

ANNEXE - "DIAGONALISATION ET CHANGEMENT DE BASE"

Cette annexe traite de la diagonalisation d'une matrice (voir entre autres *Y. Saâd, 1996*)¹ et en particulier de la diagonalisation de matrices symétriques définies, telles que par exemple les matrices de covariances ou de corrélations (qui sont par construction symétriques définies-positives) ou encore les matrices aux différences finies de type "Laplacienne" avec conditions de Dirichlet (qui sont symétriques définies négatives).

Matrices $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$ semblables (*similar matrices*) et similitudes (*similarity transforms*)

Les matrices $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{B}}$ sont semblables si elles sont liées par une transformation:

$$\underline{\underline{B}} \rightarrow \underline{\underline{A}} = \underline{\underline{P}} \underline{\underline{B}} \underline{\underline{P}}^{-1}$$

Cette transformation représente la matrice $\underline{\underline{B}}$ dans une autre base.

Elle préserve les valeurs propres λ :

$$\lambda_B \rightarrow \lambda_A = \lambda_B$$

Elle transforme les vecteurs propres $\underline{\underline{V}}$ comme suit :

$$\underline{\underline{V}}_B \rightarrow \underline{\underline{V}}_A = \underline{\underline{P}} \underline{\underline{V}}_B$$

Le changement de base correspondant s'écrit, pour n'importe quel vecteur :

$$\underline{\underline{U}}_B \rightarrow \underline{\underline{U}}_A = \underline{\underline{P}} \underline{\underline{U}}_B$$

Diagonalisation d'une matrice carrée $\underline{\underline{A}}$

Définition: Une matrice carrée $\underline{\underline{A}}$ est diagonalisable ssi $\exists \underline{\underline{D}}$ diagonale : $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{P}} \underline{\underline{D}} \underline{\underline{P}}^{-1}$

Théorème: Une conséquence de cette définition est que la matrice $\underline{\underline{A}}$ de taille $(K \times K)$ est diagonalisable ssi elle possède K vecteurs propres linéairement indépendants :

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{P}} \underline{\underline{D}} \underline{\underline{P}}^{-1} \Leftrightarrow \underline{\underline{A}} \underline{\underline{P}} = \underline{\underline{P}} \underline{\underline{D}} \Leftrightarrow \underline{\underline{A}} \underline{\underline{P}}_j = \lambda_j \underline{\underline{P}}_j \text{ (sans sommation sur } j)$$

Conséquence (corollaire): On en déduit que les termes diagonaux λ_j de la matrice diagonale $\underline{\underline{D}}$ sont les valeurs propres de $\underline{\underline{A}}$, mais aussi que les vecteurs colonnes $\underline{\underline{P}}_j$ de la matrice $\underline{\underline{P}}$ représentent les vecteurs propres de $\underline{\underline{A}}$ ($j=1, \dots, K$).

Diagonalisation d'une matrice symétrique définie-positive $\underline{\underline{C}}$

Une matrice symétrique définie-positive $\underline{\underline{C}}$ est toujours diagonalisable, et la matrice $\underline{\underline{P}}$ est dans ce cas une matrice "orthogonale" - on pourrait dire "orthonormale" ou encore "unitaire" (*unitary matrix*) - telle que :

$$\underline{\underline{P}}^T \underline{\underline{P}} = \underline{\underline{P}} \underline{\underline{P}}^T = \underline{\underline{I}}$$

On a donc les relations suivantes pour la matrice $\underline{\underline{C}}$:

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{P}} \underline{\underline{D}} \underline{\underline{P}}^T \Leftrightarrow \underline{\underline{D}} = \underline{\underline{P}}^T \underline{\underline{C}} \underline{\underline{P}} \Leftrightarrow$$

$$\underline{\underline{C}} \underline{\underline{P}} = \underline{\underline{P}} \underline{\underline{D}} \Leftrightarrow \underline{\underline{C}} \underline{\underline{P}}_j = \lambda_j \underline{\underline{P}}_j \text{ (sans sommation sur } j)$$

On voit à nouveau que les vecteurs colonnes $\underline{\underline{P}}_j$ ($j=1, \dots, K$) de la matrice $\underline{\underline{P}}$ sont les vecteurs propres $\underline{\underline{V}}_C$ de la matrice $\underline{\underline{C}}$. Les vecteurs propres $\underline{\underline{V}}_D$ de $\underline{\underline{D}}$, par construction, sont les vecteurs de la base dans laquelle $\underline{\underline{C}}$ est diagonalisée, et ils sont appelés "Composantes Principales" (C.P.) de la matrice $\underline{\underline{C}}$.

En résumé²: $\lambda_C = \text{Diag}(\underline{\underline{D}})$; $\underline{\underline{V}}_C = \text{Col}(\underline{\underline{P}}) = \underline{\underline{P}} \underline{\underline{V}}_D$; $\underline{\underline{V}}_D = \underline{\underline{P}}^T \underline{\underline{V}}_C$.

¹ Y. Saâd, 1996: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, PWS Publishing, Boston. (Chap.1).

² Exemple d'application en analyse statistique multivariée (matrice de covariance $\underline{\underline{C}}$) :

Soient K variables: $\underline{\underline{X}} \Rightarrow$ Matrice de Covar($K \times K$): $\underline{\underline{C}}_{XX} \Rightarrow$ Diagonalisée: $\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{P}}^T \underline{\underline{C}}_{XX} \underline{\underline{P}} \Rightarrow$ C.P. : $\underline{\underline{Z}} = \underline{\underline{P}}^T \underline{\underline{X}}$.