=1}^N E \left[\log \left(\frac{f_{y_i}(y_i)}{f_{\check{s}_i}(y_i)} \right) \right].$$

Todos os termos sendo somados são não negativos por serem divergências K-L. Logo, a minimização do termo global é equivalente à minimização de cada um dos termos sendo somados. Isso implica tornar a distribuição marginal de cada uma das fontes estimadas y_i o mais “próxima” possível, no sentido da divergência K-L, da sua correspondente fonte hipotética \check{s}_i . Portanto, a minimização desse segundo termo é responsável por maximizar o “casamento” de distribuições das fontes estimadas com distribuições do modelo hipotético.

A partir dessa interpretação e segundo Cardoso (1998), o contraste de máxima verossimilhança, quando minimizado, realiza ocultamente duas tarefas distintas: a imposição de independência à saída do sistema separador e a adequação das distribuições marginais das fontes estimadas às distribuições marginais das fontes hipotéticas correspondentes. Sendo assim, fica explícito que a separação é obtida por esse contraste a partir de imposição de independência, conforme o Teorema 5.4 de separabilidade apresentado no Capítulo 5. Porém, além disso, a maximização da verossimilhança faz uma outra tarefa importante — não relacionada à separação de fato — que consiste na adequação das distribuições do modelo hipotético às distribuições das fontes estimadas.

Especificamente, conforme abordado na Subseção 7.2.1, se o modelo hipotético para a distribuição das fontes não for uma aproximação razoável do modelo exato, a minimização do segundo termo de (7.15) não resultará em fontes estimadas com distribuição próxima das fontes no modelo exato. Por consequência, a tarefa de imposição de independência realizada pelo primeiro termo, *i.e.*, $I[\mathbf{y}]$, ficará prejudicada — pois a imposição de independência, sob as condições do teorema de separabilidade, deve recuperar as fontes com sua distribuição verdadeira e não hipotética. Isso explica o fato de, quando o modelo hipotético das fontes é inadequado, não se ter recuperação de uma cópia do vetor de fontes ao minimizar $\phi_{ML}[\mathbf{y}]$ (CARDOSO, 1998).

Se houver conhecimento prévio razoável (mesmo que não exato) sobre a distribuição das fontes, pode-se incluí-lo no modelo hipotético. Entretanto, se não houver qualquer informação *a priori* sobre as distribuições das fontes, é recomendável não se considerar um modelo para essa distribuição (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001). Nesse caso, o contraste $\phi_{ML}[\mathbf{y}]$ deve ser minimizado inicialmente variando-se $f_{\check{s}}$, e posteriormente variando-se \check{H} . A partir de (7.15), tem-se

$$\min_{f_{\check{s}}} \phi_{ML}[\mathbf{y}] = \min_{f_{\check{s}}} \left(I[\mathbf{y}] + \sum_{i=1}^N K[y_i || \check{s}_i] \right)$$

$$= I[\mathbf{y}] + \min_{f_{\tilde{\mathbf{s}}}} \sum_{i=1}^N K[y_i || \tilde{s}_i],$$

pois $I[\mathbf{y}]$ independe do modelo hipotético considerado para a distribuição das fontes (CARDOSO, 1999). Agora, a partir da Proposição 2.3-(ii), o mínimo da soma das divergências K-L é atingido se, e somente se, $f_{\tilde{s}_i} = f_{y_i}$ — exceto, eventualmente, em um conjunto de medida nula dos suportes dessas funções densidade de probabilidade (COVER; THOMAS, 2006). Nesse caso, as divergências K-L resultam nulas e chega-se a

$$\min_{f_{\tilde{\mathbf{s}}}} \phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}] = I[\mathbf{y}]. \quad (7.16)$$

Sendo assim, a função obtida é uma versão do contraste de máxima verossimilhança sem a suposição de um modelo hipotético particular para a distribuição das fontes. Novamente, enfatiza-se que o termo resultante em (7.16) é o que verdadeiramente permite a separação de fontes, pois quando minimizado ao variar \mathbf{W} , impõe a independência mútua à saída do sistema separador. Portanto, esse termo inspira a definição de um contraste.

Definição 7.6. O contraste de máxima informação mútua é definido como

$$\phi_{\text{MI}}[\mathbf{y}] = I[\mathbf{y}] = K \left(f_{\mathbf{y}} \left\| \prod_{i=1}^N f_{y_i} \right. \right), \quad (7.17)$$

em que I denota a informação mútua conforme a Definição 2.11, K denota a divergência K-L conforme a Definição 2.10 e \mathbf{y} é o vetor aleatório de fontes estimadas com i -ésimo elemento dado por y_i . \triangleleft

Pode-se demonstrar, como decorrência direta do Teorema 5.4 de separabilidade, que a minimização do contraste de máxima informação mútua equivale à recuperação das fontes a menos de ambiguidades de permutação e escala, desde que

- (i) no máximo uma fonte seja gaussiana e nenhuma fonte seja constante, e
- (ii) o sistema misturador seja inversível.

Logo, sob essas condições de separabilidade, ϕ_{MI} é sempre um contraste segundo a Definição 7.2 (COMON, 1994).

A seguir, são obtidos mais dois contrastes entrópicos, muito importantes em análise de componentes independentes. Com base neles, é possível entender a relação estreita que existe entre independência e não gaussianidade das fontes estimadas.

7.2.4 Máxima negentropia e mínima entropia marginal

Uma decomposição útil do contraste de máxima informação mútua é apresentada na seguinte proposição (COMON, 1994).

Proposição 7.4. *O contraste de máxima informação mútua ϕ_{MI} , mostrado em (7.17), admite a seguinte decomposição:*

$$\phi_{\text{MI}}[\mathbf{y}] = \text{I}[\mathbf{y}_{\text{G}}] + \text{J}[\mathbf{y}] - \sum_{i=1}^N \text{J}[y_i], \quad (7.18)$$

em que I denota a informação mútua conforme a Definição 2.11, J denota a negentropia conforme a Definição 2.18, \mathbf{y} é o vetor aleatório de fontes estimadas com i -ésimo elemento dado por y_i e \mathbf{y}_{G} é um vetor aleatório gaussiano com média e matriz de covariância iguais às do vetor aleatório \mathbf{y} .

Demonstração. Veja a Seção A.4 do Apêndice A.

Agora, considera-se o esquema da Figura 10-(b) e supõe-se que a otimização de $\phi_{\text{MI}}[\mathbf{y}]$ é feita sob a restrição de \mathbf{y} com média nula e branqueado conforme abordado na Subseção 7.1.2. Nesse caso, o contraste de máxima informação mútua de (7.18) se torna ortogonal conforme

$$\phi_{\text{MI}}^{\circ}[\mathbf{y}] = \text{I}[\mathbf{y}_{\text{G}}] + \text{J}[\mathbf{y}] - \sum_{i=1}^N \text{J}[y_i] \quad (7.19)$$

e tem-se que

- ◇ o termo $\text{I}[\mathbf{y}_{\text{G}}]$ é constante em relação a $\widetilde{\mathbf{W}}$ pois a média e matriz de covariância de \mathbf{y} não se alteram sob a restrição de branqueamento imposta; e
- ◇ $\text{J}[\mathbf{y}] = \text{J}[\widetilde{\mathbf{W}}\tilde{\mathbf{x}}] = \text{J}[\tilde{\mathbf{x}}]$ segundo a Proposição 2.10-(iii), e portanto também se trata de termo constante em relação a $\widetilde{\mathbf{W}}$.

Logo, obtém-se a partir de (7.19) que

$$\phi_{\text{MI}}^{\circ}[\mathbf{y}] = \text{constante} - \sum_{i=1}^N \text{J}[y_i]. \quad (7.20)$$

A Equação (7.20) inspira a definição de um contraste conforme é feito a seguir.

Definição 7.7. O contraste ortogonal de máxima negentropia é definido como

$$\boxed{\phi_{\text{MN}}^{\circ}[\mathbf{y}] = - \sum_{i=1}^N \text{J}[y_i] = - \sum_{i=1}^N \text{K}[y_i \| y_{\text{G},i}],} \quad (7.21)$$

em que J denota a negentropia conforme a Definição 2.18, K denota a divergência K-L apresentada na Definição 2.10, y_i é o i -ésimo elemento do vetor aleatório de fontes estimadas \mathbf{y} e $y_{\text{G},i}$ é uma variável aleatória gaussiana com média e matriz de covariância iguais às da variável aleatória y_i . ◁

A minimização de $\phi_{\text{MN}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ implica a minimização de $\phi_{\text{MI}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ e, conseqüentemente, a adequada separação das fontes. Apesar disso, minimizar $\phi_{\text{MN}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ equivale a maximizar a negentropia individual de cada uma das fontes estimadas, já que cada uma das negentropias é não negativa a partir da Proposição 2.10-(i). Sabe-se que quanto maior é a negentropia, menor é a gaussianidade de cada saída do sistema separador. Sendo assim, fica evidente que sob a restrição de branqueamento à saída do sistema separador, a maximização da não gaussianidade individual de cada uma das saídas do sistema separador consiste em um princípio de separação válido. Essa é uma justificativa matemática para um fato intuitivo: as misturas são mais gaussianas do que as fontes e, conseqüentemente, maximizando-se a não gaussianidade das saídas do sistema separador, recuperam-se as fontes (HYVÄRINEN; OJA, 2000; HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001). Em suma, trata-se de uma relação forte existente entre a imposição de independência mútua à saída do sistema separador e a maximização da não gaussianidade individual de cada saída.

Por fim, um outro contraste entrópico pode ser obtido a partir da aplicação da Proposição 2.10-(iv) a (7.21), dado por

$$\phi_{\text{MN}}^{\circ}[\mathbf{y}] = - \sum_{i=1}^N \left(H[y_{G,i}] - H[y_i] \right),$$

em que H denota a entropia diferencial segundo a Definição 2.9, com

$$H[y_{G,i}] = - E[\log f_{u_{G,i}}(y_{G,i})] \quad \text{e} \quad H[y_i] = - E[\log f_{u_i}(y_i)],$$

e $y_{G,i}$ é uma variável aleatória gaussiana com média e variância iguais às da variável aleatória y_i . Sob a restrição de média nula e branqueamento de \mathbf{y} , tem-se que os termos $H[y_{G,i}]$ independem da escolha de $\widetilde{\mathbf{W}}$ segundo a Proposição 2.2-(iii). Sendo assim, resulta o contraste ortogonal definido a seguir (CARDOSO, 1999).

Definição 7.8. O contraste ortogonal de mínima entropia marginal é definido como

$$\boxed{\phi_{\text{MME}}^{\circ}[\mathbf{y}] = \sum_{i=1}^N H[y_i] = - \sum_{i=1}^N E[\log f_{u_i}(y_i)],} \quad (7.22)$$

em que H denota a entropia diferencial conforme a Definição 2.9 e y_i é o i -ésimo elemento do vetor aleatório de fontes estimadas \mathbf{y} . \triangleleft

A mesma interpretação dada ao contraste ortogonal de máxima negentropia pode ser adaptada ao contraste ortogonal de mínima entropia marginal. Isso porque, dado um conjunto de variáveis de mesma variância, as com distribuição gaussiana são as únicas que possuem máxima entropia diferencial, conforme a Proposição 2.2-(iii). Sendo assim, a maximização da não gaussianidade via minimização de $\phi_{\text{MN}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ é equivalente à minimização da entropia diferencial via minimização de $\phi_{\text{MME}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ (CARDOSO, 1999).

A seguir, apresenta-se um resumo sobre os contrastes entrópicos abordados ao longo dessa seção.

7.2.5 Relações entre os contrastes entrópicos

Na Figura 25, é mostrado um diagrama de blocos em que são resumidas as principais expressões obtidas, ao longo dessa seção, dos contrastes entrópicos baseados em independência. No diagrama, \mathbf{y} denota o vetor aleatório de fontes estimadas cujo i -ésimo elemento é dado por y_i ; $\check{\mathbf{s}}$ denota o vetor aleatório de fontes hipotéticas, com função densidade de probabilidade $f_{\check{\mathbf{s}}}$ e i -ésimo elemento \check{s}_i ; e \mathbf{g} denota uma função não linear vetorial tomada elemento a elemento.

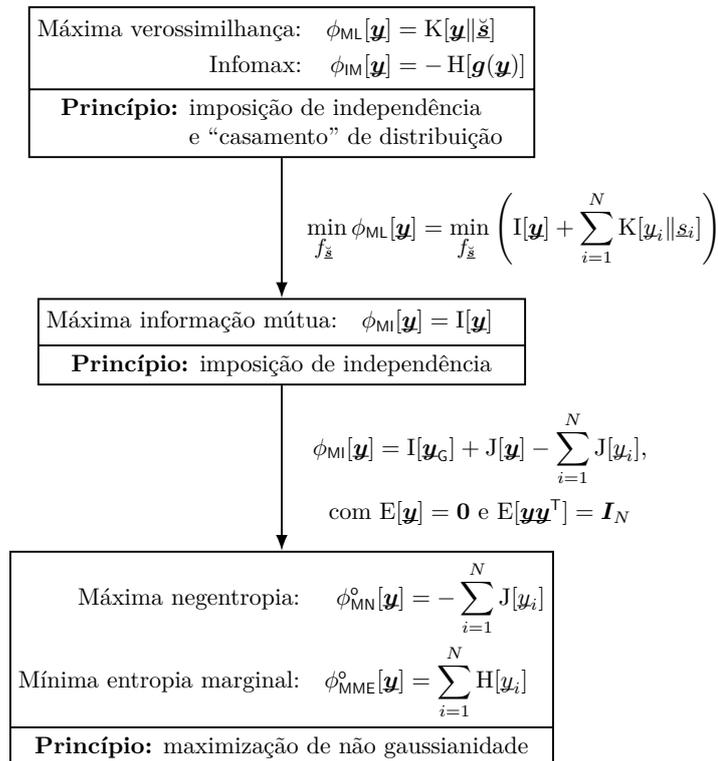


Figura 25 – Relações entre contrastes entrópicos baseados em independência e suas expressões; H, K, I e J denotam, respectivamente, a entropia diferencial, a divergência K-L, a informação mútua e a negentropia, cujas definições são apresentadas na Seção 2.2.

Fonte: autoria própria.

Como considerações importantes sobre os contrastes entrópicos para separação por imposição de independência, ressalta-se que:

- ◇ Pode-se afirmar que o contraste fundamental no contexto de separação cega de fontes por imposição de independência é o de máxima informação mútua, *i.e.*, $\phi_{\text{MI}}[\mathbf{y}]$. Esse contraste resume o objetivo de separação vislumbrado por P. Comon a partir do teorema de Darmois–Skitovich, o qual é abordado no Capítulo 5 (COMON, 1994). No entanto, estimar o gradiente desse contraste pode ser custoso computacionalmente. Em alguns casos, pode ser mais interessante o uso do contraste de máxima verossimilhança $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ — cuja estimativa do gradiente é menos custosa —, mesmo que seja necessário supor uma distribuição hipotética para as fontes (CARDOSO, 1998).

- ◇ Na prática, a resolução do problema de separação cega de fontes a partir do princípio de máxima verossimilhança via $\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}]$ (ou, equivalentemente, a partir do princípio infomax via $\phi_{\text{IM}}[\mathbf{y}]$) permite a consideração de informações adicionais sobre a distribuição das fontes. Essas informações *a priori* podem ser englobadas no modelo hipotético de $f_{\mathbf{z}}$ (ou, equivalentemente, nas não linearidades \mathbf{g}). Quando o conhecimento sobre a distribuição das fontes é muito vago, devido à possibilidade de não convergência do estimador de máxima verossimilhança para um ponto de separação, recomenda-se utilizar o contraste de máxima informação mútua $\phi_{\text{MI}}[\mathbf{y}]$ ou contrastes de máxima negentropia $\phi_{\text{MN}}[\mathbf{y}]$ ou mínima entropia marginal $\phi_{\text{MME}}[\mathbf{y}]$ (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001).
- ◇ Os contrastes não ortogonais podem ser aplicados mesmo sob restrições de média nula e branqueamento. Nesse caso, o contraste de informação mútua pode ser convenientemente simplificado, resultando nos contrastes de máxima negentropia e de mínima entropia marginal (CARDOSO, 1998).
- ◇ Os contrastes de máxima negentropia e mínima entropia marginal por serem ortogonais, realizam a busca sobre um espaço mais restrito de coeficientes $\widetilde{\mathbf{W}}$ em relação aos contrastes não ortogonais. Além disso, ambos os contrastes permitem a estimação das fontes individualmente, já que são baseados em uma soma “medidas” de não gaussianidade individuais de cada fonte estimada.
- ◇ O desempenho de uma técnica de separação depende tanto da escolha do contraste quanto do método de otimização utilizado. A escolha do contraste tem efeitos sobre as propriedades estatísticas da técnica de separação, como a consistência dos estimadores, robustez dos estimadores a *outliers*, etc. Já a escolha do método de otimização possui efeitos sobre a velocidade de convergência da técnica, seu custo computacional e estabilidade numérica (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001).

Os contrastes obtidos até aqui são entrópicos — *i.e.*, dependem explicitamente da distribuição de probabilidade do vetor aleatório de fontes estimadas \mathbf{y} . Isso pode ser uma desvantagem prática, pois exceto para o contraste de máxima verossimilhança, seria preciso estimar de alguma forma a distribuição de \mathbf{y} para realizar a separação cega de fontes — o que pode ser relativamente complicado e pouco eficiente na prática (CARDOSO, 1999). Uma alternativa ao uso de contrastes entrópicos na obtenção de métodos de separação consiste em aproximá-los lançando-se mão de expansões de funções densidade de probabilidade baseadas em estatísticas de ordem superior (CARDOSO, 1999) ou de funções não lineares (HYVÄRINEN; OJA, 2000), por exemplo. Trata-se de maneiras implícitas, e por vezes eficientes, de estimar a distribuição da saída \mathbf{y} do sistema separador (CARDOSO, 1999). Alguns contrastes aproximados são abordados na seção a seguir.

7.3 Contrastes aproximados

Inicialmente, na Subseção 7.3.1 introduz-se uma ferramenta importante para aproximar contrastes com base em estatísticas de ordem superior. Na Subseção 7.3.2, apresentam-se algumas das aproximações de contrastes decorrentes do uso dessa ferramenta, e que se baseiam em estatísticas de ordem superior.

7.3.1 Expansão de Edgeworth

Em geral, na prática não se conhece com exatidão distribuição de probabilidade da saída do sistema separador \mathbf{y} . Na obtenção de métodos para a otimização de contrastes, torna-se necessário estimá-la (CARDOSO, 1999). A expansão de densidades de probabilidade em uma soma infinita é um assunto que chamou a atenção dos estatísticos desde o século XIX, como P. Chebyshev e C. Charlier, por exemplo (MCCULLAGH, 2018).

Cumulantes permitem descrever, tanto qualitativamente quanto quantitativamente, aspectos do formato de uma densidade de probabilidade — como sua assimetria em relação à média ou o decaimento assintótico de suas caudas. Portanto, intuitivamente é razoável pensar que a função densidade de probabilidade de uma variável aleatória possa ser decomposta em uma soma infinita de termos que dependam de seus cumulantes⁴.

Entre os vários tipos de expansões para funções densidade de probabilidade existentes, merecem atenção especial na obtenção de aproximações de contrastes a expansão de Gram–Charlier e expansão de Edgeworth (EDGEWORTH, 1905; FELLER, 1968–1971; KENDALL, 1945). Trata-se de expansões que envolvem uma aproximação inicial da função densidade de probabilidade que se deseja expandir, multiplicada por uma soma de termos cujos coeficientes são simples combinações dos cumulantes do vetor aleatório associado (MCCULLAGH, 2018; CAVALCANTE, 2004). Em ambos os tipos de expansão, a aproximação inicial usualmente utilizada é de uma densidade gaussiana, com média e matriz de covariância preestabelecidas — embora outras aproximações iniciais também possam ser consideradas (EDGEWORTH, 1905; KENDALL, 1945).

Inicialmente, apresenta-se a expansão de Gram–Charlier para o caso de uma densidade correspondente a apenas uma variável aleatória considerada, por simplicidade, de média nula (MCCULLAGH, 2018).

Definição 7.9. Seja \underline{a} uma variável aleatória de média nula com função densidade de probabilidade $f_{\underline{a}}$. Recordar-se que os cumulantes de ordem P de \underline{a} são denotados por $\mathcal{C}_{\underline{a},P}$. A expansão de Gram–Charlier da função $f_{\underline{a}}$ é dada por

$$f_{\underline{a}}(a) \approx \varphi(a) \left(1 + \frac{(\mathcal{C}_{\underline{a},2} - 1)}{2} h_2(a) + \frac{\mathcal{C}_{\underline{a},3}}{3!} h_3(a) + \frac{\mathcal{C}_{\underline{a},4} + 3(\mathcal{C}_{\underline{a},2} - 1)^2}{4!} h_4(a) \right)$$

⁴ Na Seção 2.3, são apresentadas as principais definições e propriedades relacionadas a cumulantes de variáveis aleatórias, bem como uma notação simplificada para representá-los.

$$+ \frac{\mathcal{C}_{a,5} + 10\mathcal{C}_{a,3}(\mathcal{C}_{a,2} - 1)}{5!} h_5(a) + \dots \Big), \quad (7.23)$$

em que φ é uma função densidade de probabilidade gaussiana padrão dada por

$$\varphi(a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-a^2/2} \quad (7.24)$$

e h_i , com $i = 2, 3, \dots$, são polinômios de Hermite cujas expressões, para $i = 2, 3, 4, 5$, são

$$h_2(a) = a^2 - 1, \quad (7.25)$$

$$h_3(a) = a^3 - 3a, \quad (7.26)$$

$$h_4(a) = a^4 - 6a^2 + 3, \quad (7.27)$$

$$h_5(a) = a^5 - 10a^3 + 15a. \quad (7.28)$$

◁

A respeito dessa definição, cabem os seguintes comentários:

- ◊ A validade da expansão de Gram–Charlier depende da convergência adequada da soma infinita de (7.23). Dependendo da densidade a ser expandida, e da proximidade de f_a em relação a φ , é possível mostrar que nem sempre a convergência é obtida. A análise de convergência da expansão de Gram–Charlier é relativamente complicada — uma discussão mais aprofundada sobre essa questão é feita por Kendall (1945).
- ◊ Em muitos casos práticos, apenas é preciso tomar uma quantidade finita de termos da expansão para ter uma aproximação razoável de uma dada função densidade de probabilidade. Na prática, a expansão é comumente truncada e é mantida apenas uma quantidade pequena de seus termos iniciais. Nessa situação, a ordem com que os termos da expansão são dispostos se torna relevante no sentido do erro que é cometido no truncamento. Curiosamente, é possível mostrar que os termos que dependem dos cumulantes, na ordem dada por (7.23), não tendem regularmente a zero do ponto de vista da ordem de grandeza dos cumulantes, sob as condições de uma extensão do teorema central do limite (MCCULLAGH, 2018).
- ◊ Edgeworth notou que, reagrupando os termos da soma em (7.23), é possível garantir uma menor ordem de grandeza do erro após o truncamento. Sendo assim, a expansão de Edgeworth possui formalmente a mesma expressão da expansão de Gram–Charlier (7.23), mas com os termos da soma, que dependem dos cumulantes, reagrupados de uma outra maneira. As expressões completas da expansão de Edgeworth, omitidas por brevidade, podem ser encontradas em McCullagh (2018).

A seguir, apresenta-se uma aproximação simples, obtida via expansão de Edgeworth, da função densidade de probabilidade simétrica de uma variável aleatória de média nula (CARDOSO, 1999). Nesse caso, os cumulantes de ordem ímpar da variável em questão valem zero (MCCULLAGH, 2018).

Proposição 7.5. *Seja \underline{a} uma variável aleatória de média nula, com função densidade de probabilidade simétrica $f_{\underline{a}}$, cujos cumulantes de ordem P são denotados por $\mathcal{C}_{\underline{a},P}$. Um truncamento particular da expansão de Edgeworth de $f_{\underline{a}}$ resulta na aproximação*

$$f_{\underline{a}}(a) \approx \varphi(a) \left(1 + \frac{(\mathcal{C}_{\underline{a},2} - 1)}{2} h_2(a) + \frac{\mathcal{C}_{\underline{a},4}}{4!} h_4(a) \right) \quad (7.29)$$

em que φ é a função densidade de probabilidade gaussiana padrão de (7.24), sendo h_2 e h_4 polinômios de Hermite dados por (7.25) e (7.27).

A expressão de (7.29) pode ser útil para análises teóricas em problemas de uma única variável. Entretanto, a aproximação de contrastes via expansão da função densidade de probabilidade do vetor de fontes estimadas \mathbf{y} é um problema multivariado. Assim, é preciso considerar a expansão de Edgeworth para uma função densidade de probabilidade conjunta de todas as N fontes estimadas. A expansão se torna extremamente complicada no caso multivariado, mesmo adotando-se notação tensorial. As expressões completas de expansões de Edgeworth multivariadas podem ser encontradas em McCullagh (2018) e são omitidas nesse texto.

Na subseção a seguir, prossegue-se à apresentação das aproximações de contrastes baseadas em cumulantes obtidas a partir de expansões de Edgeworth multivariadas convenientemente truncadas, conforme feito por Cardoso (1999).

7.3.2 Aproximações baseadas em cumulantes

Na Seção 7.2, os contrastes apresentados foram relacionados com alguma medida entrópica de informação, seja a divergência K-L, a informação mútua ou a entropia diferencial. Todas essas medidas podem ser relacionadas entre si, conforme abordado no Capítulo 2. Se, a partir da expansão de Edgeworth multivariada truncada, for possível aproximar alguma dessas medidas entrópicas de informação, é possível obter expressões aproximadas para os contrastes entrópicos previamente apresentados.

Nesta subseção, inicialmente são abordadas as aproximações para a divergência K-L, de acordo com Cardoso (1999). Por simplicidade, são consideradas variáveis aleatórias com médias nulas e distribuições simétricas, bem como expansões de Edgeworth truncadas até o cumulante de ordem quatro. Para muitas distribuições assimétricas, aproximações válidas de contrastes baseadas em cumulantes de ordem três também podem ser obtidas (COMON, 1994). A título de exemplo, inicialmente considera-se o caso univariado a partir da seguinte proposição (CARDOSO, 1998; CARDOSO, 1999).

Proposição 7.6. *Sejam \underline{a} e \underline{b} variáveis aleatórias de média nula, com respectivas funções densidade de probabilidade simétricas $f_{\underline{a}}$ e $f_{\underline{b}}$, ambas relativamente próximas da gaussiana padrão. Utilizando-se expansões de Edgeworth truncadas para ambas as densidades conforme (7.29), é possível mostrar que a divergência K-L entre \underline{a} e \underline{b} pode ser aproximada*

por

$$K[\underline{a}||\underline{b}] \approx \frac{1}{4}(\mathcal{C}_{\underline{a},2} - \mathcal{C}_{\underline{b},2})^2 + \frac{1}{48}(\mathcal{C}_{\underline{a},4} - \mathcal{C}_{\underline{b},4})^2,$$

em que $\mathcal{C}_{\underline{a},P}$ e $\mathcal{C}_{\underline{b},P}$ são, respectivamente, os cumulantes de \underline{a} e \underline{b} de ordem P .

A divergência K-L para o caso univariado pode ser compreendida, aproximadamente, como uma “medida” de incompatibilidade de cumulantes (CARDOSO, 1999). No caso, a divergência K-L aproximada vale zero se \underline{a} e \underline{b} possuírem (i) mesmas variâncias e (ii) mesmos autocumulantes de ordem quatro. Essas duas igualdades não garantem a igualdade das distribuições de \underline{a} e \underline{b} (FELLER, 1968–1971, v. 2, p. 227), como seria de se esperar para divergência K-L nula.

Um resultado análogo ao da Proposição 7.6 pode ser obtido no caso multivariado, conforme a seguinte proposição (CARDOSO, 1999).

Proposição 7.7. *Sejam \underline{a} e \underline{b} vetores aleatórios de média nula com o mesmo número N de elementos. Esses vetores possuem respectivas funções densidade de probabilidade simétricas $f_{\underline{a}}$ e $f_{\underline{b}}$, ambas relativamente próximas da gaussiana multivariada padrão. Utilizando-se expansões de Edgeworth multivariadas truncadas para ambas as densidades conforme McCullagh (2018), é possível mostrar que a divergência K-L entre \underline{a} e \underline{b} pode ser aproximada por*

$$K[\underline{a}||\underline{b}] \approx \frac{1}{4} \sum_{i,j} (\mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j} - \mathcal{C}_{\underline{b}}^{i,j})^2 + \frac{1}{48} \sum_{i,j,k,\ell} (\mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j,k,\ell} - \mathcal{C}_{\underline{b}}^{i,j,k,\ell})^2, \quad (7.30)$$

em que os somatórios em negrito representam, respectivamente, somas múltiplas sobre N^2 pares e N^4 quádruplas de índices e $\mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j}$, $\mathcal{C}_{\underline{b}}^{i,j}$, $\mathcal{C}_{\underline{a}}^{i,j,k,\ell}$, $\mathcal{C}_{\underline{b}}^{i,j,k,\ell}$, para $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$, são cumulantes conforme definido na Seção 2.3.

A generalização da aproximação da divergência K-L para o caso multivariado, apresentada na Proposição 7.7, sugere uma “medida” de incompatibilidade de cumulantes como no caso univariado, mas agora são considerados todos os cumulantes de ordem dois e de ordem quatro de cada um dos vetores. Nesse sentido, a minimização da expressão aproximada se dá quando \underline{a} e \underline{b} , ambos de média nula, possuem (i) matrizes de covariância iguais e (ii) tensores de cumulantes de ordem quatro iguais.

Agora, resta saber quais contrastes aproximados resultam da aplicação da aproximação da divergência K-L dada por (7.30) aos contrastes entrópicos apresentados na Seção 7.2. Obtêm-se, como resultado, as proposições apresentadas a seguir (CARDOSO, 1999).

Proposição 7.8. *O contraste de máxima verossimilhança de (7.11) pode ser aproximado por*

$$\phi_{\text{ML}}[\underline{y}] \approx \frac{1}{4} \sum_{i,j} (\mathcal{C}_{\underline{y}}^{i,j} - \mathcal{C}_{\check{\underline{y}},2} \delta_{i,j})^2 + \frac{1}{48} \sum_{i,j,k,\ell} (\mathcal{C}_{\underline{y}}^{i,j,k,\ell} - \mathcal{C}_{\check{\underline{y}},4} \delta_{i,j,k,\ell})^2, \quad (7.31)$$

em que os somatórios em negrito representam, respectivamente, somas múltiplas sobre N^2 pares e N^4 quádruplas de índices, \mathbf{y} é o vetor aleatório de fontes estimadas, $\check{\mathbf{s}}$ é o vetor aleatório de fontes hipotéticas e δ denota o delta de Kronecker definido como

$$\delta_{i_1, i_2, \dots, i_M} = \begin{cases} 1, & \text{se } i_1 = i_2 = \dots = i_M \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (7.32)$$

Proposição 7.9. O contraste de máxima informação mútua de (7.17) pode ser aproximado por

$$\phi_{\text{MI}}[\mathbf{y}] \approx \frac{1}{4} \sum_{i,j \neq i,i} (\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j})^2 + \frac{1}{48} \sum_{i,j,k,\ell \neq i,i,i,i} (\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell})^2, \quad (7.33)$$

em que os somatórios em negrito representam, respectivamente, somas múltiplas sobre $N(N-1)$ pares de índices distintos e $N(N^3-1)$ quádruplas de índices que não sejam todos iguais e \mathbf{y} é o vetor aleatório de fontes estimadas.

Sobre as aproximações de contrastes baseadas em cumulantes obtidas nas Proposições 7.8 e 7.9, observa-se que:

- ◇ Assim como no caso entrópico da Seção 7.2, o contraste aproximado de máxima verossimilhança de (7.31) leva em conta informações *a priori* incluídas no modelo. Em vez de levar em conta um modelo de distribuição das fontes como no caso entrópico, no caso aproximado esse contraste apenas utiliza informações hipotéticas sobre os cumulantes de ordem dois e quatro das fontes. Se tivesse sido utilizada uma outra aproximação mais conservadora para a divergência K-L — *i.e.*, com mais termos —, apareceriam no contraste mais cumulantes do modelo hipotético das fontes. O contraste aproximado de máxima verossimilhança não é simétrico, visto que há uma ordem preestabelecida pelos cumulantes considerados no modelo hipotético.
- ◇ O contraste aproximado de máxima informação mútua, também como no caso entrópico, não requer o conhecimento ou a suposição de algum modelo para a distribuição das fontes. A partir da expressão do contraste dada por (7.33), trata-se de um contraste simétrico (*i.e.*, incapaz de determinar uma ordem correta para as fontes). Além disso, esse contraste não depende de autocumulantes de \mathbf{y} — o que é razoável, visto que o contraste de informação mútua deve traduzir a noção de independência, e essa independência é estabelecida anulando-se todos os cumulantes cruzados do vetor aleatório considerado (CARDOSO, 1999).

A seguir, são apresentadas aproximações para contrastes ortogonais, que são contrastes que devem ser otimizados sob a restrição de branqueamento do vetor aleatório \mathbf{y} .

Proposição 7.10. O contraste ortogonal de máxima negentropia de (7.21) pode ser aproximado por

$$\phi_{\text{MN}}^{\circ}[\mathbf{y}] \approx \frac{1}{48} \sum_{i,j,k,\ell \neq i,i,i,i} (\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell})^2 \stackrel{c}{=} -\frac{1}{48} \sum_{i=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{y}_i,4}^2, \quad (7.34)$$

em que \mathbf{y} é o vetor aleatório de fontes estimadas e $\stackrel{c}{=}$ indica uma igualdade a menos de uma constante.

Proposição 7.11. *O contraste ortogonal de máxima verossimilhança, que consiste em um caso particular do contraste dado por (7.11), pode ser aproximado por*

$$\phi_{\text{ML}}^{\circ}[\mathbf{y}] \approx \frac{1}{48} \sum_{i,j,k,\ell} (\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell} - \mathcal{C}_{\check{\mathbf{s}},4} \delta_{i,j,k,\ell})^2 \stackrel{c}{=} -\frac{1}{24} \sum_{i=1}^N \mathcal{C}_{\check{\mathbf{s}},4} \mathcal{C}_{\mathbf{y}_i,4} \quad (7.35)$$

$$\stackrel{c}{=} -\frac{1}{24} \sum_{i=1}^N \mathcal{C}_{\check{\mathbf{s}},4} \mathcal{E}_{\mathbf{y}_i,4} \quad (7.36)$$

em que \mathbf{y} é o vetor aleatório de fontes estimadas, $\check{\mathbf{s}}$ é o vetor aleatório de fontes hipotéticas, δ denota o delta de Kronecker definido em (7.32) e $\mathcal{E}_{\mathbf{y}_i,4} = E[y_i^4]$, para $i = 1, 2, \dots, N$, segundo as definições apresentadas na Seção 2.3.

Por fim, com base nos contrastes ortogonais aproximados obtidos nas Proposições 7.10 e 7.11, podem ser feitos os seguintes comentários:

- ◇ O contraste ortogonal aproximado de máxima negentropia, cuja expressão é (7.34) consiste, de fato, em uma versão simplificada do contraste aproximado mais geral de máxima informação mútua. Ambas as expressões do contraste aproximado de máxima negentropia são interessantes no sentido de que a maximização dos autocumulantes de \mathbf{y} equivale à minimização de seus cumulantes cruzados, nesse dado contexto em que há a restrição de branqueamento. Sendo assim, a independência estatística entre os elementos de \mathbf{y} pode ser verificada com base apenas em seus autocumulantes, o que pode ser mais eficiente na prática (CARDOSO, 1999).
- ◇ Por fim, conforme observado por Cardoso (1999), a última igualdade do contraste ortogonal aproximado de máxima verossimilhança em (7.35) é particularmente interessante. Segundo a expressão apresentada, esse contraste pode ser expresso como uma expressão que depende apenas de momentos individuais de ordem quatro das saídas do sistema separador, multiplicados por cumulantes que fazem parte do modelo hipotético. Isso pode ter vantagens práticas, visto que a estimação de esperanças é, em geral, mais fácil que a estimação de cumulantes.

Para concluir essa seção, na Figura 26 é mostrado um diagrama de blocos em que são resumidas as principais expressões obtidas de contrastes aproximados baseados em cumulantes. Em particular, destacam-se as fórmulas que permitem obter cada uma das versões aproximadas. No diagrama, \mathbf{y} denota o vetor aleatório de fontes estimadas, com função densidade de probabilidade $f_{\mathbf{y}}$ e i -ésimo elemento y_i , e $\check{\mathbf{s}}$ denota o vetor aleatório de fontes hipotéticas, com função densidade de probabilidade $f_{\check{\mathbf{s}}}$ e i -ésimo elemento \check{s}_i .

A seguir, apresentam-se contrastes também baseados em cumulantes, porém agora provenientes de uma abordagem de otimização aplicada aos métodos algébricos de separação abordados no Capítulo 6.

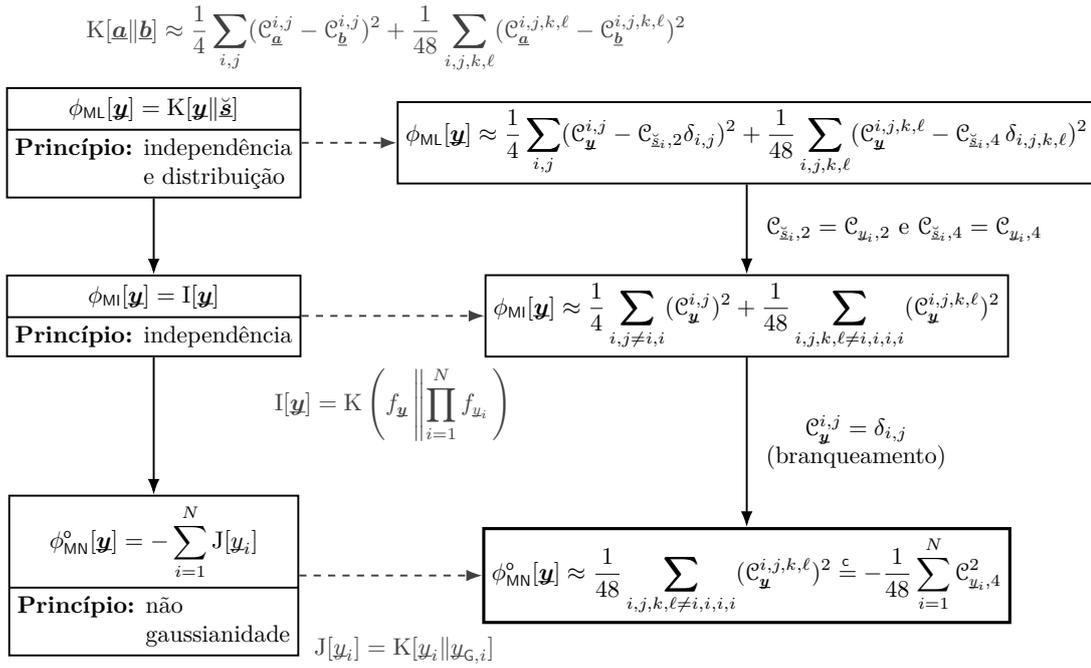


Figura 26 – Relações entre contrastes entrópicos baseados em independência e suas versões aproximadas com cumulantes; K, I e J denotam, respectivamente, a divergência K-L, a informação mútua e a negentropia, cujas definições são apresentadas na Seção 2.2.

Fonte: autoria própria.

7.4 Contrastes ortogonais de diagonalização

A compreensão dos princípios de separação baseados em propriedades de cumulantes, abordados ao longo do Capítulo 6, pode ser enriquecida interpretando-os sob um ponto de vista de otimização. Essa interpretação alternativa pode auxiliar a compreensão das propriedades estatísticas desses métodos, bem como permite relacioná-los a outros princípios de separação que possuem formulação por otimização (como aqueles considerados nas Seções 7.2 e 7.3).

Na Subseção 7.4.1, inicialmente formula-se a diagonalização da matriz de quadricovariância como um problema equivalente de otimização. Em seguida, na Subseção 7.4.2, remete-se esse problema às fontes estimadas — como é usual no contexto de separação por otimização de contrastes. Nas Subseções 7.4.3 e 7.4.4, apresentam-se contrastes de diagonalização simples e contrastes para o método FOBI, respectivamente. Por fim, na Subseção 7.4.5, abordam-se contrastes de diagonalização simultânea e, na Subseção 7.4.6, apresenta-se um contraste equivalente para o método JADE.

7.4.1 Diagonalização da matriz de quadricovariância via otimização

Considera-se o problema esquematizado na Figura 10-(b), em que leva-se em conta o pré-processamento das misturas. Recorda-se que, na abordagem de otimização considerada na Seção 7.1, os contrastes são usualmente considerados em relação às fontes

estimadas \mathbf{y} . Ao longo do Capítulo 6, entretanto, foi considerada sempre a diagonalização da matriz de quadricovariância das misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$. A seguir, reformula-se o problema do Capítulo 6 sob uma roupagem de contrastes em relação à saída \mathbf{y} do sistema separador (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; CARDOSO, 1999).

Inicialmente, considera-se a matriz de quadricovariância das misturas branqueadas $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$, conforme a Definição 6.1, para uma matriz de pesos $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ arbitrária. No contexto de otimização, a diagonalização de $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ pode ser colocada como a obtenção de uma matriz diagonal a partir do produto

$$\widetilde{\mathbf{W}} \mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) \widetilde{\mathbf{W}}^T \quad (7.37)$$

variando-se a matriz ortogonal de separação $\widetilde{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$. As observações feitas nas Seções 6.4 e 6.5 podem ser reinterpretadas, agora, do ponto de vista de otimização. Conforme (6.21), a matriz $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ sempre admite a decomposição em autovalores e autovetores

$$\boxed{\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \mathbf{U}) \mathbf{U}^T} \quad (7.38)$$

em que

$$\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \cdots \ \mathbf{u}_N] \in \mathbb{R}^{N \times N} \quad (7.39)$$

é a matriz ortogonal de mistura e $\mathbf{\Lambda}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \mathbf{U})$ é definida em (6.22). Se a matriz $\widetilde{\mathbf{W}}$ for tal que o produto (7.37) resulte diagonal e se a decomposição (7.38) for única no sentido da Proposição 6.1, então ter-se-á $\widetilde{\mathbf{W}} = \mathbf{U}^T$ a menos de ambiguidades na ordem e no sinal das linhas de $\widetilde{\mathbf{W}}$.

Uma métrica usual para quantificar a proximidade de (7.37) com uma matriz diagonal consiste na soma de seus elementos de fora da diagonal principal elevados ao quadrado (CARDOSO, 1999). Segundo essa métrica⁵, a diagonalização da matriz de quadricovariância, ainda em relação às misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$, pode ser colocada como o problema de otimização

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{minimize} \quad \text{off}(\widetilde{\mathbf{W}} \mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) \widetilde{\mathbf{W}}^T), \\ \widetilde{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}^{N \times N} \\ \widetilde{\mathbf{W}}^{-1} = \widetilde{\mathbf{W}}^T \end{array}} \quad (7.41)$$

em que $\text{off}(\cdot)$ denota a soma dos quadrados dos elementos de fora da diagonal principal da matriz considerada.

⁵ A soma dos quadrados dos elementos de fora da diagonal principal de $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é definida (CARDOSO, 1999) como

$$\text{off}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N [\mathbf{A}]_{i,j}^2. \quad (7.40)$$

7.4.2 Remetendo o problema às fontes estimadas

A fim de obter um problema equivalente a (7.41), mas representado em relação ao vetor de fontes estimadas \mathbf{y} , considera-se a relação entre esse vetor e o vetor de fontes independentes e normalizadas $\tilde{\mathbf{s}}$ da Figura 10-(b), dada por (7.6) e repetida a seguir por conveniência:

$$\mathbf{y} = \widetilde{\mathbf{M}}\tilde{\mathbf{s}}, \quad (7.42)$$

em que

$$\widetilde{\mathbf{M}} = [\tilde{\mathbf{m}}_1 \quad \tilde{\mathbf{m}}_2 \quad \cdots \quad \tilde{\mathbf{m}}_N] \in \mathbb{R}^{N \times N} \quad (7.43)$$

é a matriz de resposta combinada ortogonal. Seja $\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\mathbf{V}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ a matriz de quadricovariância das fontes estimadas. Como os elementos de $\tilde{\mathbf{s}}$ são independentes, pode-se aplicar a Proposição 3.7 à relação linear (7.42), obtendo-se a fatoração

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\mathbf{V}) = \widetilde{\mathbf{M}}\mathbf{A}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \widetilde{\mathbf{M}})\widetilde{\mathbf{M}}^T, \quad (7.44)$$

com

$$\mathbf{A}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \widetilde{\mathbf{M}}) = \text{diag}(\mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{s}}_1,4} \tilde{\mathbf{m}}_1^T \mathbf{V} \tilde{\mathbf{m}}_1, \mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{s}}_2,4} \tilde{\mathbf{m}}_2^T \mathbf{V} \tilde{\mathbf{m}}_2, \dots, \mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{s}}_N,4} \tilde{\mathbf{m}}_N^T \mathbf{V} \tilde{\mathbf{m}}_N). \quad (7.45)$$

Expandindo-se as matrizes $\widetilde{\mathbf{M}}$ e \mathbf{U} conforme (7.43) e (7.39), respectivamente, na expressão (7.7), tem-se

$$\tilde{\mathbf{m}}_i = \widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{u}_i$$

para $i = 1, 2, \dots, N$. Substituindo-se esses vetores em (7.45), resulta

$$\mathbf{A}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\mathbf{V}, \widetilde{\mathbf{M}}) = \mathbf{A}_{\tilde{\mathbf{s}},4}(\widetilde{\mathbf{W}}^T \mathbf{V} \widetilde{\mathbf{W}}, \mathbf{U}). \quad (7.46)$$

Finalmente, substituindo-se (7.7) e (7.46) em (7.44), e considerando-se (7.38), chega-se a

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\mathbf{V}) = \widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\widetilde{\mathbf{W}}^T \mathbf{V} \widetilde{\mathbf{W}})\widetilde{\mathbf{W}}^T. \quad (7.47)$$

Se $\widetilde{\mathbf{W}} = \mathbf{I}_N$, então $\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\mathbf{V}) = \mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ — como esperado. A expressão (7.47) é válida para qualquer matriz de pesos \mathbf{V} ; em particular, pode-se tomar nesse caso

$$\mathbf{V} = \widetilde{\mathbf{W}}\overline{\mathbf{V}}\widetilde{\mathbf{W}}^T$$

com $\overline{\mathbf{V}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ tal que

$$\boxed{\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\overline{\mathbf{V}}\widetilde{\mathbf{W}}^T) = \widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\overline{\mathbf{V}})\widetilde{\mathbf{W}}^T.} \quad (7.48)$$

Com base nessa expressão, o problema de otimização (7.41) pode ser reescrito de maneira equivalente como

$$\underset{\substack{\widetilde{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}^{N \times N} \\ \widetilde{\mathbf{W}}^{-1} = \widetilde{\mathbf{W}}^T}}{\text{minimize}} \quad \text{off}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\overline{\mathbf{V}}\widetilde{\mathbf{W}}^T)). \quad (7.49)$$

A escolha de \mathbf{V} está relacionada às condições de identificabilidade de \mathbf{U} conforme abordado na Seção 6.5. Em particular, se uma matriz \mathbf{V} particular garantir uma determinada condição de identificabilidade no problema original (7.41), então essa matriz deverá garantir a mesma condição no problema (7.49).

7.4.3 Contrastes de diagonalização simples

Com base no problema (7.49) remetido às fontes estimadas \mathbf{y} , define-se o contraste ortogonal de diagonalização simples

$$\phi_{\text{DS},1}^{\circ}[\mathbf{y}] = \text{off}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}})), \quad (7.50)$$

cuja otimização segundo

$$\begin{array}{l} \text{minimize} \quad \phi_{\text{DS},1}^{\circ}[\mathbf{y}], \\ \widetilde{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}^{N \times N} \\ \widetilde{\mathbf{W}}^{-1} = \widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}} \end{array} \quad (7.51)$$

com $\mathbf{y} = \widetilde{\mathbf{W}}\tilde{\mathbf{x}}$, equivale à diagonalização da matriz de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ por $\widetilde{\mathbf{W}}$ ortogonal. A seguir, aborda-se uma maneira diferente de formular o problema (7.51) com base em propriedades da matriz de quadricovariância considerada no contraste (7.50).

Inicialmente, calcula-se o quadrado da norma de Frobenius⁶ de $\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}})$ como

$$\|\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}})\|_{\text{F}}^2 = \text{tr}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}}) \mathbf{Q}_{\mathbf{y}}^{\text{T}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}})).$$

Substituindo-se (7.48) com $\overline{\mathbf{V}} = \mathbf{V}$ nessa expressão, tem-se

$$\|\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}})\|_{\text{F}}^2 = \text{tr}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}}\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}^{\text{T}}(\mathbf{V})\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}}) = \|\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})\|_{\text{F}}^2, \quad (7.53)$$

em que na última igualdade consideraram-se a ortogonalidade de $\widetilde{\mathbf{W}}$ e a invariância do traço a permutações cíclicas do produto sobre o qual é tomado (GOLUB; VAN LOAN, 2013). De acordo com (7.53), o quadrado da norma de Frobenius de $\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}})$ é constante com a variação de $\widetilde{\mathbf{W}}$ ortogonal — desde que \mathbf{V} independa de $\widetilde{\mathbf{W}}$. Genericamente, também é válida a igualdade de somas de quadrados dada por⁷

$$\|\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}})\|_{\text{F}}^2 = \text{off}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}})) + \text{ddiag}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}})), \quad (7.55)$$

em que $\text{ddiag}(\cdot)$ denota a soma dos quadrados dos elementos da diagonal principal da matriz considerada. O termo do lado esquerdo de (7.55) é constante com a variação de $\widetilde{\mathbf{W}}$ sob a hipótese de que \mathbf{V} independe de $\widetilde{\mathbf{W}}$. Logo, tem-se que a minimização do primeiro

⁶ A norma de Frobenius de uma matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é definida (GOLUB; VAN LOAN, 2013) como

$$\|\mathbf{A}\|_{\text{F}} = \sqrt{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [\mathbf{A}]_{i,j}^2} = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{A}^{\text{T}}\mathbf{A})}. \quad (7.52)$$

⁷ A soma dos quadrados dos elementos da diagonal principal de $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é definida como

$$\text{ddiag}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^N [\mathbf{A}]_{i,i}^2. \quad (7.54)$$

termo do lado direito equivale à maximização do segundo termo desse lado. Pode-se então expressar o problema (7.51) de forma equivalente como

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{minimize } \phi_{\text{DS},2}^{\circ}[\mathbf{y}], \\ \widetilde{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}^{N \times N} \\ \widetilde{\mathbf{W}}^{-1} = \widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}} \end{array}} \quad (7.56)$$

com o contraste alternativo de diagonalização simples dado por

$$\boxed{\phi_{\text{DS},2}^{\circ}[\mathbf{y}] = -\text{ddiag}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}}))}, \quad (7.57)$$

desde que \mathbf{V} independa de $\widetilde{\mathbf{W}}$.

Com base nos problemas equivalentes formulados nessa subseção, apresenta-se a seguir um contraste ortogonal para uma escolha particular de matriz de pesos e aborda-se sua validade sob as condições da Definição 7.2.

7.4.4 Contrastes para o FOBI

Conforme abordado ao final da Seção 6.5, no método de separação conhecido como FOBI (CARDOSO, 1990; MIETTINEN et al., 2015) considera-se a diagonalização da matriz de quadricovariância das misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$ adotando-se matriz de pesos identidade, *i.e.*, $\mathbf{V} = \mathbf{I}_N$. Com base nas expressões gerais (7.50) e (7.57), obtêm-se os seguintes contrastes equivalentes do FOBI.

Proposição 7.12. *O contraste ortogonal equivalente do FOBI é dado por*

$$\boxed{\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}] = \sum_{i,j \neq i,i} \left(\sum_{k=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,k} \right)^2 = \sum_{i,j \neq i,i} \left(\sum_{k=1}^N \mathcal{E}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,k} \right)^2}, \quad (7.58)$$

em que $\mathcal{E}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,k} = \text{E}[y_i y_j y_k^2]$ para $i, j, k = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$. Por sua vez, o contraste ortogonal alternativo do FOBI é dado por

$$\boxed{\phi_{\text{FOBI},2}^{\circ}[\mathbf{y}] = -\sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,i,j,j} \right)^2}. \quad (7.59)$$

Demonstração. Tomando-se (7.50) para $\mathbf{V} = \mathbf{I}_N$, define-se $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}] = \text{off}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\mathbf{I}_N))$. A partir da expressão geral (3.39) e da definição (3.36) consideradas para o vetor aleatório \mathbf{y} , obtém-se

$$\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}] = \text{off} \left(\sum_{k=1}^N \mathbf{Q}_{\mathbf{y}}^{k,k} \right) = \sum_{i,j \neq i,i} \left(\sum_{k=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,k} \right)^2. \quad (7.60)$$

Sob a restrição de \mathbf{y} com média nula e branqueado conforme abordado na Subseção 7.1.2, tem-se a partir de (2.30) que $\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,k} = \mathcal{E}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,k}$ para inteiros $i \neq j$ e podem-se substituir os

cumulantes por momentos em (7.60). Tomando-se agora (7.57) para $\mathbf{V} = \mathbf{I}_N$, define-se $\phi_{\text{FOBI},2}^{\circ}[\mathbf{y}] = -\text{ddiag}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\mathbf{V}))$. Novamente a partir de (3.39) e (3.36), chega-se a

$$\phi_{\text{FOBI},2}^{\circ}[\mathbf{y}] = -\text{ddiag}\left(\sum_{k=1}^N \mathbf{Q}_{\mathbf{y}}^{k,k}\right) = -\sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,i,j,j}\right)^2.$$

□

A seguir, verifica-se sob que condições $\phi_{\text{FOBI}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ é um contraste ortogonal, *i.e.*, satisfaz as propriedades de contraste da Definição 7.2 sob a restrição de que o parâmetro $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ seja ortogonal.

Exemplo 7.2. Seja o problema de separação com pré-processamento considerado na Figura 10-(b). Considera-se o contraste $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}]$ dado por (7.58). As condições da Definição 7.2 são verificadas para esse contraste ortogonal como segue:

- (i) Seja $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ uma matriz de permutação qualquer, correspondente ao mapeamento de permutação $\sigma : \{1, 2, \dots, N\} \rightarrow \{1, 2, \dots, N\}$. A partir de (7.58), obtém-se

$$\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{P}\mathbf{y}] = \sum_{i,j \neq i,i} \left(\sum_{k=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{\sigma(i),\sigma(j),\sigma(k),\sigma(k)}\right)^2.$$

Como σ é um mapeamento bijetor, os somatórios podem ser reescritos em relação aos índices permutados, obtendo-se

$$\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{P}\mathbf{y}] = \sum_{\sigma(i),\sigma(j) \neq \sigma(i),\sigma(i)} \left(\sum_{\sigma(k)=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{\sigma(i),\sigma(j),\sigma(k),\sigma(k)}\right)^2 = \phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}].$$

- (ii) Seja $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ uma matriz diagonal inversível. Sob a restrição $\text{E}[\mathbf{y}\mathbf{y}^T] = \mathbf{I}_N$, tem-se que as únicas mudanças de escala $\mathbf{A}\mathbf{y}$ permitidas em relação às fontes estimadas devem satisfazer $\mathbf{A}^2 = \mathbf{I}_N$. Em outras palavras, são permitidas apenas mudanças de sinal dos elementos do vetor aleatório \mathbf{y} . Seja a expressão em termos de momentos de $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}]$ dada em (7.58). Mantendo-se i e j fixos com $i \neq j$, tem-se

$$\sum_{k=1}^N \mathcal{E}_{\mathbf{A}\mathbf{y}}^{i,j,k,k} = \sum_{k=1}^N \mathcal{E}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,k} \quad \text{ou} \quad \sum_{k=1}^N \mathcal{E}_{\mathbf{A}\mathbf{y}}^{i,j,k,k} = -\sum_{k=1}^N \mathcal{E}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,k}$$

dependendo das mudanças de sinal de y_i e y_j . Como esse somatório é elevado ao quadrado para todos $i, j = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$, eventuais sinais negativos se cancelam e tem-se $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{A}\mathbf{y}] = \phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}]$.

- (iii) Se os N elementos de \mathbf{y} forem mutuamente independentes, então conforme a Proposição 2.5-(v.1) referente a cumulantes cruzados de partições independentes, tem-se $\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,k} = 0$ para $i, j, k = 1, 2, \dots, N$. Logo, a partir de (7.58) obtém-se nesse caso particular $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}] = 0$. Além disso, por esse contraste ser uma soma de quadrados, tem-se $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{A}\mathbf{y}] \geq 0$ para toda matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ortogonal.

- (iv) Finalmente, verifica-se se o valor mínimo $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}] = 0$ é assumido somente se \mathbf{y} corresponder a uma cópia das fontes conforme a Definição 7.1. Considerando-se (7.58), a igualdade $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}] = 0$ implica

$$\sum_{k=1}^N \mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,k} = 0 \quad (7.61)$$

para todos $i, j = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$. Agora, considera-se a relação entre fontes estimadas \mathbf{y} e fontes independentes normalizadas $\tilde{\mathbf{s}}$ dada por (7.42), *i. e.*, $\mathbf{y} = \widetilde{\mathbf{M}}\tilde{\mathbf{s}}$ com $\widetilde{\mathbf{M}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ortogonal de elementos $\widetilde{m}_{i,j} = [\widetilde{\mathbf{M}}]_{i,j}$. Com base na Proposição 2.5-(v.2), os cumulantes de \mathbf{y} podem ser expressos como

$$\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,k} = \sum_{p=1}^N \widetilde{m}_{i,p} \widetilde{m}_{j,p} \widetilde{m}_{k,p}^2 \mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{s}},4} \quad (7.62)$$

Substituindo-se essa expressão em (7.61), obtém-se

$$\sum_{k=1}^N \sum_{p=1}^N \widetilde{m}_{i,p} \widetilde{m}_{j,p} \widetilde{m}_{k,p}^2 \mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{s}},4} = 0 \Rightarrow \sum_{p=1}^N \widetilde{m}_{i,p} \widetilde{m}_{j,p} \mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{s}},4} \sum_{k=1}^N \widetilde{m}_{k,p}^2 = 0.$$

Como $\widetilde{\mathbf{M}}$ é ortogonal, tem-se que o somatório em k é igual a um. Obtém-se, portanto, a condição

$$\boxed{\sum_{p=1}^N \widetilde{m}_{i,p} \widetilde{m}_{j,p} \mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{s}},4} = 0,} \quad (7.63)$$

a ser satisfeita para todos $i, j = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$. A seguir, consideram-se dois casos coletivamente exaustivos.

- ◇ Se houver a separação adequada das fontes, então $\widetilde{\mathbf{M}} = \mathbf{A}\mathbf{P}$ com \mathbf{A} matriz diagonal tal que $\mathbf{A}^2 = \mathbf{I}_N$ e \mathbf{P} matriz de permutação. Nesse caso, tem-se

$$\widetilde{m}_{i,p} \widetilde{m}_{j,p} = 0$$

para todos $i, j, p = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$ e (7.63) é satisfeita.

- ◇ Se a separação das fontes é inadequada, então $\widetilde{\mathbf{M}} \neq \mathbf{A}\mathbf{P}$ e existem $i, j = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$ tais que

$$\widetilde{m}_{i,p} \widetilde{m}_{j,p} \neq 0$$

para $p \in \mathcal{I}_{i,j} \subset \{1, 2, \dots, N\}$ com $\mathcal{I}_{i,j} \neq \emptyset$, e

$$\widetilde{m}_{i,p} \widetilde{m}_{j,p} = 0$$

para $p \notin \mathcal{I}_{i,j}$. Nesse caso, (7.63) é satisfeita para o par (i, j) considerado se, e somente se, os autocumulantes de ordem quatro das fontes normalizadas $\mathcal{C}_{\tilde{\mathbf{s}},4}$ para $p \in \mathcal{I}_{i,j}$ forem iguais. Logo, pode-se ter $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}] = 0$ sob separação inadequada se, e somente se, duas ou mais fontes normalizadas possuírem autocumulantes de ordem quatro iguais.

Ao contrário das condições (i)–(iii), a condição (iv) não é satisfeita no caso geral. Para que $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}]$ seja um contraste ortogonal válido, *i.e.*, sua minimização garanta a separação adequada das fontes, é preciso restringi-lo aos casos em que (iv) seja satisfeita. Conforme abordado na análise da condição (iv), verificou-se que ela é satisfeita se, e somente se, todas as fontes possuírem autocumulantes de ordem quatro distintos. Portanto, pode-se afirmar que $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}]$ é um contraste ortogonal válido se, e somente se, duas ou mais fontes não possuírem autocumulantes de ordem quatro iguais. \triangleleft

A condição de validade do contraste $\phi_{\text{FOBI},1}^{\circ}[\mathbf{y}]$ equivale à condição de identificabilidade da matriz ortogonal de mistura \mathbf{U} do FOBI, considerada por sua vez na Proposição 6.4. Uma das vantagens trazidas pela associação de funções contraste aos métodos algébricos de separação é que essas funções permitem obter as condições de identificabilidade de \mathbf{U} sem recorrer à análise dos autovalores da matriz de quadricovariância das misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$ conforme feito na Seção 6.6. Basta verificar sob que condições o contraste equivalente ao método algébrico considerado é válido (CARDOSO, 1999).

7.4.5 Contrastes de diagonalização simultânea

Conforme abordado na Seção 6.6, a fim de garantir condições mais gerais de identificabilidade da matriz ortogonal de mistura, uma alternativa é considerar a diagonalização simultânea de matrizes de quadricovariância tomadas sobre diferentes matrizes de pesos (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). A seguir, esse problema é formulado do ponto de vista de otimização tomando por base o caso de diagonalização de uma única matriz considerado na Subseção 7.4.3.

Com base no problema (7.49) remetido às fontes estimadas \mathbf{y} , e conforme Cardoso e Souloumiac (1993), Cardoso (1999), define-se o contraste ortogonal de diagonalização simultânea

$$\phi_{\text{DC},1}^{\circ}[\mathbf{y}] = \sum_{p=1}^M \text{off}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}'_p\widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}})), \quad (7.64)$$

em que $\mathbf{V}'_1, \mathbf{V}'_2, \dots, \mathbf{V}'_M \in \mathbb{R}^{N \times N}$, com $M \geq N$, corresponde a uma escolha de matrizes de pesos feita, idealmente, em observância às condições de identificabilidade abordadas na Proposição 6.8. A otimização desse contraste segundo

$$\begin{array}{l} \text{minimize} \quad \phi_{\text{DC},1}^{\circ}[\mathbf{y}], \\ \widetilde{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}^{N \times N} \\ \widetilde{\mathbf{W}}^{-1} = \widetilde{\mathbf{W}}^{\text{T}} \end{array} \quad (7.65)$$

com $\mathbf{y} = \widetilde{\mathbf{W}}\tilde{\mathbf{x}}$, equivale à diagonalização simultânea das matrizes de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}'_1), \mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}'_2), \dots, \mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}'_M)$ por uma mesma matriz ortogonal $\widetilde{\mathbf{W}}$. Aborda-se a seguir uma maneira diferente de formular o problema (7.65) com base em propriedades das matrizes de quadricovariância consideradas no contraste (7.64).

Analogamente a (7.53), o quadrado da norma de Frobenius da matriz $\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}'_p\widetilde{\mathbf{W}}^\top)$ satisfaz a igualdade

$$\|\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}'_p\widetilde{\mathbf{W}}^\top)\|_F^2 = \|\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}'_p)\|_F^2$$

para $p = 1, 2, \dots, M$. De acordo com essa expressão, a norma de Frobenius da matriz $\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}'_p\widetilde{\mathbf{W}}^\top)$ é constante com a variação de $\widetilde{\mathbf{W}}$ ortogonal — desde que \mathbf{V}'_p independa de $\widetilde{\mathbf{W}}$. Considerando-se a diagonalização simultânea para $p = 1, 2, \dots, M$, verifica-se que também é válida a igualdade de somas de quadrados dada por

$$\sum_{p=1}^M \|\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}'_p\widetilde{\mathbf{W}}^\top)\|_F^2 = \sum_{p=1}^M \text{off}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}'_p\widetilde{\mathbf{W}}^\top)) + \sum_{p=1}^M \text{ddiag}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}'_p\widetilde{\mathbf{W}}^\top)). \quad (7.66)$$

Similarmente ao caso de diagonalização simples, o termo do lado esquerdo de (7.66) é constante com a variação de $\widetilde{\mathbf{W}}$ sob a hipótese de que \mathbf{V}'_p independe de $\widetilde{\mathbf{W}}$ para $p = 1, 2, \dots, N$. Logo, a minimização do primeiro termo do lado direito equivale à maximização do segundo termo desse lado. Pode-se então colocar o problema (7.65) de forma equivalente como

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{minimize} \quad \phi_{\text{DC},2}^\circ[\mathbf{y}], \\ \widetilde{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}^{N \times N} \\ \widetilde{\mathbf{W}}^{-1} = \widetilde{\mathbf{W}}^\top \end{array}} \quad (7.67)$$

com o contraste alternativo de diagonalização conjunta dado por

$$\boxed{\phi_{\text{DC},2}^\circ[\mathbf{y}] = - \sum_{p=1}^M \text{ddiag}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\widetilde{\mathbf{W}}\mathbf{V}'_p\widetilde{\mathbf{W}}^\top)),} \quad (7.68)$$

desde que $\mathbf{V}'_1, \mathbf{V}'_2, \dots, \mathbf{V}'_M$ independam de $\widetilde{\mathbf{W}}$.

Apresenta-se a seguir um contraste ortogonal de diagonalização simultânea para uma escolha particular de matriz de pesos e aborda-se sua validade sob as condições da Definição 7.2.

7.4.6 Contraste para o JADE

Conforme abordado ao final da Seção 6.6, nos métodos de separação conhecidos como JADE ou AJD (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; CARDOSO, 1999; MIETTINEN et al., 2015) considera-se a diagonalização simultânea de um conjunto de matrizes de quadricovariância das misturas branqueadas $\tilde{\mathbf{x}}$. De modo a garantir a completude da representação matricial conforme a Proposição 6.8, escolhem-se usualmente matrizes de pesos que gerem um subespaço vetorial que contenha a imagem do operador de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\tilde{\mathbf{x}}}$. A fim de exprimir um contraste ortogonal para o JADE e considerando-se a abordagem clássica de Cardoso (1999), é conveniente considerar as N^2 matrizes de pesos dadas por

$$\boxed{\mathbf{V}'_{i,j} = \widetilde{\mathbf{W}}^\top \mathbf{E}_{i,j} \widetilde{\mathbf{W}}} \quad (7.69)$$

para $i, j = 1, 2, \dots, N$ com

$$\mathbf{E}_{i,j} = \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^\top, \quad (7.70)$$

em que $\mathbf{e}_p \in \mathbb{R}^N$, para $p = 1, 2, \dots, N$, denota um vetor da base canônica do \mathbb{R}^N com elemento igual a um na p -ésima posição e demais elementos nulos. A respeito dessa escolha de matrizes de pesos, é importante notar que:

- ◇ Cada matriz $\mathbf{E}_{i,j}$ possui elemento igual a um na posição (i, j) e elementos nulos nas demais posições. A sequência $\{\mathbf{E}_{i,j} \mid i, j = 1, 2, \dots, N\}$, com N^2 matrizes, corresponde à base canônica do espaço de matrizes $\mathbb{R}^{N \times N}$ (GOLUB; VAN LOAN, 2013). Como esse espaço sempre conterá a imagem do operador de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\underline{x}}$, a diagonalização simultânea de $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{E}_{1,1}), \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{E}_{1,2}), \dots, \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{E}_{N,N})$ irá satisfazer as condições mais amplas de identificabilidade conforme a Proposição 6.8.
- ◇ Entretanto, a seguir considera-se por conveniência a diagonalização simultânea de N^2 matrizes de quadricovariância $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_{1,1}), \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_{1,2}), \dots, \mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}'_{N,N})$ com matrizes de pesos $\mathbf{V}'_{i,j}$ da forma (7.69). Resta saber se, mesmo variando $\widetilde{\mathbf{W}}$, a sequência de N^2 matrizes dada por $\{\mathbf{V}'_{i,j} \mid i, j = 1, 2, \dots, N\}$ também corresponde a uma base do $\mathbb{R}^{N \times N}$ e satisfaz as condições da Proposição 6.8. Com base na abordagem algébrica considerada na Subseção 6.6.2 e no produto interno usual do $\mathbb{R}^{N \times N}$ denotado por $\langle \cdot, \cdot \rangle$ e definido em (6.31), pode-se mostrar que

$$\langle \mathbf{V}'_{i,j}, \mathbf{V}'_{k,\ell} \rangle = \delta_{i,k} \delta_{j,\ell}.$$

Portanto, a sequência $\{\mathbf{V}'_{i,j} \mid i, j = 1, 2, \dots, N\}$ é ortonormal e também corresponde a uma base do $\mathbb{R}^{N \times N}$.

Com base na expressão geral (7.64) e considerando-se a escolha de matrizes de pesos conforme (7.69), obtém-se o seguinte contraste equivalente do JADE (CARDOSO, 1999).

Proposição 7.13. *O contraste ortogonal equivalente do JADE é dado por*

$$\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}] = \sum_{i,j,k,\ell \neq i,i,k,\ell} (\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell})^2. \quad (7.71)$$

Demonstração. Tomando-se (7.64) para as matrizes de pesos $\mathbf{V}'_{k,\ell} = \widetilde{\mathbf{W}}^\top \mathbf{E}_{k,\ell} \widetilde{\mathbf{W}}$, define-se

$$\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}] = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \text{off}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}(\mathbf{E}_{k,\ell})).$$

A partir da expressão geral (3.39) e da definição (3.36) consideradas para o vetor aleatório \mathbf{y} , bem como da definição (7.70), obtém-se

$$\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}] = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \text{off}(\mathbf{Q}_{\mathbf{y}}^{k,\ell}) = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell})^2 = \sum_{i,j,k,\ell \neq i,i,k,\ell} (\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell})^2.$$

□

Como as matrizes de pesos $\mathbf{V}'_{k,\ell}$ dependem da matriz ortogonal de separação $\widetilde{\mathbf{W}}$, não é evidente a obtenção de um contraste alternativo a (7.71) como feito na Proposição 7.12 para o FOBI. A seguir, verifica-se sob que condições $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ é um contraste ortogonal.

Exemplo 7.3. Seja o problema de separação considerado na Figura 10-(b). Considera-se o contraste $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ dado por (7.71). As condições da Definição 7.2 são verificadas para esse contraste ortogonal como segue:

- (i) A verificação da validade dessa condição é similar à do caso considerado no Exemplo 7.2; aqui, também tem-se $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{P}\mathbf{y}] = \phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ para $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ uma matriz de permutação qualquer.
- (ii) Seja $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ uma matriz diagonal inversível com $\mathbf{A}^2 = \mathbf{I}_N$. Pela propriedade de multilinearidade dos cumulantes dada na Proposição 2.5-(i), tem-se que as mudanças de sinais das fontes estimadas implicam

$$\mathcal{C}_{\mathbf{A}\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell} = \mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell} \quad \text{ou} \quad \mathcal{C}_{\mathbf{A}\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell} = -\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell}$$

dependendo das mudanças de sinal de y_i, y_j, y_k, y_ℓ com $i \neq j$. Como cada um desses cumulantes é elevado ao quadrado em (7.71), eventuais sinais negativos se cancelam e tem-se $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{A}\mathbf{y}] = \phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}]$.

- (iii) Se os N elementos de \mathbf{y} forem mutuamente independentes, então conforme a Proposição 2.5-(v.1) referente a cumulantes cruzados de partições independentes, tem-se $\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell} = 0$ para $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$. Logo, a partir de (7.71), obtém-se nesse caso particular $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}] = 0$. Além disso, por esse contraste ser uma soma de quadrados de cumulantes, tem-se $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{A}\mathbf{y}] \geq 0$ para toda matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ortogonal.
- (iv) Finalmente, verifica-se se o valor mínimo $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}] = 0$ é assumido somente se \mathbf{y} corresponder a uma cópia das fontes conforme a Definição 7.1. Considerando-se (7.71), a igualdade $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}] = 0$ implica

$$\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell} = 0 \tag{7.72}$$

para todos $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$. Analogamente a (7.62), os cumulantes de (7.72) podem ser expressos como

$$\mathcal{C}_{\mathbf{y}}^{i,j,k,\ell} = \sum_{p=1}^N \widetilde{m}_{i,p} \widetilde{m}_{j,p} \widetilde{m}_{k,p} \widetilde{m}_{\ell,p} \mathcal{C}_{\widetilde{\mathbf{s}}_p,4},$$

em que $\mathbf{y} = \widetilde{\mathbf{M}}\widetilde{\mathbf{s}}$ com $\widetilde{\mathbf{M}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ortogonal de elementos $\widetilde{m}_{i,j} = [\widetilde{\mathbf{M}}]_{i,j}$. Resulta a condição

$$\boxed{\sum_{p=1}^N \widetilde{m}_{i,p} \widetilde{m}_{j,p} \widetilde{m}_{k,p} \widetilde{m}_{\ell,p} \mathcal{C}_{\widetilde{\mathbf{s}}_p,4} = 0,} \tag{7.73}$$

a ser satisfeita para todos $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$. A seguir, consideram-se dois casos coletivamente exaustivos.

- ◇ Se houver a separação adequada das fontes, então $\widetilde{\mathbf{M}} = \mathbf{A}\mathbf{P}$ com \mathbf{A} matriz diagonal tal que $\mathbf{A}^2 = \mathbf{I}_N$ e \mathbf{P} matriz de permutação. Nesse caso, tem-se

$$\widetilde{m}_{i,p}\widetilde{m}_{j,p} = 0$$

para todos $i, j, p = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$ e (7.73) é satisfeita.

- ◇ Se a separação das fontes é inadequada, então $\widetilde{\mathbf{M}} \neq \mathbf{A}\mathbf{P}$ e existem $i, j = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq j$ tais que

$$\widetilde{m}_{i,p}\widetilde{m}_{j,p} \neq 0$$

para $p \in \mathcal{I}_{i,j} \subset \{1, 2, \dots, N\}$ com $\mathcal{I}_{i,j} \neq \emptyset$, e

$$\widetilde{m}_{i,p}\widetilde{m}_{j,p} = 0$$

para $p \notin \mathcal{I}_{i,j}$. Diferentemente de (7.63), nesse caso (7.73) é satisfeita para o par (i, j) considerado se, e somente se, $\mathcal{C}_{\bar{s}_p, 4} = 0$ para $p \in \mathcal{I}_{i,j}$. O conjunto $\mathcal{I}_{i,j}$ deverá ter no mínimo dois elementos, dada a ortogonalidade de $\widetilde{\mathbf{M}}$. Logo, pode-se ter $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}] = 0$ sob separação inadequada se, e somente se, duas ou mais fontes possuírem autocumulantes de ordem quatro nulos.

Ao contrário das condições (i)–(iii), a condição (iv) não é satisfeita no caso geral. Para que $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ seja um contraste ortogonal válido, *i.e.*, sua minimização garanta a separação adequada das fontes, é preciso restringi-lo aos casos em que (iv) seja satisfeita. Conforme abordado na análise da condição (iv), verificou-se que ela é satisfeita se, e somente se, no máximo uma fonte possuir autocumulante de ordem quatro nulo. Portanto, pode-se afirmar que $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ é um contraste ortogonal válido se, e somente se, essa condição valer. \triangleleft

A condição de validade do contraste $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ equivale à condição de identificabilidade da matriz ortogonal de mistura \mathbf{U} por diagonalização simultânea considerada na Proposição 6.8. Na literatura, foi por meio do caminho equivalente dado no Exemplo 7.3 que a condição de identificabilidade para o JADE foi demonstrada (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; CARDOSO, 1999; MIETTINEN et al., 2015). Na Subseção 6.6.3, mostrou-se que não é necessário recorrer a contrastes para obter essa condição, dado que ela provém da estrutura algébrica das matrizes de quadricovariância consideradas.

7.5 Conclusões

Nesse capítulo, foram abordados critérios clássicos de separação por independência e suas relações, com o intuito de complementar, sob um ponto de vista de otimização, a

interpretação dos métodos algébricos considerados no Capítulo 6. A resolução do problema de separação por otimização de contraste foi proposta pela primeira vez por Comon (1992) para o modelo de sistema misturador linear e instantâneo. Desde então, essa mesma abordagem foi aplicada à busca de soluções para modelos mais elaborados, como no caso de sistemas misturadores convolutivos (COMON, 1996; MOREAU; PESQUET, 1997; COMON, 2004). No entanto, a origem do conceito de contraste se remete ao trabalho anterior de Donoho (1981), cuja ideia foi desenvolvida no contexto de desconvolução cega de canais de comunicação com uma entrada e uma saída (SISO, do inglês *single-input and single-output*) (COMON; JUTTEN, 2010).

Na Seção 7.1, foram apresentadas definições usuais de contrastes. As definições foram revisitadas detalhadamente, de modo a sustentar sua posterior aplicação às seções seguintes. Por meio do exemplo apresentado na Subseção 7.1.4, foi possível explicitar questões referentes a contrastes que não são evidentes como, por exemplo, a dependência dessas funções objetivo com a distribuição das fontes estimadas. Em particular, observou-se que a validade de um contraste, conforme as condições da Definição 7.2, está atrelada à distribuição das fontes independentes. Há, portanto, condições que devem ser satisfeitas e observadas quanto a essa distribuição para que se possa garantir que a minimização de um determinado contraste leve à adequada separação das fontes.

Na Seção 7.2, foram revisitados os contrastes entrópicos baseados em independência usualmente considerados na literatura de separação cega de fontes. Inspirando-se nos trabalhos de Comon (1994), Cardoso (1999), ênfase foi dada à interpretação desses contrastes e do significado de sua minimização face às condições de separabilidade teóricas abordadas no Capítulo 5. A relação entre os diferentes contrastes entrópicos, resumida na Subseção 7.2.5, permite compreender os princípios que regem cada um dos contrastes e o caminho que liga o contraste mais geral de máxima verossimilhança até os contrastes entrópicos ortogonais.

Na Seção 7.3, abordou-se a representação aproximada de contrastes entrópicos baseados em independência. Consideraram-se, particularmente, aproximações por meio de expansões de funções densidade de probabilidade em termos de cumulantes. Embora essas aproximações sejam relativamente complicadas de descrever algebricamente, principalmente para o caso multivariado de interesse, elas fornecem versões baseadas em cumulantes dos contrastes entrópicos considerados na Seção 7.2. Por meio dessas versões aproximadas, pôde-se compreender como os princípios de separação se manifestam quando a ordem da descrição estatística é limitada, *i.e.*, quando não se aplicam condições sobre funções densidade de probabilidade mas, sim, sobre cumulantes ou momentos.

Existem outras formas de fazer aproximações de contrastes que não utilizando expansões de funções densidade de probabilidade. Na literatura, alternativas vêm sendo propostas para lidar com algumas características desvantajosas de aproximações baseadas em cumulantes, como alto custo computacional e complexidade na estimação (principalmente de cumulantes

de ordem elevada), baixa robustez a *outliers*, entre outros (HYVÄRINEN; OJA, 2000). Entre essas alternativas, cabe destacar a aproximação de Hyvärinen e Oja (2000) para o contraste ortogonal entrópico de máxima negentropia, feita com uso de funções não lineares particulares. Trata-se de uma aproximação relevante na literatura de separação de fontes, e que consiste na base dos algoritmos amplamente conhecidos como FastICA (HYVÄRINEN; KARHUNEN; OJA, 2001).

Por fim, na Seção 7.4, relacionou-se a abordagem de separação por meio da otimização com os métodos algébricos de separação considerados no Capítulo 6. Inspirando-se em Cardoso (1999), foi possível formular o problema de diagonalização da matriz de quadricovariância como um problema equivalente de otimização. Com isso, evidenciou-se a relação que existe entre as condições de identificabilidade e a completude da representação matricial, abordadas respectivamente nas Seções 6.5 e 6.6, e as condições de validade dos contrastes de acordo com a Definição 7.2. Em particular, mostrou-se que as condições de identificabilidade da matriz ortogonal de mistura podem também ser obtidas por meio das condições de validade dos contrastes equivalentes aos métodos algébricos. Foi assim que as condições de identificabilidade do JADE foram demonstradas na literatura (CARDOSO, 1999). Porém, na Subseção 6.6.3, mostrou-se que esse não é o único caminho para obter essas condições.

Destaca-se, quanto à Seção 7.4, que a otimização sobre o contraste do JADE é feita sobre um conjunto aparentemente menor de cumulantes cruzados do que, por exemplo, a otimização sobre a versão aproximada do contraste ortogonal de máxima negentropia dada pela primeira igualdade em (7.34). Esse fato é discutido em maiores detalhes por Cardoso (1999). Devido à propriedade de simetria dos cumulantes de um vetor aleatório, pode-se verificar que ambos $\phi_{\text{JADE}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ e a versão aproximada de $\phi_{\text{MN}}^{\circ}[\mathbf{y}]$ levam em conta todos os cumulantes cruzados das fontes estimadas que possam ser numericamente distintos. O conjunto considerado pelo contraste do JADE apenas aparenta ser menor, pois nele já estão sendo consideradas certas redundâncias da simetria dos cumulantes. A vantagem de considerar o contraste do JADE é que a sua otimização pode ser feita do ponto de vista algébrico considerado no Capítulo 6. Os principais métodos numéricos que permitem realizar a otimização do contraste do JADE de maneira eficiente são abordados no Apêndice C.

8 CONCLUSÃO

Nessa tese, conceitos teóricos fundamentais foram trazidos à tona e revisitados de modo a embasar interpretações e o entendimento consistente de técnicas de separação cega de fontes (BSS). Particularmente, duas questões teóricas acerca do problema de BSS foram abordadas, revisitadas e interpretadas: a separabilidade das fontes e a identificabilidade do sistema misturador. Ao longo da tese, foi possível notar que a abordagem desses assuntos, embora relevante, não é evidente e exige ferramentas matemáticas sofisticadas. Apesar de se tratar de questões teóricas antes consideradas na literatura de BSS, ainda há muito a ser interpretado sobre elas a fim de auxiliar e embasar o estudo de problemas de separação envolvendo modelos de mistura mais sofisticados.

Neste capítulo final, apresentam-se as conclusões da tese. Na Seção 8.1, elencam-se os tópicos principais do trabalho e apresentam-se conclusões e contribuições a eles relacionadas. Na Seção 8.2, apresentam-se perspectivas de trabalhos futuros.

8.1 Conclusões e contribuições

A seguir, apresentam-se conclusões e contribuições relativas a quatro tópicos centrais abordados nesse trabalho:

◇ **Abordagem tensorial aplicada à representação de cumulantes.**

No Capítulo 3, apresentou-se uma abordagem tensorial aplicada à representação de cumulantes. Estabeleceu-se, do ponto de vista conceitual, o papel de cumulantes como ferramentas úteis em processamento estatístico de sinais. Além disso, obtiveram-se representações matriciais consistentes de estatísticas de ordem superior. Ao longo do capítulo, enfatizou-se a conveniência que a representação tensorial traz à abordagem de cumulantes de ordem superior. Embora tensores sejam ferramentas matemáticas capazes de capturar a essência das transformações multilineares (LANDSBERG, 2012), como é o caso dos cumulantes, ainda há muitos problemas teóricos em aberto acerca de decomposições tensoriais, sua existência e unicidade (COMON et al., 2008; COMON, 2014). Sendo assim, a aplicação direta de tensores em processamento de sinais baseado em cumulantes, além de continuar sendo estudada (FERNANDES; FAVIER; MOTA, 2008; FERNANDES; COMON; FAVIER, 2010), ainda inspira cuidados e possui limitações (VAN EEGHEM; SØRENSEN; DE LATHAUWER, 2017; VAN EEGHEM et al., 2018). Apesar disso, o uso da representação tensorial é extremamente útil à compreensão de propriedades algébricas de cumulantes, bem como à obtenção de representações simplificadas e convenientes do ponto de vista prático.

Contribuições: Por meio dessa abordagem, evidenciou-se como e por que o uso de tensores permite obter representações matriciais para cumulantes de ordem superior. Ao tratar dos casos de ordens dois e três antes de ordem quatro, explicitou-se como os conceitos teóricos podem ser generalizados. Com base na representação tensorial, obteve-se um funcional linear equivalente e, posteriormente, a representação matricial foi obtida de maneira natural. Em particular, destacou-se que a obtenção da matriz de quadricovariância a partir do tensor de cumulantes de ordem quatro não é direta. De acordo com o esquema resumido apresentado na Figura 3, foram necessários passos adicionais envolvendo a definição de um operador linear associado e a consideração das matrizes pertencentes a seu espaço imagem. A utilização das representações matriciais em problemas cuja abordagem requer estatísticas de ordem superior foi motivada a partir da consideração da diagonalização dessas representações. Destacou-se a dificuldade teórica existente no problema de diagonalização do tensor de cumulantes e abordou-se a relação dessa diagonalização com a imposição de não correlação em ordem superior.

◇ **Formulação do problema de BSS e interpretação das condições de separabilidade das fontes.**

No Capítulo 4, o problema de BSS foi inicialmente apresentado de forma geral e posteriormente particularizado para o modelo de sistema misturador linear e instantâneo. Embora não se trate de um modelo realista em alguns casos práticos, acredita-se que a compreensão do problema de separação de fontes a partir desse modelo é um ponto inicial fundamental para o entendimento aprofundado de modelos mais elaborados e de soluções avançadas (CARDOSO, 1998). A hipótese de fontes iid, em conjunto com o modelo de sistema misturador linear e instantâneo, facilita a formulação do problema de separação. Abordou-se a hipótese de independência espacial mútua das fontes, de modo a viabilizar algum procedimento de separação cega. De fato, em sistemas físicos, muitas vezes essa hipótese é razoável para as fontes que se deseja separar. No entanto, ela não precisa ser exatamente verdadeira na prática para ser considerada e permitir a separação adequada das fontes (HYVÄRINEN; OJA, 2000; COMON; JUTTEN, 2010). Um resumo dos diferentes modelos para sistemas misturadores e fontes, apresentado na Tabela 1, permitiu sedimentar os conceitos teóricos e conhecimentos empregados ao longo do capítulo.

No Capítulo 5, os limites teóricos e os princípios de funcionamento de soluções de separação por imposição de independência, esclarecidos por Comon (1994) graças ao teorema de Darmois–Skitovich (DARMOIS, 1953), foram revisitados. Esse teorema estabelece a relação muito pouco evidente entre independência estatística e não gaussianidade de variáveis aleatórias. Até a atualidade, o teorema de Darmois–Skitovich é assunto de pesquisa em processamento de sinais e estatística (THEIS, 2004; MAZUR,

2013). Em separação cega de fontes, esse teorema já foi estendido de diferentes formas visando a sua posterior aplicação à obtenção de condições de separabilidade em problemas envolvendo fontes complexas (ERIKSSON; KOIVUNEN, 2006) ou tipos particulares de misturas não lineares (TALEB; JUTTEN, 1999; ERIKSSON; KOIVUNEN, 2002; JUTTEN; BABAIE-ZADEH; HOSSEINI, 2004; ERIKSSON; KOIVUNEN, 2005), por exemplo.

A obtenção de condições de separabilidade para fontes iid e mutuamente independentes no espaço, a partir do teorema de separabilidade das fontes, inspirou uma ramificação no conjunto de técnicas de separação cega de fontes para misturas lineares e instantâneas. Basicamente, houve uma subdivisão em duas vertentes: (i) separação de fontes iid, independentes e não gaussianas, e (ii) separação de fontes não iid, independentes e gaussianas. Neste trabalho, enfoque foi dado ao primeiro caso.

Contribuições: Na formulação do problema de BSS, ressaltou-se a relevância do modelo de mistura considerado. Enfatizou-se a influência do modelo adotado nos métodos considerados para resolução do problema inverso. Interpretou-se e revisitou-se o teorema de separabilidade das fontes com base no teorema de Darmois–Skitovich aplicado ao contexto de separação por imposição de independência. Apesar de envolver conceitos teóricos relativamente avançados, a compreensão do teorema de separabilidade é essencial à obtenção de soluções e métodos de BSS por imposição de independência.

◇ **Interpretação da completude da representação matricial de cumulantes no contexto de BSS.**

No Capítulo 6, vislumbrando-se o entendimento de técnicas de análise de componentes independentes (ICA) propostas na literatura, abordaram-se os princípios da separação cega de fontes via imposição de independência. Em particular, abordaram-se métodos de separação baseados em propriedades algébricas de cumulantes. Trata-se de fundamentos clássicos na literatura de BSS (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993; CARDOSO, 1999; DE LATHAUWER, 1997), mas que nesse capítulo foram revisitados e reinterpretados com base no arcabouço teórico considerado nos Capítulos 2, 3 e 5. Embora o assunto geral do capítulo já tenha sido abordado na literatura de BSS, ele reserva questões teóricas e interpretações a serem ainda consideradas e revisitadas. De fato, tanto extensões — *e.g.*, para dados tensoriais ou misturas convolutivas — quanto particularizações dos métodos considerados nesse capítulo continuam atraindo interesse científico; veja, por exemplo, os trabalhos de Miettinen et al. (2013), Miettinen et al. (2015), Maurandi e Moreau (2017), Van Eeghem, Sørensen e De Lathauwer (2017), Virta et al. (2018), Van Eeghem et al. (2018).

Atenção especial foi dada à completude da representação matricial utilizada na descrição das estatísticas de ordem quatro das misturas branqueadas. Em particular,

interpretou-se a identificabilidade da matriz ortogonal de mistura como uma decorrência, na aplicação particular de separação cega, da completude da representação matricial dos cumulantes de ordem quatro abordada inicialmente no Capítulo 3. Com base no trabalho de Cardoso (1999), inicialmente mostrou-se como as condições de identificabilidade podem ser ampliadas a partir da diagonalização simultânea das automatrizes do operador de quadricovariância. Posteriormente, após uma exposição algébrica sobre espaços vetoriais relacionados a esse operador, foi possível demonstrar que outras matrizes de pesos podem ser consideradas para compor um conjunto de matrizes de quadricovariância completo, *i.e.*, que mantenha as condições mais amplas de identificabilidade.

Contribuições: A partir da aplicação das representações matriciais de cumulantes ao problema de BSS, foi possível evidenciar a influência que a questão genérica da completude da representação matricial possui no problema particular de separação. Ressaltou-se que a completude se manifesta, na aplicação de BSS, por meio de condições de identificabilidade da matriz ortogonal de mistura. Destaca-se que as Subseções 6.6.2 e 6.6.3, e em particular a Proposição 6.7 e sua demonstração, são contribuições originais desse trabalho. Trata-se de uma formalização e, até certo ponto, extensão dos comentários feitos por Cardoso e Souloumiac (1993), Cardoso (1999) sobre a escolha de matrizes de pesos alternativas que garantam a completude da representação matricial. De fato, os conceitos teóricos necessários à compreensão dos métodos algébricos de separação podem parecer complicados e pouco acessíveis, o que pode desencorajar a sua utilização. No entanto, acredita-se que a exposição feita nesse capítulo, bem como as interpretações e relações apresentadas, facilitem a aplicação desses métodos a problemas de estimação cega que eventualmente ainda não tenham sido abordados dessa forma.

◇ **Relação entre a completude da representação matricial e critérios de separação baseados em independência.**

No Capítulo 7, foram abordados critérios clássicos de separação por independência e suas relações. Com isso, buscou-se complementar, sob um ponto de vista de otimização, a interpretação dos métodos algébricos de separação considerados no Capítulo 6. Inicialmente, foram apresentadas definições usuais de contrastes, enfatizando-se que a validade de um contraste está atrelada à distribuição das fontes independentes. Em seguida, os contrastes entrópicos baseados em independência foram revisitados. As relações entre esses contrastes foram abordadas seguindo o caminho esquematizado de maneira sintética na Figura 25. Revisitaram-se, também, versões aproximadas dos contrastes entrópicos baseadas em cumulantes. A partir do esquema resumido apresentado na Figura 26, foi possível não apenas destacar as relações entre os contrastes aproximados e suas versões entrópicas, mas também explicitar os diferentes

princípios de separação que regem cada contraste baseado em cumulantes.

Como ponto principal do Capítulo 7, relacionou-se na Seção 7.4 a abordagem de separação por meio da otimização de contrastes com os métodos algébricos de separação considerados no Capítulo 6. Inspirando-se em Cardoso (1999), formulou-se o problema de diagonalização da matriz de quadricovariância como um problema equivalente de otimização. Em particular, mostrou-se que as condições de identificabilidade da matriz ortogonal de mistura podem também ser obtidas por meio das condições de validade dos contrastes equivalentes aos métodos algébricos. Foi assim que as condições de identificabilidade a partir do uso de matrizes de quadricovariância foram demonstradas na literatura (CARDOSO, 1999). Porém, conforme a abordagem algébrica do Capítulo 6, verifica-se que esse não é o único caminho para obter essas condições.

Contribuições: A relação entre os diferentes contrastes entrópicos, revisitada nesse trabalho, permitiu compreender os princípios de separação que regem cada um dos contrastes e o caminho que liga o contraste mais geral de máxima verossimilhança até os contrastes entrópicos ortogonais. A abordagem dos contrastes aproximados permitiu compreender como os princípios de separação se manifestam quando a ordem da descrição estatística é limitada, *i.e.*, quando não se aplicam condições sobre funções densidade de probabilidade mas, sim, sobre cumulantes ou momentos. A interpretação própria dos contrastes, sempre sob uma ótica de separabilidade baseada nas condições abordadas Capítulo 5, consiste em uma contribuição deste capítulo. Por fim, a formulação do problema de diagonalização da matriz de quadricovariância como um problema equivalente de otimização permitiu fazer uma ligação importante entre os Capítulos 3, 6 e 7. Essa ligação se deu a partir das relações feitas entre as condições de identificabilidade, a completude da representação matricial e as condições de validade dos contrastes. Trata-se de algo pouco comentado na literatura, mas que reforça a consistência das contribuições da tese e dá inspiração para a continuidade do trabalho.

Apesar de vir sendo estudado desde a década de 1980, muito ainda precisa ser compreendido e melhor interpretado em relação ao problema de BSS baseado em imposição de independência, principalmente do ponto de vista teórico. Mesmo restringindo-se à consideração do modelo clássico do problema abordado no Capítulo 4, e a métodos baseados em propriedades algébricas de cumulantes, ainda há interpretações e relações a serem feitas. Isso motiva a apresentação, a seguir, de perspectivas de trabalhos futuros.

8.2 Perspectivas de trabalhos futuros

A seguir, são listadas sugestões de trabalhos futuros após a realização da tese:

◇ **Tópicos relacionados à aplicação específica de separação cega de fontes.**

- *Métodos algébricos para BSS com misturas convolutivas.* Métodos algébricos baseados em cumulantes já foram aplicados para a separação de misturas convolutivas em abordagens no domínio da frequência, como em Duan e Zhang (2012). No domínio do tempo, soluções para o caso convolutivo envolvendo cumulantes vêm sendo propostas para casos particulares; citam-se, por exemplo, os trabalhos de Ghennioui et al. (2007), Castella et al. (2007), Ghennioui et al. (2010), Dubroca et al. (2010). Ainda assim, métodos algébricos eficientes para casos mais gerais de separação com misturas convolutivas ainda precisam ser propostos e investigados.
- *Custo computacional de métodos algébricos baseados em cumulantes.* O alto custo computacional de técnicas baseadas na diagonalização conjunta de matrizes de quadricovariância, especialmente para um número elevado de fontes (CARDOSO, 1999; MIETTINEN et al., 2015), inspira a investigação de alternativas às escolhas usuais de matrizes de pesos ou de formas de considerar a redundância presente na representação matricial. Abordagens foram propostas para quando se dispõe de certo conhecimento *a priori* sobre as estatísticas de ordem quatro das fontes, como em Miettinen et al. (2013). Porém, o comportamento numérico dessas soluções, em comparação com os métodos clássicos, precisa ser melhor compreendido.
- *Métodos algébricos para o caso subdeterminado e com ruído.* Conforme De Lathauwer, Castaing e Cardoso (2007), métodos algébricos baseados em cumulantes são uma alternativa interessante para a abordagem de problemas de separação subdeterminados e com ruído. As interpretações e relações exploradas nessa tese podem, também, ser estendidas para esse caso e contribuir para o desenvolvimento de métodos de separação.
- *Branqueamento e seus efeitos nos métodos algébricos.* Na literatura, constata-se que a realização do branqueamento antes da consideração das estatísticas de ordem superior limita o funcionamento de métodos algébricos em casos práticos (CARDOSO, 1998), principalmente devido a erros numéricos e de estimação. Métodos algébricos que levem em conta estatísticas de ordem dois e quatro simultaneamente são assunto atual de estudo (VAN EEGHEM et al., 2018) e possuem relevância especial em soluções de tempo real para o problema de BSS.
- *Condições de separabilidade das fontes para modelos de mistura mais sofisticados.* Com base nas interpretações das condições de separabilidade das fontes para o modelo clássico de mistura em ICA, podem-se abordar modelos de mistura mais sofisticados e para os quais condições gerais de separabilidade ainda não foram

obtidas. É o caso, por exemplo, de sistemas misturadores não lineares; pode-se mostrar que, no caso geral, a recuperação de independência para misturas não lineares não garante a separação adequada das fontes à saída do sistema separador (JUTTEN; BABAIE-ZADEH; HOSSEINI, 2004; EHSANDOUST et al., 2017).

◇ **Tópicos gerais do ponto de vista conceitual.**

- *Relação entre a diagonalização simultânea de matrizes de quadricovariância e a diagonalização do tensor de cumulantes de ordem quatro.* Na literatura, as relações entre a diagonalização simultânea de matrizes de quadricovariância e a diagonalização do tensor de cumulantes de ordem quatro ainda não estão completamente esclarecidas. Embora certas questões tenham sido abordadas por De Lathauwer (2006), Comon (2014), resta investigar melhor os efeitos de erros numéricos e erros de estimação nas relações entre esses dois procedimentos.
- *Questões teóricas em aberto referentes à diagonalização de tensores simétricos.* Muitos aspectos teóricos referentes a tensores simétricos — envolvendo, por exemplo, a existência e a unicidade de formas diagonais — ainda estão em aberto (COMON et al., 2008) e merecem ser investigados. Uma decorrência da melhor compreensão dessas questões teóricas é viabilizar a aplicação direta de tensores a problemas práticos de processamento estatístico de sinais baseados em cumulantes (VAN EEGHEM et al., 2018).
- *Estimação de cumulantes e seus efeitos nos métodos algébricos de separação.* Cumulantes de ordem superior são a base dos métodos algébricos de separação, mas, em casos práticos, precisam ser estimados antes de serem utilizados. Conforme McCullagh (2018), a estimação de cumulantes de ordem superior é muito sensível a erros nos dados, *i.e.*, presença de *outliers*. Além disso, a variância do estimador de cumulantes depende, usualmente, de cumulantes cuja ordem vai até o dobro da ordem do estimando (MCCULLAGH, 2018; COMON, 1994; MIETTINEN et al., 2015). Logo, se não houver dados suficientes, pode não ser possível estimar cumulantes adequadamente. Os efeitos de erros de estimação nos métodos algébricos de separação, bem como no cálculo de matrizes de cumulantes (GOUÉDARD; LOUBATON, 2017), merece atenção especial.

REFERÊNCIAS

- ABED-MERAIM, K.; XIANG, Y.; HUA, Y. Generalized second order identifiability condition and relevant testing technique. In: IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON ACOUSTICS, SPEECH, AND SIGNAL PROCESSING, 2000, Istanbul. *Proceedings* [...]. Piscataway: IEEE, 2000. v. 5, p. 2989–2992.
- AHMED, N.; RAO, K. R. *Orthogonal transforms for digital signal processing*. New York: Springer, 1975.
- ASTER, R. C.; BORCHERS, B.; THURBER, C. H. *Parameter estimation and inverse problems*. 3rd. ed. Amsterdam: Elsevier, 2019.
- BABAIE-ZADEH, M. *On blind source separation in convolutive and nonlinear mixtures*. Tese (Doctorat en Signal, Image, Parole, Télécoms) — École Doctorale d'Électronique, Électrotechnique, Automatique, Traitement du Signal, Grenoble INP, Grenoble, 2002.
- BAUDOT, P. et al. Topological information data analysis. *Entropy*, v. 21, n. 9, 2019. (article number: 19).
- BELL, A. J.; SEJNOWSKI, T. J. An information-maximization approach to blind separation and blind deconvolution. *Neural Computation*, v. 7, n. 6, p. 1129–1159, 1995.
- BISHOP, C. M. *Pattern recognition and machine learning*. New York: Springer, 2006.
- BREIMAN, L. *Probability*. Philadelphia: SIAM, 1992.
- BRILLINGER, D. R. Some history of the study of higher-order moments and spectra. *Statistica Sinica*, v. 1, n. 2, p. 465–476, 1991.
- BUNSE-GERSTNER, A.; BYERS, R.; MEHRMANN, V. Numerical methods for simultaneous diagonalization. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, v. 14, n. 4, p. 927–949, 1993.
- CAO, L. J. et al. A comparison of PCA, KPCA and ICA for dimensionality reduction in support vector machine. *Neurocomputing*, v. 55, n. 1 & 2, p. 321–336, 2003.
- CARDOSO, J.-F. Blind identification of independent components with higher-order statistics. In: WORKSHOP ON HIGHER-ORDER SPECTRAL ANALYSIS, 1989, Vail. *Proceedings* [...]. Piscataway: IEEE, 1989. p. 157–162.
- CARDOSO, J.-F. Eigen-structure of the fourth-order cumulant tensor with application to the blind source separation problem. In: IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON ACOUSTICS, SPEECH, AND SIGNAL PROCESSING, 1990, Albuquerque. *Proceedings* [...]. Piscataway: IEEE, 1990. v. 5, p. 2655–2658.
- CARDOSO, J.-F. The invariant approach to source separation. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON NONLINEAR THEORY AND ITS APPLICATIONS, 1995, Las Vegas. *Proceedings* [...]. Tokyo: IEICE, 1995. p. 55–60.
- CARDOSO, J.-F. Infomax and maximum likelihood for blind source separation. *IEEE Signal Processing Letters*, v. 4, n. 4, p. 112–114, 1997.

- CARDOSO, J.-F. Blind signal separation: Statistical principles. *Proceedings of the IEEE*, v. 86, n. 10, p. 2009–2025, 1998.
- CARDOSO, J.-F. High-order contrasts for independent component analysis. *Neural Computation*, v. 11, n. 1, p. 157–192, 1999.
- CARDOSO, J.-F. Entropic contrasts for source separation: Geometry and stability. In: HAYKIN, S. (Ed.). *Unsupervised adaptive filtering: Blind source separation*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2000. v. 1, cap. 4, p. 139–190.
- CARDOSO, J.-F.; SOULOUMIAC, A. Blind beamforming for non-Gaussian signals. *IEEE Proceedings F*, v. 140, n. 6, p. 362–370, 1993.
- CARDOSO, J.-F.; SOULOUMIAC, A. Jacobi angles for simultaneous diagonalization. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, v. 17, n. 1, p. 161–164, 1996.
- CASTELLA, M.; COMON, P. Blind separation of instantaneous mixtures of dependent sources. In: DAVIES, M. E. et al. (Ed.). *Independent component analysis and signal separation*. Berlin: Springer, 2007. p. 9–16.
- CASTELLA, M. et al. Quadratic higher order criteria for iterative blind separation of a MIMO convolutive mixture of sources. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 55, n. 1, p. 218–232, 2007.
- CAVALCANTE, C. C. *Sobre separação cega de fontes: Proposições e análise de estratégias para processamento multi-usuário*. Tese (Doutorado em Engenharia Elétrica) — Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, UNICAMP, Campinas, 2004.
- CICHOCKI, A. et al. Tensor decompositions for signal processing applications: From two-way to multiway component analysis. *IEEE Signal Processing Magazine*, v. 32, n. 2, p. 145–163, 2015.
- COMON, P. Independent component analysis. In: LACOUME, J.-L. (Ed.). *Higher-order statistics*. Amsterdam: Elsevier, 1992. p. 29–38.
- COMON, P. Independent component analysis, a new concept? *Signal Processing*, v. 36, n. 3, p. 287–314, 1994.
- COMON, P. Contrasts for multichannel blind deconvolution. *IEEE Signal Processing Letters*, v. 3, n. 7, p. 209–211, 1996.
- COMON, P. Contrasts, independent component analysis, and blind deconvolution. *International Journal of Adaptive Control and Signal Processing*, v. 18, n. 3, p. 225–243, 2004.
- COMON, P. Tensors: A brief introduction. *IEEE Signal Processing Magazine*, v. 31, n. 3, p. 44–53, 2014.
- COMON, P. et al. Symmetric tensors and symmetric tensor rank. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, v. 30, n. 3, p. 1254–1279, 2008.
- COMON, P.; JUTTEN, C. (Ed.). *Handbook of blind source separation: Independent component analysis and applications*. Oxford: Elsevier, 2010.

COMON, P.; RAJIH, M. Blind identification of under-determined mixtures based on the characteristic function. *Signal Processing*, v. 86, n. 9, p. 2271–2281, 2006.

COVER, T. M.; THOMAS, J. A. *Elements of information theory*. 2nd. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2006.

COXETER, H. S. M. *Regular polytopes*. London: Methuen, 1948.

CRAMÉR, H. *Random variables and probability distributions*. 3rd. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1970.

DARMOIS, G. Analyse générale des liaisons stochastiques: Étude particulière de l'analyse factorielle linéaire. *Revue de l'Institut International de Statistique*, v. 21, n. 1 & 2, p. 2–8, 1953.

DE LATHAUWER, L. *Signal processing based on multilinear algebra*. Tese (Doctoraat in de Toegepaste Wetenschappen) — Faculteit der Toegepaste Wetenschappen, KU Leuven, Leuven, 1997.

DE LATHAUWER, L. A link between the canonical decomposition in multilinear algebra and simultaneous matrix diagonalization. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, v. 28, n. 3, p. 642–666, 2006.

DE LATHAUWER, L.; CASTAING, J.; CARDOSO, J.-F. Fourth-order cumulant-based blind identification of underdetermined mixtures. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 55, n. 6, p. 2965–2973, 2007.

DEERWESTER, S. et al. Indexing by latent semantic analysis. *Journal of the American Society for Information Science*, v. 41, n. 6, p. 391–407, 1990.

DOMINO, K.; GAWRON, P.; PAWELA, Ł. Efficient computation of higher-order cumulant tensors. *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 40, n. 3, p. A1590–A1610, 2018.

DONOHO, D. On minimum entropy deconvolution. In: FINDLEY, D. F. (Ed.). *Applied time series analysis II*. New York: Academic Press, 1981. p. 565–608.

DUAN, T.; ZHANG, X. A solution to blind separation of convolutive communication mixtures in frequency domain. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON CONSUMER ELECTRONICS, COMMUNICATIONS AND NETWORKS, 2nd., 2012, Yichang. *Proceedings* [...]. Piscataway: IEEE, 2012. p. 2330–2333.

DUBROCA, R. et al. A general algebraic algorithm for blind extraction of one source in a MIMO convolutive mixture. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 58, n. 5, p. 2484–2493, 2010.

DUGUÉ, D. Analiticité et convexité des fonctions caractéristiques. *Annales de l'Institut Henri Poincaré*, v. 12, n. 1, p. 45–56, 1951.

EDGEWORTH, F. Y. The law of error. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, v. 20, p. 36–65 & 113–141, 1905.

- EHSANDOUST, B. et al. Blind source separation in nonlinear mixtures: Separability and a basic algorithm. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 65, n. 16, p. 4339–4352, 2017.
- ERIKSSON, J.; KOIVUNEN, V. Blind identifiability of class of nonlinear instantaneous ICA models. In: EUROPEAN SIGNAL PROCESSING CONFERENCE, 11., 2002, Toulouse. *Proceedings [...]*. Toulouse: EURASIP, 2002. v. 2, p. 7–10.
- ERIKSSON, J.; KOIVUNEN, V. Identifiability, separability, and uniqueness of linear ICA models. *IEEE Signal Processing Letters*, v. 11, n. 7, p. 601–604, 2004.
- ERIKSSON, J.; KOIVUNEN, V. Blind separation of a class of nonlinear ICA models. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON CIRCUITS AND SYSTEMS, 2005, Kobe. *Proceedings [...]*. Piscataway: IEEE, 2005. v. 6, p. 5890–5893.
- ERIKSSON, J.; KOIVUNEN, V. Complex random vectors and ICA models: Identifiability, uniqueness, and separability. *IEEE Transactions on Information Theory*, v. 52, n. 3, p. 1017–1029, 2006.
- EWERT, S. et al. Score-informed source separation for musical audio recordings: An overview. *IEEE Signal Processing Magazine*, v. 31, n. 3, p. 116–124, 2014.
- FELLER, W. *An introduction to probability theory and its applications*. New York: John Wiley & Sons, 1968–1971. 2 v.
- FERNANDES, C. E. R.; COMON, P.; FAVIER, G. Blind identification of MISO-FIR channels. *Signal Processing*, v. 90, n. 2, p. 490–503, 2010.
- FERNANDES, C. E. R.; FAVIER, G.; MOTA, J. C. M. Blind channel identification algorithms based on the Parafac decomposition of cumulant tensors: The single and multiuser cases. *Signal Processing*, v. 88, n. 6, p. 1382–1401, 2008.
- FORSYTHE, G. E.; HENRICI, P. The cyclic Jacobi method for computing the principal values of a complex matrix. *Transactions of the American Mathematical Society*, v. 94, n. 1, p. 1–23, 1960.
- GERBRANDS, J. J. On the relationships between SVD, KLT and PCA. *Pattern Recognition*, v. 14, n. 1–6, p. 375–381, 1981.
- GHENNIOUI, H. et al. A nonunitary joint block diagonalization algorithm for blind separation of convolutive mixtures of sources. *IEEE Signal Processing Letters*, v. 14, n. 11, p. 860–863, 2007.
- GHENNIOUI, H. et al. Gradient-based joint block diagonalization algorithms: Application to blind separation of FIR convolutive mixtures. *Signal Processing*, v. 90, n. 6, p. 1836–1849, 2010.
- GODARD, D. N. Self-recovering equalization and carrier tracking in two-dimensional data communication systems. *IEEE Transactions on Communications*, v. 28, n. 11, p. 1867–1875, 1980.
- GOLUB, G. H.; VAN LOAN, C. F. *Matrix computations*. 4th. ed. Baltimore: The Johns Hopkins University Press, 2013.

- GOUÉDARD, P.; LOUBATON, P. On the behaviour of the estimated fourth-order cumulants matrix of a high-dimensional Gaussian white noise. In: TICHAVSKÝ, P. et al. (Ed.). *Latent variable analysis and signal separation*. Cham: Springer, 2017. p. 269–278.
- GUTCH, H. W.; THEIS, F. J. Uniqueness of linear factorizations into independent subspaces. *Journal of Multivariate Analysis*, v. 112, p. 48–62, 2012.
- HAYKIN, S. *Neural networks and learning machines*. 3rd. ed. Upper Saddle River: Pearson, 2009.
- HAYKIN, S. *Adaptive filter theory*. 5th. ed. Edinburgh Gate: Pearson, 2014.
- HÉRAULT, J.; JUTTEN, C.; ANS, B. Détection de grandeurs primitives dans un message composite par une architecture de calcul neuromimétique en apprentissage non supervisé. In: COLLOQUE SUR LE TRAITEMENT DU SIGNAL ET SES APPLICATIONS, 10e., 1985, Nice. *Actes [...]*. Nice: GRETSI, 1985.
- HILD, K. E.; ERDOĞMUŞ, D.; PRÍNCIPE, J. C. Blind source separation of time-varying, instantaneous mixtures using an on-line algorithm. In: IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON ACOUSTICS, SPEECH, AND SIGNAL PROCESSING, 2002, Orlando. *Proceedings [...]*. Piscataway: IEEE, 2002. v. 1, p. 993–996.
- HOFFMAN, K.; KUNZE, R. *Linear algebra*. 2nd. ed. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1971.
- HOLMQUIST, B. Moments and cumulants of the multivariate normal distribution. *Stochastic Analysis and Applications*, v. 6, n. 3, p. 273–278, 1988.
- HORN, R. A.; JOHNSON, C. R. *Matrix analysis*. 2nd. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2013.
- HOTELLING, H. Analysis of a complex of statistical variables into principal components. *Journal of Educational Psychology*, v. 24, n. 6 & 7, p. 417–441 & 498–520, 1933.
- HYVÄRINEN, A. Independent component analysis: Recent advances. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, v. 371, n. 1984, p. 1–19, 2013.
- HYVÄRINEN, A.; KARHUNEN, J.; OJA, E. *Independent component analysis*. New York: John Wiley & Sons, 2001.
- HYVÄRINEN, A.; OJA, E. Independent component analysis: Algorithms and applications. *Neural Networks*, v. 13, n. 4 & 5, p. 411–430, 2000.
- JOLLIFFE, I. T. *Principal component analysis*. 2nd. ed. New York: Springer, 2002.
- JOLLIFFE, I. T.; CADIMA, J. Principal component analysis: A review and recent developments. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, v. 374, n. 2065, p. 1–16, 2016.
- JUTTEN, C.; BABAIE-ZADEH, M.; HOSSEINI, S. Three easy ways for separating nonlinear mixtures? *Signal Processing*, v. 84, n. 2, p. 217–229, 2004.
- KAGAN, A. M.; LINNIK, Ju. V.; RAO, C. R. *Characterization problems in mathematical statistics*. New York: John Wiley & Sons, 1973.

- KAY, S. M. *Fundamentals of statistical signal processing: Estimation theory*. Upper Saddle River: Prentice-Hall, 1993.
- KENDALL, M. G. *The advanced theory of statistics*. 2nd. ed. London: Charles Griffin, 1945. v. 1.
- LACOUME, J.-L.; AMBLARD, P.-O.; COMON, P. *Statistiques d'ordre supérieur pour le traitement du signal*. Paris: Masson, 1997.
- LANDSBERG, J. M. *Tensors: Geometry and applications*. Providence: AMS, 2012.
- LEE, T.-W.; LEWICKI, M. S.; SEJNOWSKI, T. J. ICA mixture models for unsupervised classification of non-Gaussian classes and automatic context switching in blind signal separation. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, v. 22, n. 10, p. 1078–1089, 2000.
- LI, Y.; CICHOCKI, A.; AMARI, S.-I. Analysis of sparse representation and blind source separation. *Neural Computation*, v. 16, n. 6, p. 1193–1234, 2004.
- LI, Y. et al. Sparse representation for brain signal processing: A tutorial on methods and applications. *IEEE Signal Processing Magazine*, v. 31, n. 3, p. 96–106, 2014.
- LINNIK, Ju. V.; OSTROVSKII, I. V. *Decomposition of random variables and vectors*. Providence: AMS, 1977.
- LOW, C.-Y.; TEOH, A. B.-J.; NG, C.-J. Multi-fold Gabor, PCA, and ICA filter convolution descriptor for face recognition. *IEEE Transactions on Circuits and Systems for Video Technology*, v. 29, n. 1, p. 115–129, 2019.
- LUK, F. T.; PARK, H. A proof of convergence for two parallel Jacobi SVD algorithms. *IEEE Transactions on Computers*, v. 38, n. 6, p. 806–811, 1989.
- MANSOUR, A.; JUTTEN, C. What should we say about the kurtosis? *IEEE Signal Processing Letters*, v. 6, n. 12, p. 321–322, 1999.
- MARTÍN-CLEMENTE, R.; ZARZOSO, V. On the link between L1-PCA and ICA. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, v. 39, n. 3, p. 515–528, 2017.
- MAURANDI, V.; MOREAU, E. Non-orthogonal simultaneous diagonalization of K-order complex tensors for source separation. *IEEE Signal Processing Letters*, v. 24, n. 11, p. 1621–1625, 2017.
- MAZUR, I. P. Skitovich–Darmois theorem for discrete and compact totally disconnected abelian groups. *Ukrainian Mathematical Journal*, v. 65, n. 7, p. 1054–1070, 2013.
- MCCULLAGH, P. *Tensor methods in statistics*. 2nd. ed. Mineola: Dover, 2018.
- MENDEL, J. M. Tutorial on higher-order statistics (spectra) in signal processing and system theory: Theoretical results and some applications. *Proceedings of the IEEE*, v. 79, n. 3, p. 278–305, 1991.
- MIETTINEN, J. et al. Fast equivariant JADE. In: IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON ACOUSTICS, SPEECH, AND SIGNAL PROCESSING, 2013, Vancouver. *Proceedings [...]*. Piscataway: IEEE, 2013. p. 6153–6157.

- MIETTINEN, J. et al. Fourth moments and independent component analysis. *Statistical Science*, v. 30, n. 3, p. 372–390, 2015.
- MOREAU, E.; PESQUET, J.-C. Generalized contrasts for multichannel blind deconvolution of linear systems. *IEEE Signal Processing Letters*, v. 4, n. 6, p. 182–183, 1997.
- NGUYEN THI, H.-L.; JUTTEN, C. Blind source separation for convolutive mixtures. *Signal Processing*, v. 45, n. 2, p. 209–229, 1995.
- NIKIAS, C. L.; PETROPULU, A. P. *Higher-order spectra analysis: A nonlinear signal processing framework*. Upper Saddle River: Prentice-Hall, 1993.
- OULD-BABA, H.; ROBIN, V.; ANTONI, J. Concise formulae for the cumulant matrices of a random vector. *Linear Algebra and its Applications*, v. 485, p. 392–416, 2015.
- PAPOULIS, A.; PILLAI, S. U. *Probability, random variables, and stochastic processes*. 4th. ed. New York: McGraw-Hill, 2002.
- PAVAN, F. R. M. *Sobre a desconvolução multiusuário e a separação de fontes*. Dissertação (Mestrado em Sistemas Eletrônicos) — Escola Politécnica, USP, São Paulo, 2016.
- PAVAN, F. R. M.; MIRANDA, M. D. On the Darmois–Skitovich theorem and spatial independence in blind source separation. *Journal of Communication and Information Systems*, v. 33, n. 1, p. 146–157, 2018.
- PEARSON, K. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. *Philosophical Magazine, Series 6*, v. 2, n. 11, p. 559–572, 1901.
- PHAM, D.-T.; CARDOSO, J.-F. Blind separation of instantaneous mixtures of nonstationary sources. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 49, n. 9, p. 1837–1848, 2001.
- PICINBONO, B. *Random signals and systems*. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1993.
- POLTRONIERE, S. C.; SOLER, E. M.; BRUNO-ALFONSO, A. Joint approximate diagonalization of symmetric real matrices of order 2. *Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, v. 17, n. 1, p. 113–126, 2016.
- QI, L.; CHEN, H.; CHEN, Y. *Tensor eigenvalues and their applications*. Singapore: Springer, 2018.
- QI, L.; LUO, Z. *Tensor analysis: Spectral theory and special tensors*. Philadelphia: SIAM, 2017.
- RIVET, B. et al. Audiovisual speech source separation: An overview of key methodologies. *IEEE Signal Processing Magazine*, v. 31, n. 3, p. 125–134, 2014.
- SIDIROPOULOS, N. D. et al. Tensor decomposition for signal processing and machine learning. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 65, n. 13, p. 3551–3582, 2017.
- SKITOVICH, V. P. Linear forms of independent random variables and the normal distribution law. *Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Matematicheskaya*, v. 18, n. 2, p. 185–200, 1954.

- SMITH, D. D.; EGGEN, M.; ST. ANDRE, R. *A transition to advanced mathematics*. 8. ed. Boston: Cengage Learning, 2015.
- SUBASI, A.; GURSOY, M. I. EEG signal classification using PCA, ICA, LDA and support vector machines. *Expert Systems with Applications*, v. 37, n. 12, p. 8659–8666, 2010.
- TALEB, A.; JUTTEN, C. Source separation in post-nonlinear mixtures. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 47, n. 10, p. 2807–2820, 1999.
- THEIS, F. J. Uniqueness of complex and multidimensional independent component analysis. *Signal Processing*, v. 84, n. 5, p. 951–956, 2004.
- TONG, L.; LIU, R. Blind estimation of correlated source signals. In: ASILOMAR CONFERENCE ON SIGNALS, SYSTEMS AND COMPUTERS, 24th., 1990, Pacific Grove. *Proceedings* [...]. Piscataway: IEEE, 1990. v. 1, p. 258–262.
- VAN EEGHEM, F. et al. Coupled and incomplete tensors in blind system identification. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 66, n. 23, p. 6137–6147, 2018.
- VAN EEGHEM, F.; SØRENSEN, M.; DE LATHAUWER, L. Tensor decompositions with several block-Hankel factors and application in blind system identification. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 65, n. 15, p. 4090–4101, 2017.
- VIELVA, L. et al. Underdetermined blind source separation in a time-varying environment. In: IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON ACOUSTICS, SPEECH, AND SIGNAL PROCESSING, 2002, Orlando. *Proceedings* [...]. Piscataway: IEEE, 2002. v. 3, p. 3049–3052.
- VINCENT, E. et al. From blind to guided audio source separation: How models and side information can improve the separation of sound. *IEEE Signal Processing Magazine*, v. 31, n. 3, p. 107–115, 2014.
- VIRTA, J. et al. JADE for tensor-valued observations. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, v. 27, n. 3, p. 628–637, 2018.
- WATANABE, S. Information theoretical analysis of multivariate correlation. *IBM Journal of Research and Development*, v. 4, n. 1, p. 66–82, 1960.
- YELLIN, D.; WEINSTEIN, E. Criteria for multichannel signal separation. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 42, n. 8, p. 2158–2168, 1994.
- ZHANG, X.-D. *Matrix analysis and applications*. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.

APÊNDICE A – DEMONSTRAÇÕES

Neste apêndice, apresentam-se demonstrações de proposições enunciadas durante o desenvolvimento teórico feito ao longo dos capítulos da tese. Embora algumas dessas demonstrações possam ser encontradas na literatura de teoria das probabilidades e separação cega de fontes, sua compilação é feita com o intuito principal de auxiliar a leitura do trabalho. As demonstrações referentes aos Capítulos 2, 3, 6 e 7 são respectivamente apresentadas nas Seções A.1, A.2, A.3 e A.4.

A.1 Demonstrações do Capítulo 2

Proposição 2.1. Sejam $i, \ell = 1, 2, \dots, N$, com $i \neq \ell$. Inicialmente, escreve-se $F_{\underline{a}_i, \underline{a}_\ell}$ em função de $F_{\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N}$ fazendo-se $N - 2$ das variáveis livres de (2.1) tenderem a infinito, de modo a restarem apenas as variáveis livres a_i e a_ℓ (PAPOULIS; PILLAI, 2002). Esse procedimento pode ser representado da seguinte forma:

$$F_{\underline{a}_i, \underline{a}_\ell}(a_i, a_\ell) = \lim_{\substack{a_k \rightarrow \infty \\ k=1, 2, \dots, N \\ k \neq i \\ k \neq \ell}} F_{\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N}(a_1, a_2, \dots, a_N) \quad (\text{A.1})$$

Se as variáveis $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N$ forem mutuamente independentes, aplica-se a fatoração de (2.2) ao lado direito de (A.1), obtendo-se

$$\begin{aligned} F_{\underline{a}_i, \underline{a}_\ell}(a_i, a_\ell) &= F_{\underline{a}_i}(a_i) F_{\underline{a}_\ell}(a_\ell) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i \\ k \neq \ell}}^N \underbrace{\lim_{a_k \rightarrow \infty} F_{\underline{a}_k}(a_k)}_{=1} \\ &= F_{\underline{a}_i}(a_i) F_{\underline{a}_\ell}(a_\ell). \end{aligned}$$

Portanto, a partir da Definição 2.2, as variáveis aleatórias $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N$ são independentes em pares. □

Proposição 2.8. Por simplicidade, supõe-se o caso em que cada variável admite uma função densidade de probabilidade. Sejam $i, \ell = 1, 2, \dots, N$ com $i \neq \ell$. Tem-se que, por definição (FELLER, 1968–1971),

$$E[\underline{a}_i \underline{a}_\ell] = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} a_i a_\ell f_{\underline{a}_i, \underline{a}_\ell}(a_i, a_\ell) da_i da_\ell,$$

em que

$$f_{\underline{a}_i, \underline{a}_\ell}(a_i, a_\ell) = \frac{\partial^2 F_{\underline{a}_i, \underline{a}_\ell}(a_i, a_\ell)}{\partial a_i \partial a_\ell}$$

é a função densidade de probabilidade conjunta de \underline{a}_i e \underline{a}_ℓ , obtida a partir da derivada parcial de segunda ordem da função distribuição de probabilidade conjunta $F_{\underline{a}_i, \underline{a}_\ell}(a_i, a_\ell)$

em relação a a_i e a_ℓ . Como \underline{a}_i e \underline{a}_ℓ são independentes, a partir da Definição 2.2 estendida para funções densidade de probabilidade, tem-se que $f_{\underline{a}_i, \underline{a}_\ell}(a_i, a_\ell) = f_{\underline{a}_i}(a_i) f_{\underline{a}_\ell}(a_\ell)$ e

$$\begin{aligned} E[\underline{a}_i \underline{a}_\ell] &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} a_i a_\ell f_{\underline{a}_i}(a_i) f_{\underline{a}_\ell}(a_\ell) da_i da_\ell \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} a_i f_{\underline{a}_i}(a_i) da_i \int_{-\infty}^{+\infty} a_\ell f_{\underline{a}_\ell}(a_\ell) da_\ell \\ &= E[\underline{a}_i] E[\underline{a}_\ell]. \end{aligned}$$

Logo, a partir da Definição 2.17, as variáveis $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N$ são não correlacionadas. \square

A seguinte definição é apresentada para auxiliar a demonstração subsequente (PAPOULIS; PILLAI, 2002).

Definição A.1. Seja o vetor aleatório $\underline{a} = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_N]^\top$ com média $\mathbf{m}_a = E[\underline{a}] \in \mathbb{R}^N$ e matriz de covariância $\mathbf{C}_a = E[(\underline{a} - \mathbf{m}_a)(\underline{a} - \mathbf{m}_a)^\top] \in \mathbb{R}^{N \times N}$. As variáveis aleatórias a_1, a_2, \dots, a_N são conjuntamente gaussianas se, e somente se, o vetor \underline{a} possuir função característica dada por

$$\Phi_a(\boldsymbol{\omega}) = \exp(j\boldsymbol{\omega}^\top \mathbf{m}_a - \boldsymbol{\omega}^\top \mathbf{C}_a \boldsymbol{\omega} / 2), \quad (\text{A.2})$$

com $\boldsymbol{\omega} = [\omega_1 \ \omega_2 \ \dots \ \omega_N]^\top \in \mathbb{R}^N$. Essa expressão também é válida para o caso degenerado em que $\det \mathbf{C}_a = 0$ (FELLER, 1968–1971). \triangleleft

Proposição 2.9. Como as variáveis aleatórias a_1, a_2, \dots, a_N são não correlacionadas, tem-se

$$\mathbf{C}_a = \text{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_N^2)$$

com $\sigma_i^2 = \text{var}[a_i] \geq 0$ para $i = 1, 2, \dots, N$. Logo,

$$\boldsymbol{\omega}^\top \mathbf{m}_a = \sum_{i=1}^N \omega_i \mu_i \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\omega}^\top \mathbf{C}_a \boldsymbol{\omega} = \sum_{i=1}^N \omega_i^2 \sigma_i^2,$$

em que $\mu_i = E[a_i]$. Substituindo-se essas expressões em (A.2), resulta a função característica

$$\Phi_{a_1, a_2, \dots, a_N}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N) = \prod_{i=1}^N \Phi_{a_i}(\omega_i),$$

em que $\Phi_{a_i}(\omega_i) = \exp(j\omega_i \mu_i - \omega_i^2 \sigma_i^2 / 2)$. Aplicando a transformada de Fourier inversa (com o sinal trocado) à função característica $\Phi_{a_1, a_2, \dots, a_N}$ conforme (PAPOULIS; PILLAI, 2002), obtém-se a função densidade de probabilidade conjunta

$$f_{a_1, a_2, \dots, a_N}(a_1, a_2, \dots, a_N) = \prod_{i=1}^N f_{a_i}(a_i). \quad (\text{A.3})$$

Se $\sigma_i^2 = 0$, tem-se $f_{a_i}(a_i) = \delta(a_i - \mu_i)$ em que $\delta(\cdot)$ denota, aqui, o delta de Dirac. Se $\sigma_i^2 > 0$, resulta $\underline{a}_i \sim \mathcal{N}(\mu_i, \sigma_i^2)$. De toda forma, a partir de (A.3) e considerando-se a Definição 2.1 — que pode ser estendida para funções densidade de probabilidade, caso elas existam —, obtém-se que as variáveis aleatórias $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N$ são mutuamente independentes. \square

A.2 Demonstrações do Capítulo 3

Proposição 3.3. Basta expandir as matrizes de quadricovariância em cada caso conforme (3.39), considerando-se adicionalmente que $[\mathbf{V}_a + \mathbf{V}_b]_{k,\ell} = [\mathbf{V}_a]_{k,\ell} + [\mathbf{V}_b]_{k,\ell}$ e $[c\mathbf{V}]_{k,\ell} = c[\mathbf{V}]_{k,\ell}$. \square

Proposição 3.4. Partindo-se de (3.40), basta mostrar que $[\mathbf{Q}_a(\mathbf{V})]_{i,j} = [\mathbf{Q}_a(\mathbf{V})]_{j,i}$ para $i, j = 1, 2, \dots, N$. O resultado é direto a partir da propriedade de permutação dos cumulantes reais dada pela Proposição 2.5-(ii), que implica $\mathcal{C}_a^{j,i,k,\ell} = \mathcal{C}_a^{i,j,k,\ell}$. \square

Proposição 3.5. Substituindo-se $[\mathbf{V}^\top]_{k,\ell} = [\mathbf{V}]_{\ell,k}$ na expressão de $\mathbf{Q}_a(\mathbf{V}^\top)$ obtida conforme (3.40), o resultado é provado utilizando-se a propriedade de permutação dos cumulantes reais dada pela Proposição 2.5-(ii), que implica $\mathcal{C}_a^{i,j,\ell,k} = \mathcal{C}_a^{i,j,k,\ell}$ para $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$. \square

Proposição 3.6. Substituindo-se (2.30) — para vetor aleatório de média nula — na expressão (3.40) da matriz de quadricovariância, pode-se representar essa matriz elemento a elemento como

$$\begin{aligned} [\mathbf{Q}_a(\mathbf{V})]_{i,j} &= \underbrace{\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{E}_a^{i,j,k,\ell}[\mathbf{V}]_{k,\ell}}_{\text{(I)}} - \underbrace{\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{E}_a^{i,j} \mathcal{E}_a^{k,\ell}[\mathbf{V}]_{k,\ell}}_{\text{(II)}} \\ &\quad - \underbrace{\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{E}_a^{i,k} \mathcal{E}_a^{j,\ell}[\mathbf{V}]_{k,\ell}}_{\text{(III)}} - \underbrace{\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{E}_a^{i,\ell} \mathcal{E}_a^{j,k}[\mathbf{V}]_{k,\ell}}_{\text{(IV)}}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

A seguir, representa-se vetorialmente cada um dos termos indicados no lado direito de (A.4):

(I) Nota-se que

$$\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{E}_a^{i,j,k,\ell}[\mathbf{V}]_{k,\ell} = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathbb{E}[[\mathbf{a}\mathbf{a}^\top]_{i,j}(\mathbf{a}_k[\mathbf{V}]_{k,\ell}\mathbf{a}_\ell)] = \mathbb{E}[[\mathbf{a}\mathbf{a}^\top]_{i,j}(\mathbf{a}^\top \mathbf{V} \mathbf{a})]. \quad (\text{A.5})$$

(II) Observa-se que

$$\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{E}_a^{i,j} \mathcal{E}_a^{k,\ell}[\mathbf{V}]_{k,\ell} = [\mathbf{C}_a]_{i,j} \text{tr}(\mathbf{C}_a \mathbf{V}). \quad (\text{A.6})$$

(III) Nesse caso, verifica-se que

$$\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{E}_a^{i,k} \mathcal{E}_a^{j,\ell}[\mathbf{V}]_{k,\ell} = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N [\mathbf{C}_a]_{i,k} [\mathbf{V}]_{k,\ell} [\mathbf{C}_a]_{\ell,j} = [\mathbf{C}_a \mathbf{V} \mathbf{C}_a]_{i,j}. \quad (\text{A.7})$$

(IV) Por fim, tem-se

$$\sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathcal{E}_a^{i,\ell} \mathcal{E}_a^{j,k}[\mathbf{V}]_{k,\ell} = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N [\mathbf{C}_a]_{j,k} [\mathbf{V}]_{k,\ell} [\mathbf{C}_a]_{\ell,i} = [\mathbf{C}_a \mathbf{V} \mathbf{C}_a]_{j,i} = [\mathbf{C}_a \mathbf{V}^\top \mathbf{C}_a]_{i,j}. \quad (\text{A.8})$$

Substituindo-se (A.5), (A.6), (A.7) e (A.8) em (A.4), resulta (3.41). \square

Proposição 3.7. Inicialmente, seja $\underline{b}_i = [\underline{b}]_i$ para $i = 1, 2, \dots, N$. Sabe-se que

$$\underline{b}_i = [\mathbf{G}\underline{a}]_i = \left[\sum_{m=1}^N \mathbf{g}_m \underline{a}_m \right]_i = \sum_{m=1}^N g_{i,m} \underline{a}_m, \quad (\text{A.9})$$

em que $g_{i,m} = [\mathbf{G}]_{i,m}$. Consideram-se os cumulantes de ordem quatro denotados por $\mathcal{C}_{\underline{b}}^{i,j,k,\ell} = \text{cum}[\underline{b}_i, \underline{b}_j, \underline{b}_k, \underline{b}_\ell]$ para $i, j, k, \ell = 1, 2, \dots, N$. Substituindo-se, nesses cumulantes, cada variável de acordo com (A.9), resulta a igualdade

$$\mathcal{C}_{\underline{b}}^{i,j,k,\ell} = \text{cum} \left[\sum_{m=1}^N g_{i,m} \underline{a}_m, \sum_{m=1}^N g_{j,m} \underline{a}_m, \sum_{m=1}^N g_{k,m} \underline{a}_m, \sum_{m=1}^N g_{\ell,m} \underline{a}_m \right].$$

Ressalta-se que $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \dots, \underline{a}_N$ são variáveis aleatórias mutuamente independentes. Logo, pode-se aplicar a propriedade de aditividade de cumulantes da Proposição 2.5-(v.2) para obter a igualdade multilinear

$$\mathcal{C}_{\underline{b}}^{i,j,k,\ell} = \sum_{m=1}^N g_{i,m} g_{j,m} g_{k,m} g_{\ell,m} \mathcal{C}_{\underline{a}_m,4}.$$

Substituindo-se essa expressão na definição da matriz de quadricovariância aplicada ao vetor aleatório \underline{b} , tem-se

$$[\mathbf{Q}_{\underline{b}}(\mathbf{V})]_{i,j} = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \sum_{m=1}^N g_{i,m} g_{j,m} g_{k,m} g_{\ell,m} \mathcal{C}_{\underline{a}_m,4} [\mathbf{V}]_{k,\ell} = \sum_{m=1}^N \mathcal{C}_{\underline{a}_m,4} g_{i,m} g_{j,m} \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N g_{k,m} [\mathbf{V}]_{k,\ell} g_{\ell,m}.$$

Após manipulações algébricas para representar a expressão obtida vetorialmente, obtém-se

$$\mathbf{Q}_{\underline{b}}(\mathbf{V}) = \sum_{m=1}^N \mathcal{C}_{\underline{a}_m,4} (\mathbf{g}_m^\top \mathbf{V} \mathbf{g}_m) (\mathbf{g}_m \mathbf{g}_m^\top),$$

que, por fim, pode ser colocada na forma compacta (3.42) com a definição auxiliar (3.43). \square

A.3 Demonstrações do Capítulo 6

Proposição 6.1.

- ◇ Autovalores repetidos \Rightarrow Não unicidade: Supõe-se inicialmente que $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V})$ possui um autovalor $\lambda \in \mathbb{R}$ repetido M vezes com $2 \leq M \leq N$. Como $\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V})$ é diagonalizável (HOFFMAN; KUNZE, 1971), a esse autovalor estão necessariamente associados M autovetores pertencentes à sequência ortonormal $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_M\}$ do \mathbb{R}^N com

$$\mathbf{Q}_{\underline{x}}(\mathbf{V}) \mathbf{u}_i = \lambda \mathbf{u}_i \quad (\text{A.10})$$

para $i = 1, 2, \dots, M$. Definem-se os vetores da sequência $\{\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_2, \dots, \mathbf{u}'_M\}$, também pertencentes ao \mathbb{R}^N , como combinações lineares dos autovetores \mathbf{u}_i , *i.e.*,

$$\mathbf{u}'_i = \mathbf{U}_\lambda \boldsymbol{\alpha}_i \quad (\text{A.11})$$

em que $\mathbf{U}_\lambda = [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \dots \ \mathbf{u}_M] \in \mathbb{R}^{N \times M}$ é a matriz cujas colunas são autovetores associados a λ e $\{\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \dots, \boldsymbol{\alpha}_M\}$ é uma base ortonormal do \mathbb{R}^M . Dada a ortonormalidade dos autovetores \mathbf{u}_i , vale o produto $\mathbf{U}_\lambda^\top \mathbf{U}_\lambda = \mathbf{I}_M$. Isso implica $(\mathbf{u}'_i)^\top \mathbf{u}'_j = \delta_{i,j}$ para $i, j = 1, 2, \dots, M$. Logo, a sequência $\{\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_2, \dots, \mathbf{u}'_M\}$ também é ortonormal. Além disso, levando em conta (A.10) e (A.11), chega-se a

$$\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) \mathbf{u}'_i = \mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}) \mathbf{U}_\lambda \boldsymbol{\alpha}_i = \lambda \mathbf{U}_\lambda \boldsymbol{\alpha}_i = \lambda \mathbf{u}'_i.$$

Assim, fica provado que $\{\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_2, \dots, \mathbf{u}'_M\}$ é uma base ortonormal alternativa para o autoespaço considerado, não necessariamente correspondendo a uma versão da base original $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_M\}$ com apenas trocas de sinal ou permutações dos autovetores. Logo, os autovetores de $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ não são únicos se essa matriz possuir um ou mais autovalores repetidos.

- ◇ Autovalores repetidos \Leftarrow Não unicidade: Por contraposição, se todos os autovalores de $\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V})$ forem distintos, então cada autoespaço terá apenas um vetor de norma unitária compondo sua base. Disso, decorre que o autovetor associado a cada autovalor distinto será único a menos de eventual troca de seu sinal.

□

Proposição 6.6. De acordo com a definição elemento a elemento da matriz de quadricovariância (3.40), tem-se

$$[\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a) \mathbf{V}_b^\top]_{i,i} = \sum_{m=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathfrak{C}_{\bar{\mathbf{x}}}^{i,m,k,\ell} [\mathbf{V}_a]_{k,\ell} [\mathbf{V}_b]_{i,m}.$$

Devido à propriedade de invariância à permutação de índices para cumulantes de vetores aleatórios reais conforme a Proposição 2.5-(ii), resulta

$$\begin{aligned} \text{tr}(\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a) \mathbf{V}_b^\top) &= \sum_{i=1}^N [\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_a) \mathbf{V}_b^\top]_{i,i} = \sum_{i=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \mathfrak{C}_{\bar{\mathbf{x}}}^{i,m,k,\ell} [\mathbf{V}_a]_{k,\ell} [\mathbf{V}_b]_{i,m} \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N \sum_{i=1}^N \sum_{m=1}^N \mathfrak{C}_{\bar{\mathbf{x}}}^{i,m,k,\ell} [\mathbf{V}_b]_{i,m} [\mathbf{V}_a]_{k,\ell} = \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N [\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_b)]_{k,\ell} [\mathbf{V}_a]_{k,\ell} \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{\ell=1}^N [\mathbf{V}_a]_{k,\ell} [\mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}^\top(\mathbf{V}_b)]_{\ell,k} = \sum_{k=1}^N [\mathbf{V}_a \mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}^\top(\mathbf{V}_b)]_{k,k} = \text{tr}(\mathbf{V}_a \mathbf{Q}_{\bar{\mathbf{x}}}^\top(\mathbf{V}_b)), \end{aligned}$$

finalizando a demonstração.

□

Proposição 6.7, parte (i). Supõe-se que ocorre a diagonalização simultânea de

$$\mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}'_1), \mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}'_2), \dots, \mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}'_M)$$

por uma mesma matriz ortogonal Θ conforme (6.36). Utilizando-se (6.35), pode-se reescrever o lado esquerdo de (6.36) obtendo-se

$$\sum_{i=1}^N (\mathbf{u}_i^\top \mathbf{V}'_k \mathbf{u}_i) \Theta^\top \mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}_i) \Theta = \Lambda_{\bar{x},4}(\mathbf{V}'_k, \mathbf{U}). \quad (\text{A.12})$$

Agora, representam-se as matrizes \mathbf{V}'_k nessa equação como combinações lineares das N^2 automatrizes do operador $\mathbf{Q}_{\bar{x}}$ dadas por (6.24) e (6.32), *i.e.*,

$$\mathbf{V}'_k = \sum_{i=1}^N \gamma_{k,i} \mathbf{V}_i + \text{lin}\{\mathbf{V}_{i,j} \mid i, j = 1, 2, \dots, N \text{ e } i \neq j\},$$

em que $\gamma_{k,1}, \gamma_{k,2}, \dots, \gamma_{k,N}$ correspondem às coordenadas da projeção ortogonal de cada \mathbf{V}'_k no subespaço vetorial com base ortonormal $\{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N\}$, e $\text{lin}\{\cdot\}$ denota uma combinação linear dos elementos pertencentes a $\{\cdot\}$. De acordo com essa representação, tem-se

$$\mathbf{u}_i^\top \mathbf{V}'_k \mathbf{u}_i = \gamma_{k,i}. \quad (\text{A.13})$$

Além disso, as matrizes de autovalores $\Lambda_{\bar{x},4}(\mathbf{V}'_k, \mathbf{U})$ podem ser calculadas realizando-se as substituições necessárias das matrizes de pesos em (6.22), já que os autovalores de $\mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}'_k)$ são os mesmos independentemente da matriz utilizada na diagonalização (GOLUB; VAN LOAN, 2013). Aplicando-se (6.22) à matriz \mathbf{V}'_k e substituindo-se (A.13) na expressão resultante, chega-se a

$$\Lambda_{\bar{x},4}(\mathbf{V}'_k, \mathbf{U}) = \text{diag}(\gamma_{k,1} \mathbf{C}_{\bar{x}_1,4}, \gamma_{k,2} \mathbf{C}_{\bar{x}_2,4}, \dots, \gamma_{k,N} \mathbf{C}_{\bar{x}_N,4}). \quad (\text{A.14})$$

Substituindo-se (A.13) e (A.14) em (A.12), tem-se

$$\sum_{i=1}^N \gamma_{k,i} \Theta^\top \mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}_i) \Theta = \text{diag}(\gamma_{k,1} \mathbf{C}_{\bar{x}_1,4}, \gamma_{k,2} \mathbf{C}_{\bar{x}_2,4}, \dots, \gamma_{k,N} \mathbf{C}_{\bar{x}_N,4})$$

para $k = 1, 2, \dots, M \geq N$. Essa sequência de M equações matriciais admite a representação

$$\begin{bmatrix} \gamma_{1,1} \mathbf{I}_N & \gamma_{1,2} \mathbf{I}_N & \cdots & \gamma_{1,N} \mathbf{I}_N \\ \gamma_{2,1} \mathbf{I}_N & \gamma_{2,2} \mathbf{I}_N & \cdots & \gamma_{2,N} \mathbf{I}_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_{M,1} \mathbf{I}_N & \gamma_{M,2} \mathbf{I}_N & \cdots & \gamma_{M,N} \mathbf{I}_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Theta^\top \mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}_1) \Theta \\ \Theta^\top \mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}_2) \Theta \\ \vdots \\ \Theta^\top \mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}_N) \Theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{diag}(\gamma_{1,1} \mathbf{C}_{\bar{x}_1,4}, \gamma_{1,2} \mathbf{C}_{\bar{x}_2,4}, \dots, \gamma_{1,N} \mathbf{C}_{\bar{x}_N,4}) \\ \text{diag}(\gamma_{2,1} \mathbf{C}_{\bar{x}_1,4}, \gamma_{2,2} \mathbf{C}_{\bar{x}_2,4}, \dots, \gamma_{2,N} \mathbf{C}_{\bar{x}_N,4}) \\ \vdots \\ \text{diag}(\gamma_{M,1} \mathbf{C}_{\bar{x}_1,4}, \gamma_{M,2} \mathbf{C}_{\bar{x}_2,4}, \dots, \gamma_{M,N} \mathbf{C}_{\bar{x}_N,4}) \end{bmatrix}. \quad (\text{A.15})$$

Resta, portanto, resolver o sistema linear matricial obtido a fim de verificar se todas as matrizes $\Theta^\top \mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}_1) \Theta, \Theta^\top \mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}_2) \Theta, \dots, \Theta^\top \mathbf{Q}_{\bar{x}}(\mathbf{V}_N) \Theta$ resultam diagonais. Se $M > N$,

tem-se um sistema sobredeterminado com M equações matriciais $N \times N$, mas apenas N incógnitas matriciais $N \times N$. No caso em que $M = N$, o sistema é determinado.

Lançando-se mão das definições dos produtos de Kronecker e Khatri–Rao de acordo com (6.38) e (6.39) respectivamente, podem-se representar compactamente as matrizes que compõem o sistema linear matricial (A.15) e pode-se tirar proveito das propriedades algébricas desses produtos matriciais para resolvê-lo. Por conveniência, define-se a matriz auxiliar

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\gamma}_1 & \boldsymbol{\gamma}_2 & \cdots & \boldsymbol{\gamma}_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_{1,1} & \gamma_{1,2} & \cdots & \gamma_{1,N} \\ \gamma_{2,1} & \gamma_{2,2} & \cdots & \gamma_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_{M,1} & \gamma_{M,2} & \cdots & \gamma_{M,N} \end{bmatrix}.$$

No caso geral, \mathbf{F} é uma matriz $M \times N$ não necessariamente quadrada. A partir de (6.38), pode-se expressar a primeira matriz no lado esquerdo de (A.15) como um produto de Kronecker conforme

$$\begin{bmatrix} \gamma_{1,1} \mathbf{I}_N & \gamma_{1,2} \mathbf{I}_N & \cdots & \gamma_{1,N} \mathbf{I}_N \\ \gamma_{2,1} \mathbf{I}_N & \gamma_{2,2} \mathbf{I}_N & \cdots & \gamma_{2,N} \mathbf{I}_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_{M,1} \mathbf{I}_N & \gamma_{M,2} \mathbf{I}_N & \cdots & \gamma_{M,N} \mathbf{I}_N \end{bmatrix} = \mathbf{F} \otimes \mathbf{I}_N \in \mathbb{R}^{MN \times N^2}. \quad (\text{A.16})$$

Além disso, verifica-se que a matriz no lado direito de (A.15) pode ser representada como

$$\begin{bmatrix} \text{diag}(\gamma_{1,1} \mathbf{C}_{\bar{s}_1,4}, \gamma_{1,2} \mathbf{C}_{\bar{s}_2,4}, \dots, \gamma_{1,N} \mathbf{C}_{\bar{s}_N,4}) \\ \text{diag}(\gamma_{2,1} \mathbf{C}_{\bar{s}_1,4}, \gamma_{2,2} \mathbf{C}_{\bar{s}_2,4}, \dots, \gamma_{2,N} \mathbf{C}_{\bar{s}_N,4}) \\ \vdots \\ \text{diag}(\gamma_{M,1} \mathbf{C}_{\bar{s}_1,4}, \gamma_{M,2} \mathbf{C}_{\bar{s}_2,4}, \dots, \gamma_{M,N} \mathbf{C}_{\bar{s}_N,4}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\gamma}_1 \otimes \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{\bar{s}_1,4} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} & \boldsymbol{\gamma}_2 \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{C}_{\bar{s}_2,4} \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} & \cdots & \boldsymbol{\gamma}_N \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \mathbf{C}_{\bar{s}_N,4} \end{bmatrix} \end{bmatrix}.$$

Nessa expressão, nota-se que há produtos de Kronecker das colunas da matriz \mathbf{F} com as colunas correspondentes da matriz diagonal de autocumulantes $\mathbf{A}_{\bar{s},4}(\mathbf{I}_N, \mathbf{U})$ dada por (6.23). A partir de (6.39), pode-se utilizar o produto de Khatri–Rao para chegar à representação compacta

$$\begin{bmatrix} \text{diag}(\gamma_{1,1} \mathbf{C}_{\bar{s}_1,4}, \gamma_{1,2} \mathbf{C}_{\bar{s}_2,4}, \dots, \gamma_{1,N} \mathbf{C}_{\bar{s}_N,4}) \\ \text{diag}(\gamma_{2,1} \mathbf{C}_{\bar{s}_1,4}, \gamma_{2,2} \mathbf{C}_{\bar{s}_2,4}, \dots, \gamma_{2,N} \mathbf{C}_{\bar{s}_N,4}) \\ \vdots \\ \text{diag}(\gamma_{M,1} \mathbf{C}_{\bar{s}_1,4}, \gamma_{M,2} \mathbf{C}_{\bar{s}_2,4}, \dots, \gamma_{M,N} \mathbf{C}_{\bar{s}_N,4}) \end{bmatrix} = \mathbf{F} \odot \mathbf{A}_{\bar{s},4}(\mathbf{I}_N, \mathbf{U}) \in \mathbb{R}^{MN \times N}. \quad (\text{A.17})$$

Substituindo-se, então, (A.16) e (A.17) em (A.15), resulta a expressão reduzida de (6.37). \square

Proposição 6.7, parte (ii). O sistema matricial (6.37) possui solução única, pois:

- ◇ A k -ésima linha de $\mathbf{\Gamma}$, para $k = 1, 2, \dots, M$, corresponde às coordenadas na base $\{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N\}$ da projeção de \mathbf{V}'_k sobre o subespaço vetorial correspondente a essa base. Por hipótese conforme (6.34), o subespaço vetorial gerado por $\{\mathbf{V}'_1, \mathbf{V}'_2, \dots, \mathbf{V}'_M\}$ contém o subespaço de dimensão N gerado por $\{\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_N\}$. Logo, a matriz $\mathbf{\Gamma}$ possui N linhas linearmente independentes e, portanto, é uma matriz com posto de coluna completo. Disso, decorre diretamente que $\mathbf{\Gamma} \otimes \mathbf{I}_N$ também possui posto de coluna completo e seu núcleo possui dimensão nula.
- ◇ A i -ésima coluna de $\mathbf{\Gamma} \odot \mathbf{A}_{\underline{\mathbf{g}},4}(\mathbf{I}_N, \mathbf{U})$, para $i = 1, 2, \dots, N$, corresponde à $(N(i-1)+i)$ -ésima coluna de $\mathbf{\Gamma} \otimes \mathbf{I}_N$ multiplicada por $\mathcal{C}_{\underline{\mathbf{g}},4}$. Logo, cada coluna de $\mathbf{\Gamma} \odot \mathbf{A}_{\underline{\mathbf{g}},4}(\mathbf{I}_N, \mathbf{U})$ pertence ao espaço imagem de $\mathbf{\Gamma} \otimes \mathbf{I}_N$.

A seguir, determina-se a solução única da equação matricial (6.37). Devido ao fato de $\mathbf{\Gamma}$ possuir posto de coluna completo, essa matriz possui pseudoinversa à esquerda (GOLUB; VAN LOAN, 2013; ZHANG, 2017), denotada por $\mathbf{\Gamma}^\dagger$ e dada por

$$\mathbf{\Gamma}^\dagger = (\mathbf{\Gamma}^\top \mathbf{\Gamma})^{-1} \mathbf{\Gamma}^\top \in \mathbb{R}^{N \times M}$$

e tal que $\mathbf{\Gamma}^\dagger \mathbf{\Gamma} = \mathbf{I}_N$. Pelo mesmo argumento, $\mathbf{\Gamma} \otimes \mathbf{I}_N$ também possui pseudoinversa à esquerda (ZHANG, 2017, p. 76, Eq. (1.10.7)) dada por

$$(\mathbf{\Gamma} \otimes \mathbf{I}_N)^\dagger = \mathbf{\Gamma}^\dagger \otimes \mathbf{I}_N^\dagger = \mathbf{\Gamma}^\dagger \otimes \mathbf{I}_N \in \mathbb{R}^{N^2 \times MN} \quad (\text{A.18})$$

e tal que $(\mathbf{\Gamma} \otimes \mathbf{I}_N)^\dagger (\mathbf{\Gamma} \otimes \mathbf{I}_N) = \mathbf{I}_{N^2}$. Multiplicando-se (6.37) à esquerda por $(\mathbf{\Gamma} \otimes \mathbf{I}_N)^\dagger$ e considerando-se (A.18), chega-se a

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Theta}^\top \mathbf{Q}_{\underline{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_1) \boldsymbol{\Theta} \\ \boldsymbol{\Theta}^\top \mathbf{Q}_{\underline{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_2) \boldsymbol{\Theta} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\Theta}^\top \mathbf{Q}_{\underline{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_N) \boldsymbol{\Theta} \end{bmatrix} = (\mathbf{\Gamma}^\dagger \otimes \mathbf{I}_N) (\mathbf{\Gamma} \odot \mathbf{A}_{\underline{\mathbf{g}},4}(\mathbf{I}_N, \mathbf{U})). \quad (\text{A.19})$$

Em seguida, utiliza-se a propriedade do produto misto (ZHANG, 2017, p. 79, Eq. (1.10.24)) para simplificar o lado direito da expressão obtida conforme

$$(\mathbf{\Gamma}^\dagger \otimes \mathbf{I}_N) (\mathbf{\Gamma} \odot \mathbf{A}_{\underline{\mathbf{g}},4}(\mathbf{I}_N, \mathbf{U})) = (\mathbf{\Gamma}^\dagger \mathbf{\Gamma}) \odot (\mathbf{I}_N \mathbf{A}_{\underline{\mathbf{g}},4}(\mathbf{I}_N, \mathbf{U})) = \mathbf{I}_N \odot \mathbf{A}_{\underline{\mathbf{g}},4}(\mathbf{I}_N, \mathbf{U}).$$

O produto de Khatri–Rao resultante nessa expressão é igual a uma pilha de matrizes $\mathbf{A}_{\underline{\mathbf{g}},4}(\mathbf{V}_i, \mathbf{U})$ conforme (6.25) para $i = 1, 2, \dots, N$. Finalmente, substituindo-se esse resultado em (A.19), obtém-se (6.40). A diagonalização simultânea obtida é consistente com a forma geral da decomposição em autovalores e autovetores das matrizes $\mathbf{Q}_{\underline{\mathbf{x}}}(\mathbf{V}_i)$, obtida considerando-se (6.25) na fatoração (6.21). \square

A.4 Demonstrações do Capítulo 7

Proposição 7.1. Inicialmente, toma-se o logaritmo (em uma base real arbitrária e maior do que um) da função de verossimilhança aleatória dada por (7.10) e divide-se o resultado por T . Esse procedimento não altera os pontos de máximo originais. Chega-se à função de log-verossimilhança aleatória normalizada

$$\bar{\mathcal{L}}_T(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{T-1}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}) = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} \log p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}_i; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}).$$

A partir da lei forte dos grandes números (BREIMAN, 1992), tem-se

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \bar{\mathcal{L}}_T(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{T-1}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}) = \mathbb{E}[\log p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}})] \quad (\text{A.20})$$

com probabilidade um. Expandindo-se o lado direito de (A.20), tem-se (PAPOULIS; PILLAI, 2002)

$$\mathbb{E}[\log p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}})] = \int_{-\infty}^{+\infty} \log p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}) f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (\text{A.21})$$

em que o símbolo de integral em negrito denota N integrais iteradas e $f_{\mathbf{x}}$ é a função densidade de probabilidade verdadeira de \mathbf{x} . Prossegue-se fazendo a substituição

$$p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}) = \frac{p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}})}{f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})} f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$$

em (A.21), chegando-se a

$$\mathbb{E}[\log p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}})] = \int_{\mathcal{S}_{f_{\mathbf{x}}}} \log \left(\frac{p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}})}{f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})} \right) f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{\mathcal{S}_{f_{\mathbf{x}}}} \log(f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})) f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (\text{A.22})$$

em que $\mathcal{S}_{f_{\mathbf{x}}}$ denota o suporte de $f_{\mathbf{x}}$. O primeiro e o segundo termos do lado direito de (A.22) valem, respectivamente,

$$\int_{\mathcal{S}_{f_{\mathbf{x}}}} \log \left(\frac{p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}})}{f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})} \right) f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = -\mathbb{K}(f_{\mathbf{x}} \| p_{\mathbf{x}}) = -\mathbb{K}[\mathbf{x} \| \check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{s}}], \quad (\text{A.23})$$

$$\int_{\mathcal{S}_{f_{\mathbf{x}}}} \log(f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})) f_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = -\mathbb{H}(f_{\mathbf{x}}) = -\mathbb{H}[\mathbf{x}], \quad (\text{A.24})$$

em que \mathbb{H} denota a entropia diferencial e \mathbb{K} denota a divergência K-L conforme as Definições 2.9 e 2.10, respectivamente. Finalmente, substituindo-se (A.23) e (A.24) em (A.22) — e substituindo-se ainda a equação resultante em (A.20) —, tem-se:

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} \bar{\mathcal{L}}_T(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{T-1}; \check{\mathbf{H}}, f_{\check{\mathbf{s}}}) = -\mathbb{K}[\mathbf{x} \| \check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{s}}] - \mathbb{H}[\mathbf{x}].$$

O termo $-\mathbb{H}[\mathbf{x}] = -\mathbb{H}[\mathbf{H}\check{\mathbf{s}}]$ é indiferente na maximização de verossimilhança, a qual é feita apenas variando-se $\check{\mathbf{H}}$ e $f_{\check{\mathbf{s}}}$. Sendo assim, maximizar a verossimilhança implica

minimizar o termo $K[\mathbf{x}||\check{\mathbf{H}}\check{\mathbf{s}}]$, que, de acordo com a Proposição 2.3-(iii), pode ser reescrito como

$$K[\mathbf{x}||\check{\mathbf{H}}\check{\mathbf{s}}] = K[\check{\mathbf{H}}^{-1}\mathbf{x}||\check{\mathbf{H}}^{-1}\check{\mathbf{H}}\check{\mathbf{s}}] = K[\mathbf{y}||\check{\mathbf{s}}],$$

em que $\mathbf{y} = \mathbf{W}\mathbf{x}$ e escolhe-se $\mathbf{W} = \check{\mathbf{H}}^{-1}$ como matriz de separação. Logo, a maximização da log-verossimilhança aleatória normalizada, para $T \rightarrow +\infty$, equivale à minimização da função dada por (7.11). \square

Proposição 7.2. Inicialmente, considera-se que para $i = 1, 2, \dots, N$, a variável aleatória

$$\alpha_i = g_i(r_i)$$

possui função distribuição de probabilidade (PAPOULIS; PILLAI, 2002)

$$F_{\alpha_i}(\alpha_i) = \Pr\{g_i(r_i) \leq \alpha_i\}.$$

Como g_i é estritamente crescente, essa função possui inversa crescente $g_i^{-1} : (0, 1) \rightarrow \mathbb{R}$; logo,

$$F_{\alpha_i}(\alpha_i) = \Pr\{r_i \leq g_i^{-1}(\alpha_i)\} = g_i(g_i^{-1}(\alpha_i)) = \begin{cases} \alpha_i, & \text{se } 0 < \alpha_i < 1 \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Sendo assim, a função densidade de probabilidade de α_i é dada por

$$f_{\alpha_i}(\alpha_i) = \frac{dF_{\alpha_i}(\alpha_i)}{d\alpha_i} = \begin{cases} 1, & \text{se } 0 < \alpha_i < 1 \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Portanto, $\alpha_i \sim \mathcal{U}(0, 1)$. Como as variáveis aleatórias r_1, r_2, \dots, r_N são mutuamente independentes e lembrando-se da expressão (7.12), tem-se que $\mathbf{g}(\mathbf{r}) \sim \mathcal{U}(0, 1)^N$. Agora, aplica-se a Proposição 2.3-(iv) à Equação (7.13), resultando em

$$\phi_{\text{IM}}[\mathbf{y}] = -H[\mathbf{g}(\mathbf{y})] = K[\mathbf{g}(\mathbf{y})||\mathbf{g}(\mathbf{r})],$$

já que o suporte de $\mathbf{g}(\mathbf{y})$ é o conjunto $(0, 1)^N$ e $\mathbf{g}(\mathbf{r})$ é uniforme em $(0, 1)^N$. Finalmente, considerando-se a Proposição 2.3-(iii), resulta (7.14). \square

Proposição 7.3. Aplicando-se a Definição 2.10 a (7.11), tem-se

$$\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}] = \int_{\mathcal{S}_{f_{\mathbf{y}}}} \log(f_{\mathbf{y}}(\mathbf{a})) f_{\mathbf{y}}(\mathbf{a}) d\mathbf{a} - \int_{\mathcal{S}_{f_{\check{\mathbf{y}}}}} \log(f_{\check{\mathbf{y}}}(\mathbf{a})) f_{\mathbf{y}}(\mathbf{a}) d\mathbf{a}, \quad (\text{A.25})$$

em que $\mathcal{S}_{f_{\mathbf{y}}}$ denota o suporte de $f_{\mathbf{y}}$. Seja um termo

$$\int_{\mathcal{S}_{f_{\check{\mathbf{y}}}}} \log(f_{\check{\mathbf{y}}}(\mathbf{a})) f_{\mathbf{y}}(\mathbf{a}) d\mathbf{a}, \quad (\text{A.26})$$

em que $\check{\mathbf{y}}$ é um vetor aleatório com distribuições marginais iguais às de \mathbf{y} e com elementos mutuamente independentes. Somando e subtraindo (A.26) do lado direito de (A.25) — e recombinaando as integrais —, resulta

$$\phi_{\text{ML}}[\mathbf{y}] = \int_{\mathcal{S}_{f_{\mathbf{y}}}} \log\left(\frac{f_{\mathbf{y}}(\mathbf{a})}{f_{\check{\mathbf{y}}}(\mathbf{a})}\right) f_{\mathbf{y}}(\mathbf{a}) d\mathbf{a} + \int_{\mathcal{S}_{f_{\check{\mathbf{y}}}}} \log\left(\frac{f_{\check{\mathbf{y}}}(\mathbf{a})}{f_{\check{\mathbf{y}}}(\mathbf{a})}\right) f_{\mathbf{y}}(\mathbf{a}) d\mathbf{a}$$

$$= K[\mathbf{y}|\check{\mathbf{y}}] + K[\check{\mathbf{y}}|\check{\mathbf{s}}], \quad (\text{A.27})$$

em que a segunda integral pôde ser representada como divergência K-L devido ao fato de $\check{\mathbf{y}}$ possuir elementos independentes e distribuições marginais iguais às de \mathbf{y} , além de $\check{\mathbf{s}}$ também possuir elementos independentes. Os dois termos resultantes do lado direito podem ser respectivamente simplificados como

$$K[\mathbf{y}|\check{\mathbf{y}}] = I[\mathbf{y}], \quad (\text{A.28})$$

$$K[\check{\mathbf{y}}|\check{\mathbf{s}}] = \sum_{i=1}^N K[y_i|\check{s}_i], \quad (\text{A.29})$$

em que na Equação (A.28) utilizou-se a Definição 2.11. Substituindo-se (A.28) e (A.29) em (A.27), chega-se a (7.15). \square

Proposição 7.4. Aplicando-se a Proposição 2.4-(iii) a (7.17), tem-se

$$\phi_{\text{MI}}[\mathbf{y}] = \sum_{i=1}^N H[y_i] - H[\mathbf{y}]. \quad (\text{A.30})$$

Com base na Proposição 2.10-(iv), as entropias podem ser reescritas em termos de negentropias como

$$H[y_i] = H[y_{G,i}] - J[y_i],$$

$$H[\mathbf{y}] = H[\mathbf{y}_G] - J[\mathbf{y}],$$

em que $y_{G,i}$ é uma variável aleatória gaussiana com média e variância iguais às da variável aleatória y_i . Substituindo-se essas expressões em (A.30), obtém-se

$$\phi_{\text{MI}}[\mathbf{y}] = \sum_{i=1}^N (H[y_{G,i}] - J[y_i]) - (H[\mathbf{y}_G] - J[\mathbf{y}]) = \sum_{i=1}^N H[y_{G,i}] - H[\mathbf{y}_G] + J[\mathbf{y}] - \sum_{i=1}^N J[y_i],$$

Finalmente, de acordo com a Proposição 2.4-(iii), a partir de

$$\sum_{i=1}^N H[y_{G,i}] - H[\mathbf{y}_G] = I[\mathbf{y}_G]$$

chega-se a (7.18). \square

APÊNDICE B – ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS

A análise de componentes principais (PCA) consiste em um conjunto de técnicas de análise multivariada. Essas técnicas buscam, por meio de transformações lineares, determinar uma representação alternativa para um conjunto de variáveis aleatórias eventualmente correlacionadas entre si. O conjunto original é substituído por um conjunto reduzido de variáveis aleatórias não correlacionadas. Como restrição adicional, as variáveis do novo conjunto devem reproduzir, da melhor maneira possível, a variabilidade estatística do conjunto original.

As variáveis aleatórias obtidas a partir dessa mudança de representação são denominadas componentes¹ principais. Intuitivamente, podem-se compreender as componentes principais como fatores fundamentais não observados no conjunto de variáveis original. Em certas situações práticas, pode ser conveniente — embora nem sempre simples — explicar as variações estatísticas do conjunto original a partir da atribuição de algum significado ou interpretação razoáveis às componentes principais obtidas.

A redução do número de variáveis aleatórias, na obtenção da nova representação, consiste no princípio central da análise de componentes principais e é denominado redução de dimensionalidade. Esse princípio é baseado na identificação e eliminação de redundâncias internas presentes no conjunto de variáveis original. Essas redundâncias se manifestam na forma de relações lineares, ou quase lineares, existentes entre as variáveis do conjunto. Na prática, não é incomum que conjuntos com centenas de variáveis possam ser adequadamente representados por apenas algumas dezenas de componentes principais.

Atualmente, a análise de componentes principais tem se mostrado útil como etapa de pré-processamento em diversos problemas de aprendizado de máquina como, por exemplo, remoção de ruído, extração de parâmetros e classificação e compressão de dados (HAYKIN, 2009; JOLLIFFE, 2002; BISHOP, 2006). Por um lado, a redução de dimensionalidade tem permitido economizar recursos computacionais no processamento de conjuntos muito extensos de dados. Por outro, o uso de componentes principais no treinamento de algoritmos tem permitido a obtenção de modelos que podem se basear em características essenciais e não redundantes dos dados.

Um exemplo de aplicação interessante de análise de componentes principais ocorre na área de processamento de linguagem natural. A fim de melhorar o desempenho de mecanismos de busca, aplica-se a redução de dimensionalidade a extensas tabelas que indicam a frequência de ocorrência de um conjunto de termos em certos documentos (DEERWESTER et al., 1990). Com isso, tem sido possível identificar e considerar fenômenos de sinonímia e polissemia existentes no conjunto de termos ou palavras-chave. As componentes principais, nesse caso, podem ser interpretadas como variáveis aleatórias ligadas, cada uma, a um

¹ A palavra “componente”, embora assumam diferentes significados na literatura de análise de componentes principais, é usada aqui como sinônimo de “variável aleatória” conforme Jolliffe (2002).

conjunto de termos com significados afins.

Uma abordagem detalhada de análise de componentes principais é apresentada por Jolliffe (2002). Os primórdios de análise de componentes principais não são recentes — apesar da popularidade atual dessas técnicas. Na verdade, elas foram inicialmente introduzidas por Pearson (1901) no contexto de biologia. Depois, foram desenvolvidas individualmente por Hotelling (1933) na área de psicometria.

Com base em Jolliffe (2002), neste apêndice é apresentada uma abordagem envolvendo a definição e a obtenção de componentes principais. Na Seção B.1, abordam-se componentes principais de um conjunto de variáveis aleatórias com médias e covariâncias conhecidas. Na Seção B.2, considera-se o caso de variáveis aleatórias para as quais esses parâmetros estatísticos não são conhecidos, e devem, portanto, ser estimados. Na Seção B.3, apresentam-se comentários sobre as relações que a análise de componentes principais possui com outras técnicas de decomposição de variáveis aleatórias.

B.1 Componentes principais: caso exato

Considera-se um vetor aleatório real \mathbf{x} dado por

$$\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_N]^T, \quad (\text{B.1})$$

em que x_1, x_2, \dots, x_N são variáveis aleatórias. Na Subseção B.1.1, apresenta-se a definição de componentes principais para o vetor aleatório \mathbf{x} (JOLLIFFE, 2002). Na Subseção B.1.2, aborda-se como as componentes principais podem ser obtidas a partir da matriz de covariância desse vetor.

B.1.1 Definição de componentes principais

Definição B.1. Seja um vetor aleatório real \mathbf{x} de $N \geq 2$ elementos, com média e matriz de covariância conhecidas. Definem-se combinações lineares das variáveis aleatórias em \mathbf{x} , para $k = 1, 2, \dots, N_1 < N$, como

$$p_k = \boldsymbol{\theta}_k^T \mathbf{x}, \quad (\text{B.2})$$

em que $\boldsymbol{\theta}_k = [\theta_{1,k} \ \theta_{2,k} \ \cdots \ \theta_{N,k}]^T$ são vetores de coeficientes com $\boldsymbol{\theta}_k^T \boldsymbol{\theta}_k = 1$, cada um representando uma direção em \mathbb{R}^N . Os vetores $\boldsymbol{\theta}_k$ são determinados, para $k = 1, 2, \dots, N_1$ sequencialmente e nessa ordem, tais que

(i) a variância de p_k , denotada por

$$\sigma_{p_k}^2 = \text{var}[p_k], \quad (\text{B.3})$$

seja máxima; e

(ii) a covariância entre \mathbf{p}_k e \mathbf{p}_ℓ , denotada por

$$\sigma_{\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_\ell}^2 = \text{cov}[\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_\ell], \quad (\text{B.4})$$

para todo $\ell = 1, 2, \dots, k-1$, seja igual a zero.

Sob essas condições, as N_1 componentes principais de \mathbf{x} são definidas como as variáveis aleatórias $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_{N_1}$, em ordem decrescente de variância. As direções das respectivas componentes principais de \mathbf{x} são definidas como os vetores de coeficientes $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$.

◁

O procedimento para a obtenção das componentes principais é baseado na busca de direções $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1} \in \mathbb{R}^N$. Essa busca é sequencial: primeiro se determina a direção $\boldsymbol{\theta}_1$ da componente principal de maior variância, depois se determina a direção $\boldsymbol{\theta}_2$ da componente principal de segunda maior variância, e assim por diante (JOLLIFFE, 2002).

Nesse procedimento, um ponto crucial é a escolha do número $N_1 < N$ de componentes principais a serem consideradas para representar adequadamente $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$. Se $N_1 \ll N$, pode haver perda considerável de informação em relação às variáveis originais. Entretanto, se $N_1 \approx N$, pode haver redundâncias desnecessárias nas componentes obtidas, indicando uma redução de dimensionalidade pouco satisfatória. Diferentes maneiras de realizar a escolha adequada de N_1 foram propostas na literatura, algumas inclusive relativamente elaboradas (JOLLIFFE, 2002). Na prática, comumente utilizam-se abordagens *ad hoc* simples, ou então aplicam-se regras gerais preestabelecidas.

A obtenção das componentes principais envolve a resolução de um problema de otimização com restrições para obter as direções $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$. No entanto, é possível mostrar que essas direções podem ser encontradas de forma relativamente simples, como é feito a seguir.

B.1.2 Decomposição em autovalores e autovetores da matriz de covariância

Considera-se o vetor aleatório real \mathbf{x} definido em (B.1). Seja a média conhecida $\mathbf{m}_{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^N$ de \mathbf{x} dada por

$$\mathbf{m}_{\mathbf{x}} = \text{E}[\mathbf{x}] \in \mathbb{R}^N. \quad (\text{B.5})$$

A matriz de covariância de \mathbf{x} , denotada por $\mathbf{C}_{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ e também suposta conhecida, é definida analogamente a (3.5) como

$$\mathbf{C}_{\mathbf{x}} = \text{E}[(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})(\mathbf{x} - \mathbf{m}_{\mathbf{x}})^{\top}]. \quad (\text{B.6})$$

Conforme abordado na Subseção 3.2.1, $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ é uma matriz positiva semidefinida (PICINBONO, 1993; HAYKIN, 2014) e, por isso, possui autovalores reais não negativos. De acordo com a proposição seguir, as componentes principais podem ser obtidas diretamente a partir de uma fatoração da matriz $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ (JOLLIFFE, 2002).

Proposição B.1. *Seja um vetor aleatório real \mathbf{x} de $N \geq 2$ elementos, com média $\mathbf{m}_x \in \mathbb{R}^N$ e matriz de covariância $\mathbf{C}_x \in \mathbb{R}^{N \times N}$ conhecidas. Seja a decomposição em autovalores e autovetores de \mathbf{C}_x expressa conforme*

$$\mathbf{C}_x = \mathbf{\Theta} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Theta}^\top,$$

em que $\mathbf{\Theta} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é ortogonal e $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é diagonal com elementos da diagonal principal distintos, positivos e providencialmente dispostos em ordem decrescente.

As primeiras N_1 colunas de $\mathbf{\Theta}$ correspondem às direções $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$, nessa ordem, das componentes principais de \mathbf{x} (conforme a Definição B.1). Além disso, os primeiros N_1 elementos da diagonal principal de $\mathbf{\Lambda}$ correspondem às variâncias das componentes principais com direções $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$, nessa ordem.

Demonstração. Inicialmente, considerando-se (B.2), (B.4) e (B.6), a covariância entre p_k e p_ℓ , para $k = 1, 2, \dots, N_1$ e $\ell = 1, 2, \dots, k - 1$, pode ser expressa como

$$\begin{aligned} \sigma_{p_k, p_\ell}^2 &= E[p_k p_\ell] - E[p_k] E[p_\ell] = E[\boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{x} \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}_\ell] - E[\boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{x}] E[\mathbf{x}^\top \boldsymbol{\theta}_\ell] \\ &= \boldsymbol{\theta}_k^\top (E[\mathbf{x} \mathbf{x}^\top] - \mathbf{m}_x \mathbf{m}_x^\top) \boldsymbol{\theta}_\ell = \boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_\ell. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

A partir de (B.7), a variância de p_k , para $k = 1, 2, \dots, N_1$, pode ser escrita conforme

$$\sigma_{p_k}^2 = \boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_k. \quad (\text{B.8})$$

Com base em (B.7) e (B.8), formula-se a obtenção das direções das componentes principais, segundo a Definição B.1, como o seguinte problema de otimização com restrições: para cada $k = 1, 2, \dots, N_1$, sequencialmente e nessa ordem,

$$\begin{aligned} &\underset{\boldsymbol{\theta}_k \in \mathbb{R}^N}{\text{maximize}} && \boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_k \\ &\text{sujeito a} && \boldsymbol{\theta}_k^\top \boldsymbol{\theta}_k = 1, \\ &&& \boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_\ell = 0 \quad \forall \ell = 1, 2, \dots, k - 1. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Utilizando-se multiplicadores de Lagrange, o problema com restrições de (B.9) pode ser reescrito sem restrições como segue: para cada $k = 1, 2, \dots, N_1$, sequencialmente e nessa ordem,

$$\underset{\substack{\boldsymbol{\theta}_k \in \mathbb{R}^N \\ \lambda_k, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{k-1} \in \mathbb{R}}}{\text{maximize}} \quad L_k(\boldsymbol{\theta}_k; \lambda_k, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{k-1}) \quad (\text{B.10})$$

em que

$$L_k(\boldsymbol{\theta}_k; \lambda_k, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{k-1}) = \boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_k - \lambda_k (\boldsymbol{\theta}_k^\top \boldsymbol{\theta}_k - 1) - \sum_{\ell=1}^{k-1} \alpha_\ell \boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_\ell. \quad (\text{B.11})$$

◇ Primeiramente, considera-se o problema (B.10) para $k = 1$. A partir de (B.11) e utilizando-se a definição de derivada de escalar em relação a vetor abordada em Haykin (2014, Appx. B), tem-se

$$\frac{\partial L_1(\boldsymbol{\theta}_1; \lambda_1)}{\partial \boldsymbol{\theta}_1} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}_1} (\boldsymbol{\theta}_1^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_1 - \lambda_1 (\boldsymbol{\theta}_1^\top \boldsymbol{\theta}_1 - 1)) = 2\boldsymbol{\theta}_1^\top \mathbf{C}_x - 2\lambda_1 \boldsymbol{\theta}_1^\top.$$

Igualando-se (B.1) ao vetor nulo $\mathbf{0}_N^\top$, e considerando-se a igualdade $\mathbf{C}_x^\top = \mathbf{C}_x$, resulta

$$\mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_1 = \lambda_1 \boldsymbol{\theta}_1.$$

Portanto, $\boldsymbol{\theta}_1$ é igual ao autovetor (de norma unitária, por restrição) de \mathbf{C}_x associado ao autovalor λ_1 (não nulo, por hipótese). A variância da componente principal em questão, segundo (B.8), vale

$$\sigma_{p_1}^2 = \boldsymbol{\theta}_1^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_1 = \lambda_1 \boldsymbol{\theta}_1^\top \boldsymbol{\theta}_1 = \lambda_1.$$

A máxima variância é atingida se $\lambda_1 \neq 0$ for igual ao maior autovalor de \mathbf{C}_x . Sendo assim, a direção procurada $\boldsymbol{\theta}_1$ é igual ao autovetor (de norma unitária) de \mathbf{C}_x associado ao seu maior autovalor $\lambda_1 \neq 0$.

◇ Para $k = 2$, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_2(\boldsymbol{\theta}_2; \lambda_2, \alpha_1)}{\partial \boldsymbol{\theta}_2} &= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}_2} (\boldsymbol{\theta}_2^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_2 - \lambda_2 (\boldsymbol{\theta}_2^\top \boldsymbol{\theta}_2 - 1) - \alpha_1 \boldsymbol{\theta}_2^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_1) \\ &= 2\boldsymbol{\theta}_2^\top \mathbf{C}_x - 2\lambda_2 \boldsymbol{\theta}_2^\top - \alpha_1 \boldsymbol{\theta}_1^\top \mathbf{C}_x \\ &= 2\boldsymbol{\theta}_2^\top \mathbf{C}_x - 2\lambda_2 \boldsymbol{\theta}_2^\top - \alpha_1 \lambda_1 \boldsymbol{\theta}_1^\top. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Ao igualar (B.12) ao vetor nulo $\mathbf{0}_N^\top$ e considerando-se que $\mathbf{C}_x^\top = \mathbf{C}_x$, tem-se

$$\mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_2 = \lambda_2 \boldsymbol{\theta}_2 + \frac{\alpha_1 \lambda_1}{2} \boldsymbol{\theta}_1. \quad (\text{B.13})$$

Multiplicando-se ambos os lados de (B.13) à esquerda por $\boldsymbol{\theta}_1^\top$, resulta

$$\boldsymbol{\theta}_1^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_2 = \lambda_2 \boldsymbol{\theta}_1^\top \boldsymbol{\theta}_2 + \frac{\alpha_1 \lambda_1}{2} \boldsymbol{\theta}_1^\top \boldsymbol{\theta}_1. \quad (\text{B.14})$$

A restrição de covariância nula entre componentes principais implica

$$\boldsymbol{\theta}_2^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_1 = \boldsymbol{\theta}_1^\top \mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_2 = 0, \quad (\text{B.15})$$

pois $\mathbf{C}_x^\top = \mathbf{C}_x$. Além disso, a solução para $k = 1$ garante que $\boldsymbol{\theta}_1^\top \mathbf{C}_x = \lambda_1 \boldsymbol{\theta}_1^\top$ com $\lambda_1 \neq 0$, de modo que (B.15) implica

$$\lambda_1 \boldsymbol{\theta}_1^\top \boldsymbol{\theta}_2 = 0 \Rightarrow \boldsymbol{\theta}_1^\top \boldsymbol{\theta}_2 = 0. \quad (\text{B.16})$$

Substituindo-se (B.15) e (B.16) em (B.14), e considerando-se a restrição $\boldsymbol{\theta}_1^\top \boldsymbol{\theta}_1 = 1$, tem-se

$$\frac{\alpha_1 \lambda_1}{2} \boldsymbol{\theta}_1^\top \boldsymbol{\theta}_1 = 0 \Rightarrow \frac{\alpha_1 \lambda_1}{2} = 0. \quad (\text{B.17})$$

Agora, substitui-se (B.17) em (B.13) e resulta, finalmente,

$$\mathbf{C}_x \boldsymbol{\theta}_2 = \lambda_2 \boldsymbol{\theta}_2.$$

Sendo assim, $\boldsymbol{\theta}_2$ é igual ao autovetor (de norma unitária, por restrição) de $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ associado ao autovalor λ_2 (não nulo, por hipótese). A variância da componente principal correspondente, segundo (B.8), vale

$$\sigma_{p_2}^2 = \boldsymbol{\theta}_2^\top \mathbf{C}_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\theta}_2 = \lambda_2 \boldsymbol{\theta}_2^\top \boldsymbol{\theta}_2 = \lambda_2.$$

Portanto, a máxima variância é atingida se $\lambda_2 \neq 0$ for igual ao maior autovalor de $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ que não o autovalor λ_1 , pois $\boldsymbol{\theta}_1^\top \boldsymbol{\theta}_2 = 0$ segundo (B.16) e $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ possui autovalores distintos, por hipótese. Portanto, a direção procurada $\boldsymbol{\theta}_2$ é igual ao autovetor (de norma unitária) de $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ associado ao seu segundo maior autovalor $\lambda_2 \neq 0$.

- ◇ Resultados análogos podem ser obtidos para $k = 3, 4, \dots, N_1$; *i.e.*, $\boldsymbol{\theta}_3, \boldsymbol{\theta}_4, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$ correspondem aos autovetores (de norma unitária) de $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$, associados respectivamente aos autovalores $\lambda_3, \lambda_4, \dots, \lambda_{N_1} \neq 0$ correspondentes ao terceiro maior autovalor, quarto maior autovalor, e assim por diante, até o menor autovalor de $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$.

□

A partir da Proposição B.1, tem-se uma maneira relativamente mais simples de determinar as direções das componentes principais de um vetor aleatório, envolvendo essencialmente a decomposição em autovalores e autovetores de sua matriz de covariância. Por isso, na prática, muito raramente se realiza o procedimento equivalente de busca da Definição B.1 (JOLLIFFE, 2002). Segundo a Proposição B.1, as direções $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$ das componentes principais são obrigatoriamente ortogonais. Apenas a partir da Definição B.1, entretanto, esse fato não é evidente.

Por fim, cabe uma nota à respeito da hipótese considerada, na Proposição B.1, sobre os autovalores da matriz de covariância de \mathbf{x} . Para obter as componentes principais conforme essa proposição, foi necessário considerar como hipótese que $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ tem autovalores distintos e positivos. Na realidade, essa suposição precede a Proposição B.1 — ela também deve ser considerada logo na Definição B.1 para que as componentes principais sejam definidas de maneira consistente. Na prática, muitas vezes se trata de uma hipótese razoável (JOLLIFFE, 2002). Em contrapartida, também se pode justificá-la teoricamente:

- ◇ Se $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ tiver $L_1 \geq 2$ autovalores repetidos, então o autoespaço associado a esses autovalores possui dimensão L_1 — pois $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ é simétrica e sempre ortogonalmente diagonalizável. Logo, há infinitas possibilidades para as direções dos correspondentes autovetores, desde que sejam ortogonais e pertençam a esse autoespaço. Sendo assim, não é possível definir as direções das componentes principais com unicidade.
- ◇ Se $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ possuir $L_2 \geq 1$ autovalores nulos, pode-se demonstrar que há L_2 variáveis aleatórias em \mathbf{x} que podem ser expressas como combinações lineares exatas das demais. Sendo assim, as variáveis redundantes poderiam ser removidas sem perda

de informação em relação a \underline{x} . Em tese, recomenda-se realizar essa remoção antes de proceder à análise de componentes principais (JOLLIFFE, 2002). Mesmo assim, se fosse considerada a possibilidade de $\mathbf{C}_{\underline{x}}$ ter autovalores nulos, a Proposição B.1 continuaria valendo, mas precisaria de alguns ajustes em sua demonstração. Nesse caso, seria admitida a possibilidade de as componentes principais terem variância nula. Portanto, em aplicações práticas, a análise de componentes principais é comumente utilizada para identificar e eliminar relações lineares, ou aproximadamente lineares, existentes entre variáveis de \underline{x} (JOLLIFFE, 2002).

Nessa seção, considerou-se a definição das componentes principais de um vetor aleatório com média e matriz de covariância conhecidas. Trata-se de um caso pouco comum na prática. A seguir, apresenta-se a definição de componentes principais amostrais, *i.e.*, quando não se dispõe da média e matriz de covariância exatas do vetor aleatório.

B.2 Componentes principais: caso amostral

Seja um vetor aleatório real \underline{x} dado conforme (B.1) e constituído pelas variáveis aleatórias x_1, x_2, \dots, x_N . A seguir, considera-se que a média e a matriz de covariância de \underline{x} , definidas respectivamente em (B.5) e (B.6), são desconhecidas. Nesse caso, a análise de componentes principais deve ser feita sobre observações de sorteios independentes de \underline{x} . Sendo assim, supõe-se que foram feitas T observações de sorteios independentes do vetor aleatório \underline{x} , resultando em vetores de observação $\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(T-1)}$. O i -ésimo vetor de observação, com $i = 0, 1, \dots, T - 1$, é dado por

$$\mathbf{x}^{(i)} = [x_1^{(i)} \ x_2^{(i)} \ \dots \ x_N^{(i)}]^\top, \quad (\text{B.18})$$

em que $x_\ell^{(i)}$ é um escalar correspondente à i -ésima observação do ℓ -ésimo elemento de \underline{x} , com $\ell = 1, 2, \dots, N$.

Na Subseção B.2.1, apresenta-se a definição de componentes principais amostrais para o vetor aleatório \underline{x} (JOLLIFFE, 2002). Na Subseção B.2.2, aborda-se como as componentes principais amostrais podem ser obtidas a partir da matriz de covariância estimada desse vetor. Na Subseção B.2.3, aborda-se como essas componentes podem ser obtidas a partir de uma decomposição particular da matriz de dados observados. Por fim, na Subseção B.2.4 aborda-se a relação entre as projeções das observações sobre as componentes principais e a aproximação da matriz de dados observados por uma matriz de posto inferior.

B.2.1 Definição de componentes principais amostrais

Definição B.2. Seja um vetor aleatório real \underline{x} de $N \geq 2$ elementos, com média e matriz de covariância desconhecidas. Definem-se combinações lineares das variáveis aleatórias em

\mathbf{x} , para $k = 1, 2, \dots, N_1 < N$, como

$$\boxed{p_k = \boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{x}},$$

em que $\boldsymbol{\theta}_k = [\theta_{1,k} \ \theta_{2,k} \ \dots \ \theta_{N,k}]^\top$ são vetores de coeficientes com $\boldsymbol{\theta}_k^\top \boldsymbol{\theta}_k = 1$, cada um representando uma direção em \mathbb{R}^N . Dispõe-se de T observações de sorteios independentes de \mathbf{x} , dadas pelos vetores de observação $\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(T-1)} \in \mathbb{R}^N$. As observações das variáveis aleatórias p_k , para $k = 1, 2, \dots, N_1 < N$, são dadas por

$$\boxed{p_k^{(i)} = \boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{x}^{(i)}}, \quad (\text{B.19})$$

com $i = 0, 1, \dots, T-1$. Os vetores $\boldsymbol{\theta}_k$ são determinados, para $k = 1, 2, \dots, N_1$ sequencialmente e nessa ordem, tais que

(i) a estimativa da variância de p_k , dada por

$$\widehat{\sigma}_{p_k}^2 = \frac{1}{T-1} \sum_{i=0}^{T-1} (p_k^{(i)} - \widehat{m}_{p_k})^2, \quad (\text{B.20})$$

em que

$$\widehat{m}_{p_k} = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} p_k^{(i)}, \quad (\text{B.21})$$

seja máxima; e

(ii) a estimativa da covariância entre p_k e p_ℓ , dada por

$$\widehat{\sigma}_{p_k \cdot p_\ell}^2 = \frac{1}{T-1} \sum_{i=0}^{T-1} (p_k^{(i)} - \widehat{m}_{p_k})(p_\ell^{(i)} - \widehat{m}_{p_\ell}), \quad (\text{B.22})$$

para todo $\ell = 1, 2, \dots, k-1$, seja igual a zero.

Sob essas condições, as N_1 componentes principais amostrais de \mathbf{x} são definidas como as variáveis aleatórias p_1, p_2, \dots, p_{N_1} , em ordem decrescente de variância. As direções das respectivas componentes principais amostrais de \mathbf{x} são definidas como os vetores de coeficientes $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$. \triangleleft

Assim como no caso exato apresentado na Definição B.1, no caso amostral o procedimento de obtenção das componentes principais amostrais também consiste em uma busca sequencial de direções $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1} \in \mathbb{R}^N$. A diferença, aqui, é que a média e a matriz de covariância do vetor aleatório \mathbf{x} não são conhecidas. Portanto, a busca é feita de modo a maximizar a estimativa da variância de cada combinação linear das variáveis em \mathbf{x} , e anular a estimativa da covariância entre combinações lineares distintas (JOLLIFFE, 2002). Essas estimativas são feitas com base nas observações de \mathbf{x} de que se dispõe. Na Definição B.2, foram consideradas estimativas para as médias, variâncias e covariâncias conforme (B.21), (B.20) e (B.22), respectivamente. Trata-se de estimativas baseadas em estimadores não enviesados e consistentes (PAPOULIS; PILLAI, 2002).

A fim de obter uma representação adequada das variáveis aleatórias $\underline{x}_1, \underline{x}_2, \dots, \underline{x}_N$ a partir das componentes principais amostrais obtidas, novamente é relevante que se faça a escolha apropriada do número $N_1 < N$ de componentes a serem consideradas. Quanto a isso, as mesmas considerações feitas para o caso exato, na Seção B.1, valem também para o caso amostral (JOLLIFFE, 2002).

Na prática, no entanto, o procedimento de busca apresentado na Definição B.2 poucas vezes é utilizado. Similarmente ao caso exato, a seguir mostra-se que a determinação das direções das componentes principais amostrais pode ser feita de maneira mais simples.

B.2.2 Decomposição em autovalores e autovetores da matriz de covariância estimada

Seja o vetor aleatório real \underline{x} com N elementos definido em (B.1) e sejam suas observações $\mathbf{x}^{(i)} \in \mathbb{R}^N$, com $i = 0, 1, \dots, T - 1$, dadas por (B.18). Partindo-se de estimadores não viesados e consistentes para a média e para a matriz de covariância do vetor aleatório \underline{x} — definidas em (B.5) e (B.6), respectivamente —, é possível obter as respectivas estimativas baseadas em observações (PAPOULIS; PILLAI, 2002; JOLLIFFE, 2002) conforme

$$\widehat{\mathbf{m}}_{\underline{x}} = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} \mathbf{x}^{(i)} \in \mathbb{R}^N \quad (\text{B.23})$$

e

$$\widehat{\mathbf{C}}_{\underline{x}} = \frac{1}{T-1} \sum_{i=0}^{T-1} (\mathbf{x}^{(i)} - \widehat{\mathbf{m}}_{\underline{x}})(\mathbf{x}^{(i)} - \widehat{\mathbf{m}}_{\underline{x}})^{\top} \in \mathbb{R}^{N \times N}. \quad (\text{B.24})$$

A partir de (B.24), pode-se mostrar que $\widehat{\mathbf{C}}_{\underline{x}}$ é positiva semidefinida e possui autovalores reais não negativos (PICINBONO, 1993; HAYKIN, 2014). Conforme a proposição a seguir, as componentes principais amostrais podem ser obtidas diretamente a partir de uma fatoração da matriz $\widehat{\mathbf{C}}_{\underline{x}}$ (JOLLIFFE, 2002).

Proposição B.2. *Seja um vetor aleatório real \underline{x} de $N \geq 2$ elementos, com média e matriz de covariância desconhecidas. Seja a estimativa $\widehat{\mathbf{C}}_{\underline{x}}$ da matriz de covariância de \underline{x} dada por (B.24). Seja a decomposição em autovalores e autovetores de $\widehat{\mathbf{C}}_{\underline{x}}$ expressa conforme*

$$\widehat{\mathbf{C}}_{\underline{x}} = \mathbf{\Theta} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Theta}^{\top}, \quad (\text{B.25})$$

em que $\mathbf{\Theta} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é ortogonal e $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é diagonal com elementos da diagonal principal distintos, positivos e providencialmente dispostos em ordem decrescente.

As primeiras N_1 colunas de $\mathbf{\Theta}$ correspondem às direções $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$, nessa ordem, das componentes principais amostrais de \underline{x} (conforme a Definição B.2). Além disso, os primeiros N_1 elementos da diagonal principal de $\mathbf{\Lambda}$ correspondem às variâncias estimadas das componentes principais amostrais com direções $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$, nessa ordem.

Considerações sobre a demonstração. A prova dessa proposição é muito similar à da Proposição B.1 para o caso exato abordado na Subseção B.1.2, com a diferença de que o problema de otimização da Definição B.2 depende de estimativas de variâncias e covariâncias das combinações lineares das variáveis aleatórias em \underline{x} . Embora a demonstração global seja omitida, são apresentadas as demonstrações das expressões que relacionam as estimativas necessárias em termos dos vetores de coeficientes e das estimativas conhecidas.

A seguir, consideram-se as equações da Definição B.2; em particular, considera-se (B.19) para a i -ésima observação de p_k , com $k = 1, 2, \dots, N_1$ e $i = 0, 1, \dots, T-1$. A partir de (B.21) e (B.23), a média estimada de p_k , para $k = 1, 2, \dots, N_1$, pode ser expressa como

$$\widehat{m}_{p_k} = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} \boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{x}^{(i)} = \boldsymbol{\theta}_k^\top \widehat{\mathbf{m}}_{\underline{x}} \quad (\text{B.26})$$

Considerando-se agora (B.22), (B.24) e (B.26), a covariância estimada entre p_k e p_ℓ , para $k = 1, 2, \dots, N_1$ e $\ell = 1, 2, \dots, k-1$, pode ser expressa como

$$\begin{aligned} \widehat{\sigma}_{p_k, p_\ell}^2 &= \frac{1}{T-1} \sum_{i=0}^{T-1} (\boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{x}^{(i)} - \boldsymbol{\theta}_k^\top \widehat{\mathbf{m}}_{\underline{x}}) (\boldsymbol{\theta}_\ell^\top \mathbf{x}^{(i)} - \boldsymbol{\theta}_\ell^\top \widehat{\mathbf{m}}_{\underline{x}}) \\ &= \boldsymbol{\theta}_k^\top \left(\frac{1}{T-1} \sum_{i=0}^{T-1} (\mathbf{x}^{(i)} - \widehat{\mathbf{m}}_{\underline{x}}) (\mathbf{x}^{(i)} - \widehat{\mathbf{m}}_{\underline{x}})^\top \right) \boldsymbol{\theta}_\ell \\ &= \boldsymbol{\theta}_k^\top \widehat{\mathbf{C}}_{\underline{x}} \boldsymbol{\theta}_\ell. \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

Finalmente, a partir de (B.20), (B.24) e (B.26), a variância estimada de p_k , para $k = 1, 2, \dots, N_1$, pode ser escrita conforme

$$\begin{aligned} \widehat{\sigma}_{p_k}^2 &= \frac{1}{T-1} \sum_{i=0}^{T-1} (\boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{x}^{(i)} - \boldsymbol{\theta}_k^\top \widehat{\mathbf{m}}_{\underline{x}})^2 \\ &= \boldsymbol{\theta}_k^\top \left(\frac{1}{T-1} \sum_{i=0}^{T-1} (\mathbf{x}^{(i)} - \widehat{\mathbf{m}}_{\underline{x}}) (\mathbf{x}^{(i)} - \widehat{\mathbf{m}}_{\underline{x}})^\top \right) \boldsymbol{\theta}_k \\ &= \boldsymbol{\theta}_k^\top \widehat{\mathbf{C}}_{\underline{x}} \boldsymbol{\theta}_k. \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

As Equações (B.27) e (B.28) são análogas às Equações (B.7) e (B.8), respectivamente, da demonstração da Proposição B.1. \square

Segundo a Proposição B.2, as direções das componentes principais amostrais de um vetor aleatório podem ser obtidas realizando-se a decomposição em autovalores e autovetores de sua matriz de covariância estimada. Em relação ao caso exato abordado na Subseção B.1.2, a única diferença é que lá as componentes principais são obtidas a partir da decomposição da matriz de covariância exata, visto que naquele caso essa matriz é conhecida (JOLLIFFE, 2002). Além disso, analogamente ao caso exato, a Proposição B.2 permite afirmar que as direções das componentes principais amostrais são sempre ortogonais — o que também não é evidente a partir da Definição B.2.

A hipótese sobre os autovalores da matriz de covariância $\mathbf{C}_{\mathbf{x}}$ na Proposição B.1 para o caso exato também está presente na Proposição B.2, mas agora sobre os autovalores da matriz de covariância estimada $\widehat{\mathbf{C}}_{\mathbf{x}}$. Na verdade, além de ser considerada na Proposição B.2, essa suposição também deve ser levada em conta na Definição B.2 para que as componentes principais amostrais sejam definidas de modo consistente. Embora seja muito raro $\widehat{\mathbf{C}}_{\mathbf{x}}$ ter autovalores nulos ou repetidos na prática (JOLLIFFE, 2002), há razões teóricas para justificar essa hipótese. A justificativa é um pouco diferente daquela apresentada para o caso exato na Subseção B.1.2, pois algumas interpretações válidas para a matriz de covariância não se mantêm para sua estimativa. Resumidamente, $\widehat{\mathbf{C}}_{\mathbf{x}}$ deve ter autovalores distintos e positivos para que se garanta a unicidade das componentes principais amostrais e se evitem casos de redundância. Uma discussão mais detalhada sobre essa hipótese pode ser encontrada em Jolliffe (2002, Sec. 3.4).

Por fim, o procedimento sugerido com base na Proposição B.2 envolve como passo inicial o cálculo da estimativa da matriz de covariância e a posterior decomposição dessa matriz em autovalores e autovetores. A seguir, apresenta-se uma outra forma de obter as componentes principais amostrais diretamente a partir das observações do vetor aleatório \mathbf{x} , e, ainda, de forma computacionalmente eficiente.

B.2.3 Decomposição em valores singulares da matriz de dados

Considera-se, nesta seção, o vetor aleatório real \mathbf{x} com N elementos, definido em (B.1), cujas observações $\mathbf{x}^{(i)} \in \mathbb{R}^N$, com $i = 0, 1, \dots, T-1$, são dadas por (B.18). Por conveniência, os T vetores de observação são dispostos em uma matriz de dados dada compactamente por

$$\mathbf{X} = [\mathbf{x}^{(0)} \quad \mathbf{x}^{(1)} \quad \dots \quad \mathbf{x}^{(T-1)}] \in \mathbb{R}^{N \times T},$$

ou escrita por extenso conforme

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1^{(0)} & x_1^{(1)} & \dots & x_1^{(T-1)} \\ x_2^{(0)} & x_2^{(1)} & \dots & x_2^{(T-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_N^{(0)} & x_N^{(1)} & \dots & x_N^{(T-1)} \end{bmatrix}.$$

Define-se, ainda, a matriz de dados centralizada a partir da média amostral como

$$\mathbf{X}_c = [\mathbf{x}_c^{(0)} \quad \mathbf{x}_c^{(1)} \quad \dots \quad \mathbf{x}_c^{(T-1)}] \in \mathbb{R}^{N \times T}, \quad (\text{B.29})$$

em que, para $i = 0, 1, \dots, T-1$,

$$\mathbf{x}_c^{(i)} = \mathbf{x}^{(i)} - \widehat{\mathbf{m}}_{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^N, \quad (\text{B.30})$$

são os vetores de observação centralizados e $\widehat{\mathbf{m}}_{\mathbf{x}}$ denota a média estimada de \mathbf{x} conforme (B.23).

A seguir, utiliza-se uma decomposição da matriz de dados para obter, de maneira alternativa à Proposição B.2, as componentes principais amostrais de \mathbf{x} . Essa decomposição é conhecida, no contexto de álgebra linear e teoria de matrizes, como decomposição em valores singulares² (SVD, do inglês *singular value decomposition*) e possui diversas aplicações em métodos numéricos e processamento estatístico de sinais. Especificamente no contexto de análise de componentes principais, é mais útil considerar a SVD reduzida³ (JOLLIFFE, 2002). A aplicação dessa decomposição à matriz de dados centralizada \mathbf{X}_c leva à seguinte proposição.

Proposição B.3. *Seja um vetor aleatório real \mathbf{x} de $N \geq 2$ elementos, com média e matriz de covariância desconhecidas. Dispõe-se de $T \geq N$ observações desse vetor denotadas por $\mathbf{x}^{(i)} \in \mathbb{R}^N$, com $i = 0, 1, \dots, T - 1$. Essas observações são organizadas em uma matriz de dados centralizada $\mathbf{X}_c \in \mathbb{R}^{N \times T}$ conforme (B.29). Seja a SVD reduzida de \mathbf{X}_c expressa conforme*

$$\boxed{\mathbf{X}_c = \mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma}_N \mathbf{V}_1^\top}, \quad (\text{B.31})$$

em que $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é uma matriz ortogonal, $\mathbf{V}_1 \in \mathbb{R}^{T \times N}$ é uma matriz tal que $\mathbf{V}_1^\top \mathbf{V}_1 = \mathbf{I}_N$ e $\boldsymbol{\Sigma}_N \in \mathbb{R}^{N \times N}$ é uma matriz diagonal com elementos da diagonal principal distintos e positivos.

As primeiras N_1 colunas de \mathbf{U} correspondem às direções $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$, nessa ordem, das componentes principais amostrais de \mathbf{x} (conforme a Definição B.2). Além disso, os primeiros N_1 elementos da diagonal principal de $\boldsymbol{\Sigma}_N^2$ correspondem às variâncias estimadas das componentes principais amostrais com direções $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$, nessa ordem, multiplicadas por um fator $T - 1$.

Demonstração. A matriz de covariância estimada $\widehat{\mathbf{C}}_{\mathbf{x}}$ do vetor aleatório \mathbf{x} , definida em (B.24), pode ser escrita como

$$\widehat{\mathbf{C}}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{T-1} \mathbf{X}_c \mathbf{X}_c^\top. \quad (\text{B.32})$$

Substituindo-se (B.31) em (B.32), tem-se

$$\widehat{\mathbf{C}}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{T-1} (\mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma}_N \mathbf{V}_1^\top) (\mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma}_N \mathbf{V}_1^\top)^\top = \frac{1}{T-1} \mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma}_N \underbrace{\mathbf{V}_1^\top \mathbf{V}_1}_{=\mathbf{I}_N} \boldsymbol{\Sigma}_N \mathbf{U}^\top = \mathbf{U} \left(\frac{1}{T-1} \boldsymbol{\Sigma}_N^2 \right) \mathbf{U}^\top.$$

² Conforme Golub e Van Loan (2013), a decomposição em valores singulares de $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times K}$ é dada por

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{V}^\top,$$

em que as matrizes $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{M \times M}$ e $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{K \times K}$ são ortogonais e $\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_P) \in \mathbb{R}^{M \times K}$ é matriz retangular diagonal com $P = \min\{M, K\}$ e $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_P \geq 0$. Os escalares reais e positivos $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_P$ são denominados valores singulares de \mathbf{A} .

³ Conforme Golub e Van Loan (2013), a decomposição em valores singulares reduzida de $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times K}$, com $M \leq K$, é dada por

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma}_M \mathbf{V}_1^\top,$$

em que $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{M \times M}$ é ortogonal, $\mathbf{V}_1 \in \mathbb{R}^{K \times M}$ satisfaz $\mathbf{V}_1^\top \mathbf{V}_1 = \mathbf{I}_M$ e $\boldsymbol{\Sigma}_M = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_M) \in \mathbb{R}^{M \times M}$ é matriz diagonal com $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_M \geq 0$.

A hipótese de valores singulares distintos na decomposição (B.31), e a hipótese de autovalores distintos na decomposição (B.25), implicam a unicidade dessas decomposições sob certas condições análogas às da Proposição 6.1 (GOLUB; VAN LOAN, 2013). Comparando-se as expressões, obtém-se

$$\mathbf{U} = \mathbf{\Theta} \quad \text{e} \quad \frac{1}{T-1} \mathbf{\Sigma}_N^2 = \mathbf{\Lambda}.$$

A primeira igualdade é verdadeira a menos de eventuais diferenças no sinal das colunas de \mathbf{U} e $\mathbf{\Theta}$; isso não interfere nas direções dessas colunas, mas apenas no seus sentidos. A segunda igualdade é sempre válida, pois supõe-se que os valores singulares em $\mathbf{\Sigma}_N$, bem como os autovalores em $\mathbf{\Lambda}$, são positivos e mantidos em ordem decrescente. Com base nas expressões obtidas e na Proposição B.2, as direções das componentes principais amostrais se encontram nas N_1 primeiras colunas de \mathbf{U} , e as variâncias estimadas das respectivas componentes se encontram nos primeiros N_1 termos da diagonal principal de $\mathbf{\Sigma}_N^2$, todas multiplicadas por um fator $T-1$. \square

A obtenção das componentes principais amostrais via SVD reduzida conforme a Proposição B.3 não é uma ideia nova (JOLLIFFE, 2002), mas é amplamente defendida na área de análise multivariada pois é menos dispendiosa computacionalmente do que o cálculo da decomposição em autovalores e autovetores da matriz de covariância estimada do vetor aleatório. Outra vantagem proveniente da obtenção das componentes amostrais a partir da SVD reduzida é dada pela seguinte proposição.

Proposição B.4. *Segundo a Proposição B.3, a SVD reduzida da matriz de dados centralizada $\mathbf{X}_c \in \mathbb{R}^{N \times T}$ fornece automaticamente, em cada uma das colunas de $\mathbf{V}_1^T \in \mathbb{R}^{N \times T}$, observações de cada uma das componentes principais amostrais centralizadas empiricamente — i.e., com médias amostrais nulas — e normalizadas empiricamente — i.e., com variâncias amostrais iguais a $1/(T-1)$.*

Demonstração. Seja o vetor aleatório das $N_1 < N$ componentes principais amostrais definido como $\mathbf{p} = [p_1 \ p_2 \ \cdots \ p_{N_1}]^T$, cujas observações para $i = 0, 1, \dots, T-1$ são dadas por

$$\mathbf{p}^{(i)} = [p_1^{(i)} \ p_2^{(i)} \ \cdots \ p_{N_1}^{(i)}]^T,$$

em que $p_k^{(i)}$ corresponde à i -ésima observação da k -ésima componente principal amostral, com $k = 1, 2, \dots, N_1$, conforme (B.19). A estimativa da média de \mathbf{p} é calculada, analogamente a (B.23), conforme

$$\widehat{\mathbf{m}}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} \mathbf{p}^{(i)} \in \mathbb{R}^{N_1}.$$

A matriz de observações centralizadas das componentes amostrais é definida como

$$\mathbf{P}_c = [\mathbf{p}_c^{(0)} \ \mathbf{p}_c^{(1)} \ \cdots \ \mathbf{p}_c^{(T-1)}] \in \mathbb{R}^{N_1 \times T}, \quad (\text{B.33})$$

em que, para $i = 0, 1, \dots, T - 1$, tem-se

$$\mathbf{p}_c^{(i)} = \mathbf{p}^{(i)} - \widehat{\mathbf{m}}_{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^{N_1}.$$

A matriz \mathbf{U} , definida na Proposição B.3, pode ser particionada conforme

$$\mathbf{U} = [\mathbf{U}_1 \ \mathbf{U}_2], \quad (\text{B.34})$$

em que $\mathbf{U}_1 \in \mathbb{R}^{N \times N_1}$ e $\mathbf{U}_2 \in \mathbb{R}^{N \times (N - N_1)}$. Também conforme a Proposição B.3, tem-se que

$$\mathbf{U}_1 = [\boldsymbol{\theta}_1 \ \boldsymbol{\theta}_2 \ \cdots \ \boldsymbol{\theta}_{N_1}], \quad (\text{B.35})$$

em que $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$ correspondem às direções das componentes principais amostrais. Com base em (B.33), (B.35) e (B.29), pode-se expressar (B.19) de maneira matricial conforme

$$\boxed{\mathbf{P}_c = \mathbf{U}_1^T \mathbf{X}_c.} \quad (\text{B.36})$$

Substituindo-se (B.31) e (B.34) em (B.36), tem-se

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_c &= \mathbf{U}_1^T \mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma}_N \mathbf{V}_1^T = \mathbf{U}_1^T [\mathbf{U}_1 \ \mathbf{U}_2] \boldsymbol{\Sigma}_N \mathbf{V}_1^T \\ &= [\mathbf{U}_1^T \mathbf{U}_1 \ \mathbf{U}_1^T \mathbf{U}_2] \boldsymbol{\Sigma}_N \mathbf{V}_1^T. \end{aligned}$$

A ortogonalidade de \mathbf{U} implica $\mathbf{U}_1^T \mathbf{U}_1 = \mathbf{I}_{N_1}$ e $\mathbf{U}_1^T \mathbf{U}_2 = \mathbf{0}_{N_1 \times (N - N_1)}$. Logo,

$$\mathbf{P}_c = [\mathbf{I}_{N_1} \ \mathbf{0}_{N_1 \times (N - N_1)}] \boldsymbol{\Sigma}_N \mathbf{V}_1^T. \quad (\text{B.37})$$

A matriz \mathbf{P}_c é igual a uma matriz com as primeiras N_1 linhas de $\boldsymbol{\Sigma}_N \mathbf{V}_1^T$. A matriz $\boldsymbol{\Sigma}_N$ é diagonal e representa apenas mudanças de escala em cada linha de \mathbf{V}_1^T . A matriz \mathbf{V}_1^T é formada por N linhas ortogonais e todas de norma unitária. Como \mathbf{P}_c é a matriz de observações das componentes principais amostrais, tem-se que as primeiras N_1 linhas de \mathbf{V}_1^T são uma versão de \mathbf{P}_c normalizada, *i.e.*, com variâncias amostrais de todas as linhas iguais e valendo $1/(T - 1)$. \square

Em aplicações práticas, a matriz \mathbf{V}_1^T é útil quando se deseja realizar branqueamento espacial no contexto de separação cega de fontes. Na Seção 6.1, o branqueamento foi abordado supondo conhecidas a média e a matriz de covariância do vetor aleatório de misturas \mathbf{x} . No caso em que essas estatísticas de \mathbf{x} não são conhecidas, o branqueamento deve tornar nulas estimativas da covariância entre misturas distintas, além de igualar a um as estimativas das variâncias de cada uma das misturas. De acordo com a Proposição B.4, como as linhas de \mathbf{V}_1^T já são ortogonais e todas possuem normas unitárias, então a matriz $\sqrt{T - 1} \mathbf{V}_1^T$ fornece diretamente versões empiricamente branqueadas das observações do vetor aleatório de misturas \mathbf{x} (HYVÄRINEN; OJA, 2000).

B.2.4 Relação com aproximações de posto inferior

A seguir, aborda-se o procedimento de obtenção de componentes principais amostrais detalhado até aqui e comentam-se suas relações com aproximações de posto inferior de matrizes via SVD. Seja a matriz

$$\boxed{\bar{\mathbf{X}}_c = \mathbf{U}_1 \mathbf{P}_c \in \mathbb{R}^{N \times T}}. \quad (\text{B.38})$$

em que $\mathbf{U}_1 \in \mathbb{R}^{N \times N_1}$ é uma matriz com colunas correspondentes às direções das componentes principais amostrais segundo (B.35), e $\mathbf{P}_c \in \mathbb{R}^{N_1 \times T}$ é a matriz de observações das componentes principais amostrais centralizadas segundo (B.33). Substituindo-se (B.36) em (B.38), tem-se

$$\bar{\mathbf{X}}_c = \mathbf{U}_1 \mathbf{U}_1^\top \mathbf{X}_c. \quad (\text{B.39})$$

Agora, substituindo-se (B.29) e (B.35) em (B.39), tem-se

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{X}}_c &= [\boldsymbol{\theta}_1 \ \boldsymbol{\theta}_2 \ \cdots \ \boldsymbol{\theta}_{N_1}] \begin{bmatrix} \boldsymbol{\theta}_1^\top \\ \boldsymbol{\theta}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{\theta}_{N_1}^\top \end{bmatrix} [\mathbf{x}_c^{(0)} \ \mathbf{x}_c^{(1)} \ \cdots \ \mathbf{x}_c^{(T-1)}] \\ &= [\boldsymbol{\theta}_1 \ \boldsymbol{\theta}_2 \ \cdots \ \boldsymbol{\theta}_{N_1}] \begin{bmatrix} \boldsymbol{\theta}_1^\top \mathbf{x}_c^{(0)} & \boldsymbol{\theta}_1^\top \mathbf{x}_c^{(1)} & \cdots & \boldsymbol{\theta}_1^\top \mathbf{x}_c^{(T-1)} \\ \boldsymbol{\theta}_2^\top \mathbf{x}_c^{(0)} & \boldsymbol{\theta}_2^\top \mathbf{x}_c^{(1)} & \cdots & \boldsymbol{\theta}_2^\top \mathbf{x}_c^{(T-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{\theta}_{N_1}^\top \mathbf{x}_c^{(0)} & \boldsymbol{\theta}_{N_1}^\top \mathbf{x}_c^{(1)} & \cdots & \boldsymbol{\theta}_{N_1}^\top \mathbf{x}_c^{(T-1)} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^{N_1} (\boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{x}_c^{(0)}) \boldsymbol{\theta}_k & \sum_{k=1}^{N_1} (\boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{x}_c^{(1)}) \boldsymbol{\theta}_k & \cdots & \sum_{k=1}^{N_1} (\boldsymbol{\theta}_k^\top \mathbf{x}_c^{(T-1)}) \boldsymbol{\theta}_k \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.40})$$

em que, para $i = 0, 1, \dots, T-1$, $\mathbf{x}_c^{(i)}$ corresponde à i -ésima observação centralizada de \mathbf{x} segundo (B.30). Com base em (B.40), verifica-se que a matriz $\bar{\mathbf{X}}_c$ tem, em cada uma de suas colunas, a projeção ortogonal vetorial de cada coluna da matriz de observações \mathbf{X}_c sobre o subespaço vetorial gerado pelas direções das componentes principais amostrais $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_{N_1}$. Sendo assim, pode-se compreender $\bar{\mathbf{X}}_c$ como a reconstrução das observações da matriz de dados \mathbf{X}_c a partir das componentes principais amostrais. Resta saber se essa reconstrução é ótima em algum sentido.

Substituindo-se (B.37) em (B.38), tem-se

$$\bar{\mathbf{X}}_c = [\mathbf{U}_1 \ \mathbf{0}_{N_1 \times (N-N_1)}] \boldsymbol{\Sigma}_N \mathbf{V}_1^\top. \quad (\text{B.41})$$

Particionando-se $\boldsymbol{\Sigma}_N \in \mathbb{R}^{N \times N}$, tem-se

$$\boldsymbol{\Sigma}_N = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{N_1} & \mathbf{0}_{N_1 \times (N-N_1)} \\ \mathbf{0}_{(N-N_1) \times N_1} & \boldsymbol{\Sigma}_{N-N_1} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.42})$$

com $\Sigma_{N_1} \in \mathbb{R}^{N_1 \times N_1}$ e $\Sigma_{N-N_1} \in \mathbb{R}^{(N-N_1) \times (N-N_1)}$ matrizes diagonais com elementos da diagonal principal positivos e distintos. Substituindo-se (B.42) em (B.41), tem-se

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{X}}_c &= [\mathbf{U}_1 \ \mathbf{0}_{N_1 \times (N-N_1)}] \begin{bmatrix} \Sigma_{N_1} & \mathbf{0}_{N_1 \times (N-N_1)} \\ \mathbf{0}_{(N-N_1) \times N_1} & \Sigma_{N-N_1} \end{bmatrix} \mathbf{V}_1^\top \\ &= \mathbf{U} \begin{bmatrix} \Sigma_{N_1} & \mathbf{0}_{N_1 \times (N-N_1)} \\ \mathbf{0}_{(N-N_1) \times N_1} & \mathbf{0}_{(N-N_1) \times (N-N_1)} \end{bmatrix} \mathbf{V}_1^\top. \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$

Portanto, $\bar{\mathbf{X}}_c$ pode ser interpretada como a SVD reduzida de \mathbf{X}_c truncada, *i.e.*, tomada substituindo-se os seus $N - N_1$ menores valores singulares por zero. Logo, tem-se que $\bar{\mathbf{X}}_c$ é uma aproximação por truncamento de SVD de \mathbf{X}_c . Enquanto \mathbf{X}_c tem posto N , a matriz $\bar{\mathbf{X}}_c$ tem posto $N_1 < N$.

Segundo o teorema de Eckhart–Young de álgebra linear (GOLUB; VAN LOAN, 2013), é possível demonstrar que $\bar{\mathbf{X}}_c$ conforme (B.43) é a melhor aproximação de posto N_1 da matriz \mathbf{X}_c , no sentido de que minimiza tanto a norma de Frobenius quanto a norma-2 induzida da diferença $\mathbf{X}_c - \bar{\mathbf{X}}_c$. Portanto, a reconstrução $\bar{\mathbf{X}}_c$ via N_1 componentes principais amostrais é a melhor aproximação de posto N_1 dos dados originais \mathbf{X}_c , nos sentidos explicitados acima. Trata-se de mais uma propriedade interessante das componentes principais amostrais.

B.3 Relações com outras técnicas de decomposição de variáveis aleatórias

De acordo com as Seções B.1 e B.2, as técnicas de análise de componentes principais são baseadas em transformações lineares que impõem restrições sobre momentos de ordem dois (*i.e.*, variâncias e covariâncias) ou sobre estimativas desses momentos. Na literatura, diversos termos são utilizados para se referir a técnicas semelhantes, mas nem sempre equivalentes, também baseadas em estatísticas até a ordem dois e com ou sem redução de dimensionalidade (AHMED; RAO, 1975; GERBRANDS, 1981; JOLLIFFE, 2002; COMON; JUTTEN, 2010). Três desses termos são elencados e comentados a seguir:

- ◇ *Análise fatorial.* Trata-se de uma área de estudo em estatística à qual estão relacionadas técnicas para determinação de fatores latentes (*i.e.*, variáveis aleatórias escondidas) a partir de matrizes de covariância (JOLLIFFE, 2002). Técnicas de análise fatorial podem possuir diferenças significativas em relação às técnicas de PCA, principalmente pois supõem um modelo estatístico *a priori* para os dados. Em geral, nesse modelo considera-se também a existência de ruído aditivo nas observações (JOLLIFFE, 2002). Em PCA, no entanto, não se supõe um modelo particular para os dados.
- ◇ *Transformada de Karhunen–Loève.* Nessa técnica, utiliza-se um princípio similar de ortogonalização e eventual redução de dimensionalidade ao de PCA, mas usualmente sobre as variáveis aleatórias que compõem, ao longo do tempo, um processo

estocástico. Em geral, o processamento é temporal — *i.e.*, feito sobre a matriz de autocovariância ou autocorrelação do processo (PAPOULIS; PILLAI, 2002). Em contrapartida, no contexto usual de PCA, o processamento é espacial — *i.e.*, feito sobre a matriz de covariância de um vetor aleatório qualquer. Destaca-se, no entanto, que a distinção entre esses termos não é seguida à risca na literatura de processamento estatístico de sinais; em Ahmed e Rao (1975), por exemplo, transformada de Karhunen–Loève e PCA são utilizados como sinônimos, sem distinção entre os tipos de processamento — *i.e.*, temporal ou espacial — feitos em cada caso.

- ◇ *Branqueamento*. Trata-se de um procedimento de decorrelação de variáveis aleatórias a partir de transformações lineares (PAPOULIS; PILLAI, 2002), envolvendo um passo adicional de normalização das variáveis para que tenham todas a mesma variância. Após esse procedimento ser realizado sobre um vetor aleatório, a matriz de covariância associada deve ser diagonal constante (usualmente, impõem-se variâncias unitárias e obtém-se uma matriz identidade). A questão do branqueamento espacial no contexto de separação cega de fontes é abordada por meio de um exemplo numérico na Seção 6.3. No caso geral, branqueamento não é sinônimo de PCA pois não realiza a redução de dimensionalidade. No entanto, se o interesse for apenas voltado ao branqueamento empírico de um conjunto de dados, pode-se simplesmente aplicar um procedimento de PCA com $N_1 = N$. Esse procedimento resultará no branqueamento empírico se for feita, posteriormente, uma normalização pelas variâncias empíricas dos dados.

Enquanto as técnicas de PCA são baseadas em estatísticas até a ordem dois, as técnicas conhecidas como análise de componentes independentes (ICA) atuam, também, sobre estatísticas de ordem superior (COMON, 1994). Métodos algébricos de ICA, baseados em cumulantes, são abordados no Capítulo 6 no contexto de separação cega de fontes (BSS). A seguir, faz-se um paralelo entre as técnicas de PCA e ICA, ressaltando-se suas principais diferenças e semelhanças:

- ◇ A análise de componentes independentes surgiu na década de 1980 voltada a uma aplicação específica: o problema de BSS. Supondo um modelo de mistura composto por um sistema misturador linear e instantâneo com fontes iid e mutuamente independentes no espaço, o objetivo das técnicas de ICA é separar as fontes apenas dispondo-se de observações das misturas (COMON, 1992). Nesse contexto, a tática de separação clássica consiste na imposição de independência estatística à saída do sistema separador. Por sua vez, essa imposição pressupõe restrições sobre funções distribuição de probabilidade conjuntas (COMON, 1992; CARDOSO, 1998). Isso se traduz, no caso geral, em imposições implícitas ou explícitas sobre estatísticas de ordem superior nas soluções de ICA.

- ◇ Em contrapartida, a análise de componentes principais busca encontrar um número reduzido de componentes que resumam, da melhor forma possível, um conjunto de dados (JOLLIFFE, 2002). Em síntese, impõe-se que as componentes principais tenham máxima variância sob a restrição de serem não correlacionadas. Sendo assim, as estatísticas utilizadas explicitamente no procedimento de PCA se restringem a ordem dois. Como, no caso geral, a não correlação não implica independência, PCA não é compreendida como técnica de separação cega de fontes. Além disso, em análise de componentes principais, não se supõe um modelo estatístico para as variáveis aleatórias observadas — diferentemente do caso de ICA. Finalmente, a redução de dimensionalidade consiste no princípio fundamental de PCA, permitindo eliminar redundâncias desnecessárias existentes nos dados. Classicamente, esse tipo de procedimento não é realizado em ICA.
- ◇ Como semelhança, ambas as técnicas podem ser interpretadas como a busca de direções (*i.e.*, vetores) que maximizem um certo critério baseado em estatísticas. No caso de PCA, buscam-se direções de máxima variância que correspondem às direções das componentes principais. Em ICA, buscam-se direções de máxima independência que estão relacionadas aos coeficientes do sistema misturador que se deseja identificar.
- ◇ Muitos dos problemas que hoje são investigados na área de ICA vinham sendo previamente tratados na área de PCA ao longo do século XX. Atualmente, as técnicas de ICA têm ganhado espaço até mesmo na área de aprendizado de máquina — onde as técnicas de PCA são amplamente utilizadas. A escolha entre um conjunto de técnicas ou outro deve ser feita observando-se a aplicação, as características dos sinais envolvidos, a existência de um modelo estatístico razoável, o custo computacional, entre outros.
- ◇ Por fim, as técnicas de PCA têm sua importância, embora indireta, no contexto de BSS. Em primeiro lugar, pois o branqueamento de variáveis aleatórias consiste em uma etapa de pré-processamento amplamente empregada em técnicas de ICA. Usualmente, os dados são branqueados espacialmente antes da aplicação de um método particular de separação (CARDOSO, 1998; HYVÄRINEN; OJA, 2000). Recorda-se que o branqueamento espacial pode ser realizado pelo procedimento de PCA, mas sem a redução de dimensionalidade. Em segundo lugar, pois a redução de dimensionalidade pode ser útil em problemas de separação sobredeterminados, *i.e.*, com mais misturas do que fontes. Nesse caso, recomenda-se a aplicação prévia de PCA aos dados a fim de não apenas branqueá-los, mas também de remover suas redundâncias (COMON, 1994).

APÊNDICE C – MÉTODOS NUMÉRICOS DE DIAGONALIZAÇÃO

Neste apêndice, abordam-se métodos numéricos de diagonalização de matrizes simétricas. Trata-se de técnicas importantes à implementação dos métodos de separação cega de fontes baseados em propriedades algébricas de cumulantes e considerados no Capítulo 6.

Na Seção C.1, apresenta-se com base em Haykin (2014) o método de Jacobi clássico para diagonalização de uma matriz simétrica. Esse método pode ser empregado na implementação da técnica de identificação cega de quarta ordem (FOBI), cujos princípios teóricos são abordados na Seção 6.5. Na Seção C.2, aborda-se conforme Bunse-Gerstner, Byers e Mehrmann (1993), Cardoso e Soudoumiac (1996) uma extensão do método de Jacobi para diagonalização simultânea de matrizes simétricas. Essa extensão é particularmente útil à implementação de técnicas de separação conhecidas como diagonalização conjunta aproximada de automatrizes (JADE), cujos princípios teóricos são abordados na Seção 6.6.

C.1 Método de Jacobi clássico

Basicamente, o método de Jacobi consiste na aplicação de uma sequência de rotações planares a uma matriz, bilateralmente, de modo a diagonalizá-la. Esse método permite obter a decomposição em valores singulares (SVD) de uma matriz qualquer considerando-se uma precisão numérica preestabelecida (HAYKIN, 2014).

Originalmente, o método de Jacobi foi concebido para exprimir matrizes simétricas em uma forma diagonal (HAYKIN, 2014). Nesse caso, o método de Jacobi permite determinar a decomposição em autovalores e autovetores da matriz considerada. Na Subseção C.1.1, aborda-se o método de Jacobi para diagonalização de uma matriz simétrica real 2×2 ; na Subseção C.1.2, considera-se o método de Jacobi para o caso $N \times N$.

C.1.1 Caso 2×2

Seja uma matriz simétrica $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ dada por

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_{i,i} & d_{i,j} \\ d_{j,i} & d_{j,j} \end{bmatrix}, \quad (\text{C.1})$$

com $d_{j,i} = d_{i,j}$. Utilizando-se uma matriz ortogonal de rotação planar $\mathbf{\Theta} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, o método de Jacobi tem como objetivo diagonalizar \mathbf{D} bilateralmente conforme a expressão

$$\mathbf{\Theta}^T \mathbf{D} \mathbf{\Theta} = \mathbf{\Lambda}, \quad (\text{C.2})$$

em que $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2) \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$. No caso real, as rotações planares podem ser genericamente expressas como

$$\mathbf{\Theta}(c, s) = \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix}, \quad (\text{C.3})$$

em que $c = \cos \theta$ e $s = \sin \theta$ para $\theta \in \mathbb{R}$, de modo que

$$c^2 + s^2 = 1. \quad (\text{C.4})$$

Matrizes ortogonais conforme (C.3) são conhecidas, na literatura, como rotações de Givens ou rotações de Jacobi (HAYKIN, 2014). Devido à congruência dos ângulos de rotação e por simplicidade, consideram-se a seguir apenas os ângulos $\theta \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ nas rotações de Givens. A partir deles, podem-se realizar rotações para todas as direções do plano. Além disso, para o intervalo de ângulos considerado, tem-se $0 \leq c \leq 1$ e $-1 \leq s < 1$.

Substituindo-se (C.1) e (C.3) em (C.2), e expandindo-se a matriz \mathbf{A} , tem-se

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{i,i} & d_{i,j} \\ d_{j,i} & d_{j,j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}.$$

Dessa equação, e utilizando-se a simetria de \mathbf{D} , resulta o sistema de equações

$$\begin{cases} d_{i,i}c^2 + 2d_{i,j}sc + d_{j,j}s^2 = \lambda_1 & (\text{C.5}) \\ d_{i,i}s^2 - 2d_{i,j}sc + d_{j,j}c^2 = \lambda_2 & (\text{C.6}) \\ -d_{i,i}sc + d_{i,j}(c^2 - s^2) + d_{j,j}sc = 0. & (\text{C.7}) \end{cases}$$

Por conveniência, subdivide-se o problema nos seguintes casos particulares:

◇ \mathbf{D} diagonal, *i.e.*, $d_{j,i} = d_{i,j} = 0$:

- $d_{i,i} = d_{j,j}$: Qualquer rotação, para θ no intervalo considerado, mantém \mathbf{D} diagonal. Usualmente, escolhem-se rotações de $\theta = 0$ ou $\theta = -\frac{\pi}{2}$. No primeiro caso, tem-se $(c, s) = (1, 0)$ e a matriz \mathbf{D} não é alterada. No segundo caso, tem-se $(c, s) = (0, -1)$ e a transformação permuta os elementos $d_{i,i}$ e $d_{j,j}$.
- $d_{i,i} \neq d_{j,j}$: A Equação (C.7) é satisfeita se, e somente se, $sc = 0$. Nesse caso, e para o intervalo de ângulos considerado, as rotações válidas são de $\theta = 0$ ou $\theta = -\frac{\pi}{2}$.

◇ \mathbf{D} não é diagonal, *i.e.*, $d_{j,i} = d_{i,j} \neq 0$:

- $d_{i,i} = d_{j,j}$: A Equação (C.7) é satisfeita se, e somente se, $c = |s|$. Isso corresponde às rotações de $\theta = \frac{\pi}{4}$ ou $\theta = -\frac{\pi}{4}$. No primeiro caso, tem-se $(c, s) = (\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2})$ e, no segundo, tem-se $(c, s) = (\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2})$.
- $d_{i,i} \neq d_{j,j}$: É necessário que $sc \neq 0$ para que (C.7) seja satisfeita. Em outras palavras, é preciso considerar que $\theta \neq 0$ e $\theta \neq -\frac{\pi}{2}$. Isso equivale a considerar que $(c, s) \neq (1, 0)$ e $(c, s) \neq (0, -1)$. Sob essas condições, podem-se dividir ambos os lados de (C.7) por sc , chegando-se a

$$d_{j,j} - d_{i,i} + d_{i,j} \left(\frac{c}{s} - \frac{s}{c} \right) = 0. \quad (\text{C.8})$$

Por conveniência, definem-se

$$t = \frac{s}{c} \in \mathbb{R}^*, \quad (\text{C.9})$$

em que $t = \text{tg } \theta$ e $\mathbb{R}^* = \mathbb{R} \setminus \{0\}$, e

$$\zeta = \frac{d_{j,j} - d_{i,i}}{2d_{i,j}} \in \mathbb{R}^* \quad (\text{C.10})$$

uma constante que depende apenas dos elementos de \mathbf{D} . Com essas definições, (C.8) pode ser reescrita como

$$t^2 + 2\zeta t - 1 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad t = -\zeta \pm \sqrt{\zeta^2 + 1}. \quad (\text{C.11})$$

Como é de se esperar, a equação quadrática resultante possui duas soluções. Logo, há duas possíveis escolhas de ângulos $|\theta| \in (0, \frac{\pi}{2})$ tais que a rotação $\Theta(c, s)$ permite diagonalizar \mathbf{D} . A fim de analisar melhor esses dois casos, é conveniente exprimir t de maneira alternativa. Definindo-se

$$\text{sgn } \zeta = \zeta / |\zeta|,$$

a solução em (C.11) pode ser expressa como

$$t = \frac{(\text{sgn } \zeta)(-\zeta \pm \sqrt{\zeta^2 + 1})}{\text{sgn } \zeta} = (\text{sgn } \zeta)(-|\zeta| \pm \sqrt{\zeta^2 + 1}) \quad (\text{C.12})$$

$$= (\text{sgn } \zeta)(-|\zeta| \pm \sqrt{\zeta^2 + 1}) \left(\frac{-|\zeta| \mp \sqrt{\zeta^2 + 1}}{-|\zeta| \mp \sqrt{\zeta^2 + 1}} \right) = \frac{\text{sgn } \zeta}{|\zeta| \pm \sqrt{\zeta^2 + 1}}. \quad (\text{C.13})$$

As expressões de (C.12) e (C.13) são úteis para analisar as duas possibilidades de soluções:

★ Considerando-se o sinal positivo no último termo de (C.13), tem-se

$$t = \frac{\text{sgn } \zeta}{|\zeta| + \sqrt{\zeta^2 + 1}}. \quad (\text{C.14})$$

Nesse caso, tem-se $|t| \in (0, 1)$, o que implica $|\theta| \in (0, \frac{\pi}{4})$. Para esse tipo de solução, vale $c > |s|$.

★ Considerando-se o sinal negativo em (C.12), tem-se

$$t = -(\text{sgn } \zeta)(|\zeta| + \sqrt{\zeta^2 + 1}). \quad (\text{C.15})$$

Aqui, tem-se $|t| \in (1, +\infty)$, o que implica $|\theta| \in (\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2})$. Nesse tipo de solução, vale $c < |s|$.

Em ambos os tipos de solução, após o cálculo de t a partir de ζ , obtém-se c dividindo-se (C.4) por c^2 , que resulta em

$$\boxed{c = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}.} \quad (\text{C.16})$$

Finalmente, obtém-se s a partir de (C.9) conforme

$$\boxed{s = tc.} \quad (\text{C.17})$$

Na literatura, é usual subdividir o algoritmo de Jacobi para a diagonalização de uma matriz simétrica qualquer $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ em dois tipos. A inspiração vem das duas soluções provenientes para o caso particular em que \mathbf{D} não é diagonal e $d_{i,i} \neq d_{j,j}$. Os tipos são:

- ◇ *Jacobi por rotações internas.* Consideram-se apenas rotações com $\theta \in [-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}]$. Em particular, se \mathbf{D} for diagonal, considera-se $\theta = 0$. Se \mathbf{D} não for diagonal mas $d_{i,i} = d_{j,j}$, considera-se $\theta = -\frac{\pi}{4}$. Se \mathbf{D} não for diagonal e $d_{i,i} \neq d_{j,j}$, considera-se $|\theta| \in (0, \frac{\pi}{4})$, o que equivale a calcular as tangentes de acordo com (C.14).
- ◇ *Jacobi por rotações externas.* Consideram-se apenas rotações com $\theta \in [-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{4}] \cup [\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}]$. Particularmente, se \mathbf{D} for diagonal, considera-se $\theta = -\frac{\pi}{2}$. Se \mathbf{D} não for diagonal mas $d_{i,i} = d_{j,j}$, considera-se $\theta = \frac{\pi}{4}$. Se \mathbf{D} não for diagonal e $d_{i,i} \neq d_{j,j}$, considera-se $|\theta| \in (\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2})$, o que equivale a calcular as tangentes de acordo com (C.15).

Na Tabela 2, apresenta-se um resumo dos principais passos do método de Jacobi por rotações internas para uma matriz simétrica 2×2 .

Tabela 2 – Passos principais do método de Jacobi por rotações internas para uma matriz simétrica 2×2 .

<p>Entrada:</p> <p>$d_{i,j} = [\mathbf{D}]_{i,j}, \quad \mathbf{D} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ matriz simétrica</p>
<p>Saída:</p> <p>$\Theta \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ matriz ortogonal $\Theta^{-1} = \Theta^T$ tal que $\Theta^T \mathbf{D} \Theta$ é diagonal</p>
<p>Se $d_{j,i} = d_{i,j} = 0$, faça:</p> <p style="padding-left: 20px;">$(c, s) \leftarrow (1, 0)$</p> <p>Caso contrário, se $d_{i,i} = d_{j,j}$, faça:</p> <p style="padding-left: 20px;">$(c, s) \leftarrow \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2} \right)$</p> <p>Caso contrário, faça: {</p> <p style="padding-left: 20px;">$\zeta \leftarrow (d_{j,j} - d_{i,i}) / (2d_{i,j})$</p> <p style="padding-left: 20px;">$t \leftarrow (\text{sgn } \zeta) / (\zeta + \sqrt{\zeta^2 + 1})$</p> <p style="padding-left: 20px;">$c \leftarrow 1 / \sqrt{1 + t^2}$</p> <p style="padding-left: 20px;">$s \leftarrow tc$ }</p> <p>Calcule $\Theta(c, s)$ segundo (C.3)</p> <p>$\Theta \leftarrow \Theta(c, s)$</p>

Fonte: autoria própria.

C.1.2 Caso $N \times N$

Na prática, muitas vezes é preciso diagonalizar matrizes simétricas com mais do que duas linhas e duas colunas. Felizmente, é possível generalizar o método apresentado para o caso 2×2 para considerar matrizes maiores. Essa generalização é conhecida como método cíclico de Jacobi (HAYKIN, 2014).

O método cíclico de Jacobi consiste na aplicação bilateral de uma sequência de rotações de Givens à matriz simétrica que se deseja diagonalizar. O método é subdividido em etapas denominadas ciclos de varredura. Cada ciclo é composto por etapas simples em que rotações de Givens são aplicadas à matriz de forma a anular certos elementos. O conjunto de etapas simples que percorre, em uma ordem fixa, todos os elementos da matriz (exceto aqueles fora da diagonal principal) constitui um ciclo.

Seja uma matriz simétrica $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ com elementos $d_{i,j} = [\mathbf{D}]_{i,j}$. Considera-se, inicialmente, uma etapa simples do método cíclico de Jacobi cujo objetivo é eliminar os elementos (i, j) e (j, i) de \mathbf{D} , com $i < j$, sendo $i, j = 1, 2, \dots, N$. A eliminação é feita conforme

$$\mathbf{D} \leftarrow \mathbf{Y}_{i,j}(c, s) = \mathbf{\Theta}_{i,j}^T(c, s) \mathbf{D} \mathbf{\Theta}_{i,j}(c, s), \quad (\text{C.18})$$

em que $\mathbf{\Theta}_{i,j}(c, s) \in \mathbb{R}^{N \times N}$, definida como

$$\mathbf{\Theta}_{i,j}(c, s) = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & c & \cdots & -s & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & s & \cdots & c & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{array}{l} \leftarrow \text{linha } i \\ \leftarrow \text{linha } j \end{array} \quad (\text{C.19})$$

$$\begin{array}{cc} \uparrow & \uparrow \\ \text{coluna } i & \text{coluna } j \end{array}$$

é uma matriz de rotação de Givens para o caso $N \times N$. As constantes c e s são calculadas de acordo com as mesmas equações apresentadas para o caso 2×2 , podendo-se escolher entre rotações internas ou externas. Observa-se que, nessa etapa simples, são considerados para o cálculo de c e s os elementos $d_{i,j}$, $d_{j,i}$, $d_{i,i}$ e $d_{j,j}$ de \mathbf{D} . Além disso, embora na etapa deseje-se eliminar $d_{i,j}$ e $d_{j,i}$, em geral a aplicação bilateral segundo (C.18) altera todos os elementos da i -ésima e j -ésima linhas e colunas de \mathbf{D} .

Cada ciclo do método de Jacobi é dado pela aplicação sucessiva de $N(N-1)/2$ rotações de Givens à matriz que se deseja diagonalizar, analogamente ao mostrado em (C.18) para apenas uma rotação. Em cada ciclo, realiza-se a varredura dos elementos de \mathbf{D} na mesma ordem. Entre as várias possibilidades de ordem de varredura, destacam-se os métodos

cíclicos por linhas e os métodos cíclicos por colunas. Nos métodos cíclicos por linhas, a varredura em cada ciclo é feita na ordem de índices (i, j) conforme

$$(1, 2) \rightarrow (1, 3) \rightarrow \cdots \rightarrow (1, N) \rightarrow (2, 3) \rightarrow (2, 4) \rightarrow \cdots \rightarrow (2, N) \rightarrow \cdots \rightarrow (N - 1, N).$$

Por sua vez, nos métodos cíclicos por colunas, a varredura em cada ciclo é feita na ordem de índices (i, j) conforme

$$(1, 2) \rightarrow (1, 3) \rightarrow (2, 3) \rightarrow (1, 4) \rightarrow (2, 4) \rightarrow (3, 4) \rightarrow \cdots \rightarrow (1, N) \rightarrow (2, N) \rightarrow \cdots (N - 1, N).$$

Após o término de cada ciclo, o ciclo é reiniciado até que a diagonalização seja atingida para uma dada precisão numérica. Sendo assim, o método cíclico de Jacobi é iterativo (HAYKIN, 2014). Denotando-se por $\mathbf{D}^{(k)}$ a matriz sob diagonalização após o k -ésimo ciclo, com $k = 1, 2, \dots$, pode-se medir o desempenho da diagonalização de acordo com a soma do quadrado dos elementos de fora da diagonal de $\mathbf{D}^{(k)} \in \mathbb{R}^{N \times N}$. A partir do operador $\text{off}(\cdot)$ definido em (7.40), essa soma pode ser expressa de maneira reduzida como $\text{off}(\mathbf{D}^{(k)})$. A convergência dos métodos de Jacobi, no sentido de que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \text{off}(\mathbf{D}^{(k)}) = 0,$$

foi demonstrada nos trabalhos de Forsythe e Henrici (1960), Luk e Park (1989) para os métodos cíclicos por linhas e por colunas. O critério de parada do algoritmo pode ser colocado como uma condição (BUNSE-GERSTNER; BYERS; MEHRMANN, 1993)

$$\text{off}(\mathbf{D}^{(k)}) < \varepsilon \|\mathbf{D}^{(0)}\|_F,$$

em que ε é uma constante pequena, $\|\cdot\|_F$ denota a norma de Frobenius conforme (7.52) e $\mathbf{D}^{(0)}$ corresponde à matriz antes da aplicação do método de Jacobi. Segundo Haykin (2014), para valores típicos como $\varepsilon = 10^{-12}$, o algoritmo converge em torno de 4 até 10 ciclos para matrizes 4×4 até 2000×2000 . Na Tabela 3, apresenta-se um resumo dos principais passos do método de Jacobi por rotações internas e cíclico por linhas para uma matriz simétrica $N \times N$.

C.2 Método de Jacobi estendido

Em diversos problemas práticos como, por exemplo, separação cega de fontes, surge a necessidade de determinar a matriz ortogonal que diagonaliza simultaneamente um conjunto de matrizes simétricas (BUNSE-GERSTNER; BYERS; MEHRMANN, 1993; POLTRONIERE; SOLER; BRUNO-ALFONSO, 2016). No caso do método JADE abordado na Seção 6.6, deseja-se determinar a matriz ortogonal que diagonaliza simultaneamente o conjunto de matrizes de quadricovariância obtidas a partir dos cumulantes estimados das misturas branqueadas (CARDOSO; SOULOUMIAC, 1993). Embora o problema de

Tabela 3 – Passos principais do método de Jacobi por rotações internas e cíclico por linhas para uma matriz simétrica $N \times N$.

<p>Entradas:</p> <p>$d_{i,j} = [\mathbf{D}]_{i,j}$, $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ matriz simétrica</p> <p>$\varepsilon > 0$ escalar pequeno</p>
<p>Saída:</p> <p>$\Theta \in \mathbb{R}^{N \times N}$ matriz ortogonal $\Theta^{-1} = \Theta^T$ tal que</p> <p>$\text{off}(\Theta^T \mathbf{D} \Theta) < \varepsilon \ \mathbf{D}\ _F$</p>
<p>$\Theta \leftarrow \mathbf{I}_N$</p> <p>Enquanto $\text{off}(\mathbf{D}) \geq \varepsilon \ \mathbf{D}\ _F$, faça: {</p> <p> Para $i = 1, 2, \dots, N$, faça: {</p> <p> Para $j = i + 1, i + 2, \dots, N$, faça: {</p> <p> Se $d_{j,i} = d_{i,j} = 0$, faça:</p> <p> $(c, s) \leftarrow (1, 0)$</p> <p> Caso contrário, se $d_{i,i} = d_{j,j}$, faça:</p> <p> $(c, s) \leftarrow \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2} \right)$</p> <p> Caso contrário, faça: {</p> <p> $\zeta \leftarrow (d_{j,j} - d_{i,i}) / (2d_{i,j})$</p> <p> $t \leftarrow (\text{sgn } \zeta) / (\zeta + \sqrt{\zeta^2 + 1})$</p> <p> $c \leftarrow 1 / \sqrt{1 + t^2}$</p> <p> $s \leftarrow tc$ }</p> <p> Calcule $\Theta_{i,j}(c, s)$ segundo (C.19)</p> <p> $\mathbf{D} \leftarrow \Theta_{i,j}^T(c, s) \mathbf{D} \Theta_{i,j}(c, s)$</p> <p> $\Theta \leftarrow \Theta \Theta_{i,j}(c, s)$ } }</p>

Fonte: autoria própria.

diagonalização simultânea de matrizes possa parecer trivial do ponto de vista teórico, sua implementação prática não é direta e inspira certos cuidados.

Na Subseção C.2.1, aborda-se a diagonalização simultânea de matrizes e as dificuldades que podem surgir ao realizar essa diagonalização numericamente. Na Subseção C.2.2, aborda-se o método de Jacobi estendido para diagonalização de $L = 2$ matrizes simétricas reais; na Subseção C.2.3, considera-se o método de Jacobi estendido para L qualquer.

C.2.1 Diagonalização simultânea de matrizes

Inicialmente, recordam-se alguns conceitos teóricos acerca da diagonalização simultânea de matrizes a partir da seguinte proposição (GOLUB; VAN LOAN, 2013).

Proposição C.1. *Sejam $L > 1$ matrizes simétricas $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_L \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Se essas matrizes comutarem em pares no produto, i.e.,*

$$\mathbf{D}_\ell \mathbf{D}_k = \mathbf{D}_k \mathbf{D}_\ell$$

para todos $\ell, k = 1, 2, \dots, L$, então elas são simultaneamente diagonalizáveis. Isso significa que existe uma matriz ortogonal $\Theta \in \mathbb{R}^{N \times N}$ tal que

$$\Theta^T D_\ell \Theta = \Lambda_\ell$$

para todo $\ell = 1, 2, \dots, L$, em que Λ_ℓ é matriz diagonal. Além disso, a recíproca também é verdadeira: se as matrizes simétricas forem simultaneamente diagonalizáveis, então elas comutam em pares no produto.

Dispondo-se de um conjunto de matrizes simétricas simultaneamente diagonalizáveis, pode-se pensar que é suficiente diagonalizar apenas uma matriz para poder determinar a matriz ortogonal que diagonaliza as demais. De fato, desde que a matriz diagonalizada não possua autovalores repetidos, essa estratégia funcionaria em um contexto teórico. No entanto, computacionalmente, devido a erros de arredondamento e de estimação, muitas vezes não é possível garantir que D_1, D_2, \dots, D_L são simultaneamente diagonalizáveis, embora possam ser de forma aproximada. Nessa situação, obter a transformação de similaridade de diagonalização a partir de uma única matriz e aplicá-la às demais poderia ser uma abordagem muito pouco eficiente do ponto de vista numérico. O seguinte exemplo, reproduzido de Bunse-Gerstner, Byers e Mehrmann (1993), motiva a consideração de uma estratégia diferenciada para a realização da diagonalização conjunta de matrizes que comutam aproximadamente.

Exemplo C.1. Sejam as matrizes simétricas $D_1, D_2 \in \mathbb{R}^{4 \times 4}$ dadas por

$$D_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad D_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Verifica-se que

$$D_1 D_2 = D_2 D_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Logo, D_1 e D_2 são simultaneamente diagonalizáveis. Considera-se, agora, que uma perturbação é aplicada a alguns elementos dessas matrizes, resultando respectivamente nas matrizes

$$\widetilde{D}_1 = \begin{bmatrix} 1 - \epsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \widetilde{D}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 + \epsilon \end{bmatrix},$$

sendo $0 < \epsilon \ll 1$ um escalar pequeno. Verifica-se que

$$\widetilde{\mathbf{D}}_1 \widetilde{\mathbf{D}}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 - \epsilon & 0 & 0 \\ 1 + \epsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 + \epsilon \\ 0 & 0 & 1 - \epsilon & 0 \end{bmatrix} \neq \widetilde{\mathbf{D}}_2 \widetilde{\mathbf{D}}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 + \epsilon & 0 & 0 \\ 1 - \epsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - \epsilon \\ 0 & 0 & 1 + \epsilon & 0 \end{bmatrix}.$$

Sendo assim, $\widetilde{\mathbf{D}}_1$ e $\widetilde{\mathbf{D}}_2$ não comutam e, portanto, não são simultaneamente diagonalizáveis. Pode-se mostrar que as matrizes de autovetores de $\widetilde{\mathbf{D}}_1$ e $\widetilde{\mathbf{D}}_2$ independem de ϵ e valem, respectivamente,

$$\widetilde{\mathbf{U}}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \widetilde{\mathbf{U}}_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{C.20})$$

Essas matrizes de autovetores são únicas a menos da ordem das colunas e eventuais fatores de escala aplicados a cada coluna. Além disso,

$$\widetilde{\mathbf{U}}_1^T \widetilde{\mathbf{D}}_2 \widetilde{\mathbf{U}}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\epsilon \\ 0 & 0 & -\epsilon & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \text{off}(\widetilde{\mathbf{U}}_1^T \widetilde{\mathbf{D}}_2 \widetilde{\mathbf{U}}_1) = 2(1 + \epsilon^2)$$

e

$$\widetilde{\mathbf{U}}_2^T \widetilde{\mathbf{D}}_1 \widetilde{\mathbf{U}}_2 = \begin{bmatrix} 1 & -\epsilon & 0 & 0 \\ -\epsilon & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \text{off}(\widetilde{\mathbf{U}}_2^T \widetilde{\mathbf{D}}_1 \widetilde{\mathbf{U}}_2) = 2(1 + \epsilon^2),$$

em que $\text{off}(\cdot)$ denota a soma dos quadrados dos elementos de fora da diagonal principal da matriz considerada. Portanto, o desempenho da diagonalização quando a transformação de similaridade é obtida a partir de uma única matriz, e aplicada a outra matriz, é da ordem de um. Apesar disso, seria desejável que o desempenho dependesse apenas da perturbação ϵ . Observando-se a estrutura em blocos das matrizes $\widetilde{\mathbf{U}}_1$ e $\widetilde{\mathbf{U}}_2$ de (C.20), pode-se vislumbrar a diagonalização conjunta considerando-se a matriz

$$\widetilde{\mathbf{U}} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{C.21})$$

Nesse caso, tem-se

$$\widetilde{\mathbf{U}}^T \widetilde{\mathbf{D}}_1 \widetilde{\mathbf{U}} = \begin{bmatrix} 1 & -\epsilon & 0 & 0 \\ -\epsilon & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \text{off}(\widetilde{\mathbf{U}}^T \widetilde{\mathbf{D}}_1 \widetilde{\mathbf{U}}) = 2\epsilon^2$$

e

$$\widetilde{\mathbf{U}}^T \widetilde{\mathbf{D}}_2 \widetilde{\mathbf{U}} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\epsilon \\ 0 & 0 & -\epsilon & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \text{off}(\widetilde{\mathbf{U}}^T \widetilde{\mathbf{D}}_2 \widetilde{\mathbf{U}}) = 2\epsilon^2.$$

Agora, o desempenho da diagonalização é da ordem de ϵ^2 , sendo melhor do que o desempenho obtido pela consideração individual das matrizes de (C.20). \triangleleft

Com a diagonalização conjunta aproximada de matrizes, busca-se determinar a transformação de similaridade que maximiza o desempenho da diagonalização para um dado conjunto de matrizes simétricas. Por exemplo, a partir de um algoritmo de diagonalização conjunta, pode-se determinar a matriz de (C.21) abordada no Exemplo C.1. A fim de apresentar o procedimento de diagonalização conjunta aproximada, considera-se inicialmente o caso da diagonalização conjunta de $L = 2$ matrizes simétricas $N \times N$.

C.2.2 Caso $L = 2$

Sejam as matrizes simétricas $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ que se deseja diagonalizar simultaneamente de maneira aproximada. Considera-se uma dada etapa simples do método cíclico de Jacobi estendido correspondente aos elementos (i, j) e (j, i) com $i, j = 1, 2, \dots, N$ e $i < j$. Assim como no método clássico, em cada etapa simples considera-se uma rotação de Givens $\Theta_{i,j}(c, s) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ conforme (C.19). Sem perda de generalidade, estipula-se o intervalo preliminar de ângulos $\theta \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ tal que $0 \leq c < 1$ e $-1 \leq s < 1$. A etapa simples do método de Jacobi estendido consiste na aplicação simultânea e bilateral da rotação $\Theta_{i,j}(c, s)$ às matrizes \mathbf{D}_1 e \mathbf{D}_2 conforme

$$\mathbf{D}_1 \leftarrow \mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s) = \Theta_{i,j}^T(c, s) \mathbf{D}_1 \Theta_{i,j}(c, s), \quad (\text{C.22})$$

$$\mathbf{D}_2 \leftarrow \mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s) = \Theta_{i,j}^T(c, s) \mathbf{D}_2 \Theta_{i,j}(c, s), \quad (\text{C.23})$$

de modo a resolver o problema de otimização, sobre a soma dos quadrados dos elementos de fora da diagonal das matrizes $\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)$ e $\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)$, dado por

$$\begin{array}{l} \text{minimize} \quad \text{off}(\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)) + \text{off}(\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)) \\ \quad \quad \quad \begin{array}{l} 0 \leq c < 1 \\ -1 \leq s < 1 \end{array} \\ \text{sujeito a} \quad c^2 + s^2 = 1. \end{array} \quad (\text{C.24})$$

A cada etapa simples, deve-se resolver o problema de otimização correspondente. Como o método clássico, o método estendido também é baseado na repetição de ciclos de varredura constituídos, cada um, por uma sequência de etapas simples que devem varrer todos os elementos das matrizes consideradas, exceto aqueles nas suas diagonais principais.

Para a obtenção de um algoritmo que permita determinar os parâmetros ótimos c e s provenientes da resolução do problema de otimização de cada etapa simples (i, j) do método de Jacobi estendido, parte-se de (C.22) e (C.23) e obtém-se

$$\|\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)\|_{\mathbb{F}}^2 = \|\mathbf{D}_1\|_{\mathbb{F}}^2 \quad \text{e} \quad \|\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)\|_{\mathbb{F}}^2 = \|\mathbf{D}_2\|_{\mathbb{F}}^2.$$

Resulta, portanto, a igualdade

$$\|\mathbf{D}_1\|_{\mathbb{F}}^2 + \|\mathbf{D}_2\|_{\mathbb{F}}^2 = \text{off}(\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)) + \text{off}(\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)) + \text{ddiag}(\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)) + \text{ddiag}(\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)) \quad (\text{C.25})$$

em que $\text{ddiag}(\cdot)$ denota a soma dos quadrados dos elementos da diagonal principal da matriz considerada. Como o lado esquerdo de (C.25) independe da rotação escolhida, o problema de minimização (C.24) equivale à maximização de

$$\text{ddiag}(\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)) + \text{ddiag}(\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s))$$

sob a mesma restrição. Com base em (C.22) e (C.23), as rotações somente alteram os elementos (i, i) e (j, j) da diagonal principal de \mathbf{D}_1 e \mathbf{D}_2 . Sendo assim,

$$\begin{aligned} \text{ddiag}(\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)) + \text{ddiag}(\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)) &= \text{ddiag}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2) \\ &\quad - ([\mathbf{D}_1]_{i,i}^2 + [\mathbf{D}_1]_{j,j}^2 + [\mathbf{D}_2]_{i,i}^2 + [\mathbf{D}_2]_{j,j}^2) \\ &\quad + [\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)]_{i,i}^2 + [\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)]_{j,j}^2 \\ &\quad + [\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)]_{i,i}^2 + [\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)]_{j,j}^2 \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

e a maximização de (C.26) variando-se c e s equivale à maximização apenas dos últimos quatro termos de (C.26), *i.e.*,

$$[\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)]_{i,i}^2 + [\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)]_{j,j}^2 + [\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)]_{i,i}^2 + [\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)]_{j,j}^2. \quad (\text{C.27})$$

Para a obtenção de um algoritmo a partir da função objetivo resultante dada por (C.27), é útil considerar a seguinte relação entre escalares quaisquer $a, b \in \mathbb{R}$:

$$a^2 + b^2 = \frac{(a + b)^2 + (a - b)^2}{2}. \quad (\text{C.28})$$

Adicionalmente, como $\text{tr}(\mathbf{Y}_{\ell;i,j}(c, s)) = \text{tr}(\mathbf{D}_\ell)$ para $\ell = 1, 2$, e as rotações apenas alteram os elementos (i, i) e (j, j) da diagonal principal, então

$$[\mathbf{Y}_{\ell;i,j}(c, s)]_{i,i} + [\mathbf{Y}_{\ell;i,j}(c, s)]_{j,j} = [\mathbf{D}_\ell]_{i,i} + [\mathbf{D}_\ell]_{j,j}. \quad (\text{C.29})$$

Agora, aplica-se (C.28) aos dois primeiros e aos dois últimos termos de (C.27) e considera-se a relação dada por (C.29). Com isso, conforme sugerido por Cardoso e Soulobumiac (1996), a maximização de (C.27) equivale à maximização de

$$([\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)]_{i,i} - [\mathbf{Y}_{1;i,j}(c, s)]_{j,j})^2 + ([\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)]_{i,i} - [\mathbf{Y}_{2;i,j}(c, s)]_{j,j})^2. \quad (\text{C.30})$$

Voltando às Equações (C.5) e (C.6) para o método de Jacobi clássico, os elementos envolvidos podem ser escritos como

$$[\mathbf{Y}_{\ell;i,j}(c,s)]_{i,i} = [\mathbf{D}_{\ell}]_{i,i}c^2 + 2[\mathbf{D}_{\ell}]_{i,j}sc + [\mathbf{D}_{\ell}]_{j,j}s^2, \quad (\text{C.31})$$

$$[\mathbf{Y}_{\ell;i,j}(c,s)]_{j,j} = [\mathbf{D}_{\ell}]_{i,i}s^2 - 2[\mathbf{D}_{\ell}]_{i,j}sc + [\mathbf{D}_{\ell}]_{j,j}c^2, \quad (\text{C.32})$$

para $\ell = 1, 2$. Em seguida, substituem-se (C.31) e (C.32) em (C.30) para chegar à função objetivo equivalente

$$f_{i,j}(c,s) = (([\mathbf{D}_1]_{i,i} - [\mathbf{D}_1]_{j,j})(c^2 - s^2) + 4[\mathbf{D}_1]_{i,j}sc)^2 + (([\mathbf{D}_2]_{i,i} - [\mathbf{D}_2]_{j,j})(c^2 - s^2) + 4[\mathbf{D}_2]_{i,j}sc)^2. \quad (\text{C.33})$$

A maximização de $f_{i,j}(c,s)$ variando-se c e s sob a restrição $c^2 + s^2 = 1$ equivale ao problema de minimização de (C.24). A vantagem da formulação alternativa de (C.33) é que $f_{i,j}(c,s)$ é dada explicitamente em função dos elementos das matrizes \mathbf{D}_1 e \mathbf{D}_2 e das variáveis c e s .

Por conveniência e inspirando-se em Cardoso e Souloumiac (1996), Bunse-Gerstner, Byers e Mehrmann (1993), definem-se os vetores

$$\boldsymbol{\nu}(c,s) = \begin{bmatrix} c^2 - s^2 \\ 2sc \end{bmatrix} \quad (\text{C.34})$$

e

$$\boldsymbol{\phi}_{i,j}(\mathbf{D}_{\ell}) = \begin{bmatrix} [\mathbf{D}_{\ell}]_{i,i} - [\mathbf{D}_{\ell}]_{j,j} \\ 2[\mathbf{D}_{\ell}]_{i,j} \end{bmatrix} \quad (\text{C.35})$$

para $\ell = 1, 2$. Com essas definições, (C.33) pode ser reescrita como

$$f_{i,j}(c,s) = \boldsymbol{\nu}^{\top}(c,s) \boldsymbol{\Phi}_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2) \boldsymbol{\nu}(c,s), \quad (\text{C.36})$$

em que

$$\boldsymbol{\Phi}_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2) = \boldsymbol{\phi}_{i,j}(\mathbf{D}_1) \boldsymbol{\phi}_{i,j}^{\top}(\mathbf{D}_1) + \boldsymbol{\phi}_{i,j}(\mathbf{D}_2) \boldsymbol{\phi}_{i,j}^{\top}(\mathbf{D}_2) \quad (\text{C.37})$$

é uma matriz 2×2 positiva semidefinida. Portanto, o problema de otimização consiste em maximizar a função objetivo de (C.36) variando-se c e s sob a restrição $c^2 + s^2 = 1$. A função objetivo obtida pode ser interpretada como uma forma quadrática em $\boldsymbol{\nu}(c,s)$. Por sua vez, a restrição $c^2 + s^2 = 1$ implica $\boldsymbol{\nu}^{\top}(c,s) \boldsymbol{\nu}(c,s) = 1$. Além disso, com $\theta \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ tem-se que $\boldsymbol{\nu}(c,s)$ varre todas as direções possíveis do plano. Logo, o problema de otimização original de (C.24) equivale à maximização da forma quadrática de (C.36) sob a restrição de norma unitária, *i.e.*,

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & \boldsymbol{\nu}^{\top} \boldsymbol{\Phi}_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2) \boldsymbol{\nu} \\ & \boldsymbol{\nu} \in \mathbb{R}^2 \\ \text{sujeito a} & \boldsymbol{\nu}^{\top} \boldsymbol{\nu} = 1, \end{array} \quad (\text{C.38})$$

com $\boldsymbol{\nu}$ relacionado aos parâmetros c e s de acordo com (C.34).

Resolvendo-se o problema resultante por multiplicadores de Lagrange, a função objetivo sob a restrição considerada vale

$$g_{i,j}(\boldsymbol{\nu}; \lambda) = \boldsymbol{\nu}^\top \boldsymbol{\Phi}_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2) \boldsymbol{\nu} - \lambda(\boldsymbol{\nu}^\top \boldsymbol{\nu} - 1).$$

Verifica-se que

$$\frac{\partial g_{i,j}(\boldsymbol{\nu}; \lambda)}{\partial \lambda} = \boldsymbol{\nu}^\top \boldsymbol{\nu} - 1 = 0 \Rightarrow \boldsymbol{\nu}^\top \boldsymbol{\nu} = 1 \text{ (restrição)}$$

e

$$\frac{\partial g_{i,j}(\boldsymbol{\nu}; \lambda)}{\partial \boldsymbol{\nu}} = 2\boldsymbol{\nu}^\top \boldsymbol{\Phi}_{i,j}^\top(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2) - 2\lambda \boldsymbol{\nu}^\top = \mathbf{0}_2^\top \Rightarrow \boldsymbol{\Phi}_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2) \boldsymbol{\nu} = \lambda \boldsymbol{\nu}.$$

Portanto, a condição necessária para que $\boldsymbol{\nu}$ de norma unitária seja solução do problema (C.38) é que $\boldsymbol{\nu}$ seja autovetor de $\boldsymbol{\Phi}_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2)$. Nesse caso, a função objetivo vale

$$\boldsymbol{\nu}^\top \boldsymbol{\Phi}_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2) \boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{\nu}^\top \lambda \boldsymbol{\nu} = \lambda \in \mathbb{R}.$$

Logo, o problema é resolvido ao escolher $\boldsymbol{\nu}$ autovetor de norma unitária de $\boldsymbol{\Phi}_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2)$ associado ao seu maior autovalor.

Finalmente, a fim de obter expressões para os parâmetros ótimos c e s , podem-se adotar rotações internas no método de Jacobi, *i.e.*, $\theta \in [-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}]$. Isso é possível pois $\boldsymbol{\nu}$, de acordo com (C.34), também varre todas as direções do plano para o intervalo de ângulos considerados. Por simplicidade, denota-se o vetor ótimo por $\boldsymbol{\nu} = [\nu_1 \ \nu_2]^\top$ e consideram-se os seguintes casos particulares:

◇ $\nu_1 = 0$: Escolhe-se $\theta = -\frac{\pi}{4}$ de modo que $(c, s) = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$.

◇ $\nu_2 = 0$: Escolhe-se $\theta = 0$ de modo que $(c, s) = (1, 0)$.

◇ Demais casos: As relações de (C.34) podem ser invertidas, de onde se obtêm os parâmetros ótimos da rotação interna

$$c = \sqrt{\frac{\nu_1 + 1}{2}} \tag{C.39}$$

e

$$s = \frac{\nu_2}{\sqrt{2\nu_1 + 2}}. \tag{C.40}$$

Assim como no caso clássico, cada ciclo do método de Jacobi estendido é dado pela aplicação sucessiva de $N(N-1)/2$ rotações de Givens às matrizes simétricas que se deseja diagonalizar. As rotações de cada etapa simples podem ser obtidas segundo (C.19) com os parâmetros c e s ótimos para rotações internas calculados conforme (C.39) e (C.40), respectivamente. Em cada ciclo, realiza-se a varredura dos elementos das matrizes na mesma ordem. Usualmente, utiliza-se o método cíclico por linhas análogo ao do caso clássico e abordado na Subseção C.1.2.

Após o término de cada ciclo da diagonalização conjunta aproximada, o ciclo é reiniciado até que se satisfaça um determinado critério de parada. Portanto, o método cíclico de Jacobi estendido também é iterativo. Denotando-se por $\mathbf{D}_\ell^{(k)}$ a ℓ -ésima matriz sob diagonalização após o k -ésimo ciclo, com $k = 1, 2, \dots$ e $\ell = 1, 2$, o critério de parada do algoritmo pode ser colocado como uma condição

$$\text{off}(\mathbf{D}_1^{(k)}, \mathbf{D}_2^{(k)}) < \varepsilon(\|\mathbf{D}_1^{(0)}\|_F + \|\mathbf{D}_2^{(0)}\|_F),$$

em que ε é uma constante pequena e $\mathbf{D}_\ell^{(0)}$ denota a ℓ -ésima matriz antes da diagonalização conjunta aproximada.

A convergência quadrática local do método de Jacobi estendido para $L = 2$ matrizes, baseado em rotações internas e cíclico por linhas, foi demonstrada por Bunse-Gerstner, Byers e Mehrmann (1993). Essa demonstração depende do uso de apenas rotações internas na diagonalização. Na Tabela 4, apresenta-se um resumo dos principais passos do método de Jacobi estendido por rotações internas e cíclico por linhas para $L = 2$ matrizes simétricas $N \times N$. Nessa tabela, a matriz de rotação é inicializada com uma matriz identidade conforme Bunse-Gerstner, Byers e Mehrmann (1993). Cardoso e Souloumiac (1996) propõem inicializar o algoritmo com a matriz de autovetores de \mathbf{D}_1 ou de \mathbf{D}_2 para obter uma convergência mais rápida.

C.2.3 Caso L qualquer

Sejam as $L > 1$ matrizes simétricas $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_L \in \mathbb{R}^{N \times N}$ que se deseja diagonalizar simultaneamente de maneira aproximada. Analogamente ao caso em que $L = 2$, cada etapa simples do método de Jacobi estendido consiste na aplicação simultânea e bilateral da rotação $\Theta_{i,j}(c, s)$ às matrizes $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_L$ conforme

$$\mathbf{D}_\ell \leftarrow \Upsilon_{\ell;i,j}(c, s) = \Theta_{i,j}^\top(c, s) \mathbf{D}_\ell \Theta_{i,j}(c, s),$$

para $\ell = 1, 2, \dots, L$, de modo a resolver o problema de otimização

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{minimize} \quad \sum_{\ell=1}^L \text{off}(\Upsilon_{\ell;i,j}(c, s)) \\ \begin{array}{l} 0 \leq c \leq 1 \\ -1 \leq s \leq 1 \end{array} \\ \text{sujeito a} \quad c^2 + s^2 = 1. \end{array}} \quad (\text{C.41})$$

A cada etapa simples, deve-se resolver o problema de otimização correspondente. Definem-se ciclos de varredura como uma sequência de etapas simples que devem varrer todos os elementos das matrizes consideradas, exceto aqueles nas suas diagonais principais. Os ciclos de varredura são repetidos até que a medida de diagonalidade conjunta do problema (C.41) seja menor do que

$$\varepsilon \sum_{\ell=1}^L \|\mathbf{D}_\ell^{(0)}\|_F,$$

Tabela 4 – Passos principais do método de Jacobi estendido por rotações internas e cíclico por linhas para $L = 2$ matrizes simétricas $N \times N$.

Entradas:
$\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ matrizes simétricas
$\varepsilon > 0$ escalar pequeno
Saída:
$\Theta \in \mathbb{R}^{N \times N}$ matriz ortogonal $\Theta^{-1} = \Theta^\top$ tal que
$\text{off}(\Theta^\top \mathbf{D}_1 \Theta) + \text{off}(\Theta^\top \mathbf{D}_2 \Theta) < \varepsilon(\ \mathbf{D}_1\ _F + \ \mathbf{D}_2\ _F)$
$\Theta \leftarrow \mathbf{I}_N$
Enquanto $\text{off}(\Theta^\top \mathbf{D}_1 \Theta) + \text{off}(\Theta^\top \mathbf{D}_2 \Theta) \geq \varepsilon(\ \mathbf{D}_1\ _F + \ \mathbf{D}_2\ _F)$, faça: {
Para $i = 1, 2, \dots, N$, faça: {
Para $j = i + 1, i + 2, \dots, N$, faça: {
$\phi_{i,j}(\mathbf{D}_1) \leftarrow [[\mathbf{D}_1]_{i,i} - [\mathbf{D}_1]_{j,j} \quad 2[\mathbf{D}_1]_{i,j}]^\top$
$\phi_{i,j}(\mathbf{D}_2) \leftarrow [[\mathbf{D}_2]_{i,i} - [\mathbf{D}_2]_{j,j} \quad 2[\mathbf{D}_2]_{i,j}]^\top$
$\Phi_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2) \leftarrow \phi_{i,j}(\mathbf{D}_1) \phi_{i,j}^\top(\mathbf{D}_1) + \phi_{i,j}(\mathbf{D}_2) \phi_{i,j}^\top(\mathbf{D}_2)$
$\nu \leftarrow$ autovetor de norma unitária associado ao $\max \lambda\{\Phi_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2)\}$
Se $\nu_1 = 0$, faça:
$(c, s) \leftarrow \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2} \right)$
Caso contrário, se $\nu_2 = 0$, faça:
$(c, s) \leftarrow (1, 0)$
Caso contrário, faça: {
$c \leftarrow \sqrt{\nu_1 + 1} / \sqrt{2}$
$s \leftarrow \nu_2 / \sqrt{2\nu_1 + 2}$ }
Calcule $\Theta_{i,j}(c, s)$ segundo (C.19)
$\mathbf{D}_1 \leftarrow \Theta_{i,j}^\top(c, s) \mathbf{D}_1 \Theta_{i,j}(c, s)$
$\mathbf{D}_2 \leftarrow \Theta_{i,j}^\top(c, s) \mathbf{D}_2 \Theta_{i,j}(c, s)$
$\Theta \leftarrow \Theta \Theta_{i,j}(c, s)$ } } }

Fonte: autoria própria.

em que ε é uma constante pequena e $\mathbf{D}_\ell^{(0)}$ denota a ℓ -ésima matriz antes da diagonalização conjunta aproximada.

Seguindo-se passos análogos aos da Subseção C.2.2, o problema de otimização de (C.41) equivale ao problema dado por

$$\begin{array}{l} \underset{\nu \in \mathbb{R}^2}{\text{maximize}} \quad \nu^\top \Phi_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_L) \nu \\ \text{sujeito a} \quad \nu^\top \nu = 1, \end{array} \quad (\text{C.42})$$

em que ν é relacionado aos parâmetros c e s de acordo com (C.34),

$$\Phi_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_L) = \sum_{\ell=1}^L \phi_{i,j}(\mathbf{D}_\ell) \phi_{i,j}^\top(\mathbf{D}_\ell) \quad (\text{C.43})$$

é uma matriz 2×2 positiva semidefinida e os vetores $\phi_{i,j}(\mathbf{D}_\ell)$, para $\ell = 1, 2, \dots, L$, são dados por (C.35).

Assim como para $L = 2$, o máximo do problema corresponde ao máximo autovalor de $\Phi_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_L)$ e é alcançado quando $\boldsymbol{\nu}$ é o autovetor associado a esse autovalor. Por conveniência, adotam-se rotações internas no método de Jacobi, *i.e.*, $\theta \in [-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}]$, e denota-se o vetor ótimo por $\boldsymbol{\nu} = [\nu_1 \ \nu_2]^\top$. Dessa forma, os valores de c e s podem ser calculados analogamente ao caso para $L = 2$. Na Tabela 5, apresenta-se um resumo dos principais passos do método de Jacobi estendido por rotações internas e cíclico por linhas para $L > 1$ matrizes simétricas $N \times N$. Nessa tabela, a matriz de rotação é inicializada com uma matriz identidade conforme Bunse-Gerstner, Byers e Mehrmann (1993). Cardoso e Souloumiac (1996) propõem inicializar o algoritmo com a matriz de autovetores de alguma das matrizes $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_L$ para obter uma convergência mais rápida.

Tabela 5 – Passos principais do método de Jacobi estendido por rotações internas e cíclico por linhas para $L > 1$ matrizes simétricas $N \times N$.

Entradas:

$\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_L \in \mathbb{R}^{N \times N}$ matrizes simétricas

$\varepsilon > 0$ escalar pequeno

Saída:

$\boldsymbol{\Theta} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ matriz ortogonal $\boldsymbol{\Theta}^{-1} = \boldsymbol{\Theta}^\top$ tal que

$\sum_{\ell=1}^L \text{off}(\boldsymbol{\Theta}^\top \mathbf{D}_\ell \boldsymbol{\Theta}) < \varepsilon \sum_{\ell=1}^L \|\mathbf{D}_\ell\|_F$

$\boldsymbol{\Theta} \leftarrow \mathbf{I}_N$

Enquanto $\sum_{\ell=1}^L \text{off}(\boldsymbol{\Theta}^\top \mathbf{D}_\ell \boldsymbol{\Theta}) \geq \varepsilon \sum_{\ell=1}^L \|\mathbf{D}_\ell\|_F$, faça: {

 Para $i = 1, 2, \dots, N$, faça: {

 Para $j = i + 1, i + 2, \dots, N$, faça: {

 Para $\ell = 1, 2, \dots, L$, faça:

$\phi_{i,j}(\mathbf{D}_\ell) \leftarrow [[\mathbf{D}_\ell]_{i,i} - [\mathbf{D}_\ell]_{j,j} \ 2[\mathbf{D}_\ell]_{i,j}]^\top$

$\Phi_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_L) \leftarrow \sum_{\ell=1}^L \phi_{i,j}(\mathbf{D}_\ell) \phi_{i,j}^\top(\mathbf{D}_\ell)$

$\boldsymbol{\nu} \leftarrow$ autovetor de norma unitária associado ao $\max \lambda\{\Phi_{i,j}(\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \dots, \mathbf{D}_L)\}$

 Se $\nu_1 = 0$, faça:

$(c, s) \leftarrow \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$

 Caso contrário, se $\nu_2 = 0$, faça:

$(c, s) \leftarrow (1, 0)$

 Caso contrário, faça: {

$c \leftarrow \sqrt{\nu_1 + 1}/\sqrt{2}$

$s \leftarrow \nu_2/\sqrt{2\nu_1 + 2}$ }

 Calcule $\boldsymbol{\Theta}_{i,j}(c, s)$ segundo (C.19)

 Para $\ell = 1, 2, \dots, L$, faça:

$\mathbf{D}_\ell \leftarrow \boldsymbol{\Theta}_{i,j}^\top(c, s) \mathbf{D}_\ell \boldsymbol{\Theta}_{i,j}(c, s)$

$\boldsymbol{\Theta} \leftarrow \boldsymbol{\Theta} \boldsymbol{\Theta}_{i,j}(c, s)$ } } }

Fonte: autoria própria.