Тема 10. Приведение симметричной матрицы к главным осям

10.1. Собственные векторы и собственные значения

Определение. Квадратная матрица $\mathbf{C}$ называется *ортогональной*, если её столбцы попарно ортогональны и их длины равны 1, т. е. столбцы образуют ортонормированный базис R^n.

Согласно задаче 9.3 ортогональность матрицы $\mathbf{C}$ равносильна условию $\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{C}^T$.

В курсе линейной алгебры доказывается

Теорема (о приведении к главным осям). Пусть $\mathbf{A}$ — произвольная симметричная ($\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$) квадратная матрица. Тогда существует такая ортогональная матрица $\mathbf{C}$, что

$$\mathbf{C}^T \mathbf{A} \mathbf{C} = \mathbf{\Lambda}, \tag{1}$$

где $\mathbf{\Lambda}$ — диагональная матрица: $\lambda_{ij} = 0$ при $j \neq i$. Ради краткости положим $\lambda_i = \lambda_{ii}$, $i = 1, \ldots, n$. Числа $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ называются *собственными значениями* матрицы $\mathbf{A}$ (см. рис. 1). Столбцы $\boldsymbol{c}_1, \ldots, \boldsymbol{c}_n$ матрицы $\mathbf{C}$ называются *собственными векторами.*

λ_1	0	0	0
0	λ_2	0	0
0	0	...	0
0	0	0	λ_n

Рис. 1

Оси, порождённые собственными векторами, называются *главными осями* матрицы $\mathbf{A}$. Если все собственные значения λ_i различны, то собственные векторы определяются однозначно с точностью до выбора направления (одновременной смены знака у всех компонент вектора).[1]

Через собственные значения выражаются такие важные скалярные характеристики матрицы $\mathbf{A}$, как сумма элементов на главной диагонали $a_{11} + \ldots + a_{nn}$ (так называемый *след*)

$$\operatorname{tr} \mathbf{A} = \lambda_1 + \ldots + \lambda_n$$

и *определитель*

$$\det \mathbf{A} = \lambda_1 \lambda_2 \ldots \lambda_n.$$

Через сами элементы a_{ij} матрицы $\mathbf{A}$ определитель $\det \mathbf{A}$ выражается громоздко и неудобно для вычисления при больших размерностях *n*. Приведём явные формулы только для определителей матриц размерности 2 x 2 и 3 x 3 соответственно:

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21},$$

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = a_{11} a_{22} a_{33} + a_{12} a_{23} a_{31} + a_{21} a_{32} a_{13} - a_{13} a_{22} a_{31} - a_{12} a_{21} a_{33} - a_{11} a_{23} a_{32}.$$

[1] Один из численных методов нахождения собственных значений и собственных векторов симметричной матрицы (*степенной метод*) приведён, например, в книге Лагутин М.Б. «Наглядная математическая статистика», с. 324-325.

Как вычислить $\det\mathbf{A}$? Если матрица $\mathbf{A}$ имеет треугольный вид, то известно, что $\det\mathbf{A}$ равен произведению элементов, находящихся на главной диагонали. Для произвольной матрицы $\mathbf{A}$ можно воспользоваться встроенной в Excel функцией МОПРЕД (MDETERM).

Умножая обе части формулы (1) слева на ортогональную матрицу $\mathbf{C}$ и учитывая, что $\mathbf{CC}^T=\mathbf{E}$, выводим формулу $\mathbf{AC}=\mathbf{C\Lambda}$. Эта формула означает, что *j*-й столбец $\boldsymbol{c}_j$ ($j=1, \ldots, n$) удовлетворяет равенству (задача 10.4)

$$\mathbf{A}\boldsymbol{c}_j=\lambda_j\boldsymbol{c}_j, \tag{2}$$

т. е. при умножении матрицы $\mathbf{A}$ на собственный вектор $\boldsymbol{c}_j$ последний не поворачивается, а просто растягивается в λ_j раз. Формула (2) равносильна системе линейных уравнений

$$(\mathbf{A}-\lambda_j\mathbf{E})\boldsymbol{c}_j=\mathbf{0}. \tag{3}$$

Правая часть этой системы — нулевой вектор $\mathbf{0}$ размерности *n*. Собственный вектор $\boldsymbol{c}_j$ — ненулевое решение системы (3). Согласно разделу 9.3 существование такого решения равносильно линейной зависимости столбцов матрицы $\mathbf{A}-\lambda_j\mathbf{E}$. Квадратная матрица с линейно зависимыми столбцами называется *вырожденной*. Из линейной алгебры известно, что критерием вырожденности матрицы является равенство нулю её определителя. Поэтому для нахождения собственных значений $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ надо решить *характеристическое уравнение*

$$\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{E})=0. \tag{4}$$

Упражнение. Используя формулы (4) и (3), найдите собственные значения и собственные векторы матрицы: а) $\mathbf{B}=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$; б) $\mathbf{D}=\begin{pmatrix}3 & 4\\ 4 & 3\end{pmatrix}$.

10.2. Неотрицательно определённые матрицы, эллипсоиды

Определение. Симметричная матрица $\mathbf{A}$ называется *неотрицательно определённой*, если $\boldsymbol{x}^T\mathbf{A}\boldsymbol{x}\ge 0$ для произвольного вектора $\boldsymbol{x}$.

Неотрицательная определённость матрицы равносильна условию, что все её собственные значения $\lambda_i\ge 0$. Невырожденная неотрицательно определённая матрица кратко называется *положительно определённой.* У такой матрицы все собственные значения $\lambda_i>0$.

Например, приведённая выше в упражнении матрица $\mathbf{B}$ неотрицательно определена:

$$\boldsymbol{x}^T\mathbf{B}\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}x_1 & x_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x_1 & x_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1+x_2\\ x_1+x_2\end{pmatrix}=x_1^2+2x_1x_2+x_2^2=(x_1+x_2)^2\ge 0.$$

Однако матрица $\mathbf{B}$ вырождена, так как её столбцы одинаковы (линейно зависимы). Поэтому она не положительно определена. Её собственными значениями служат $\lambda_1=2,\ \lambda_2=0$.

В свою очередь, приведённая выше в упражнении матрица $\mathbf{D}$ не обладает свойством неотрицательной определённости: её собственными значениями служат $\lambda_1=7,\ \lambda_2=-1<0$. Также в этом нетрудно убедиться непосредственно из определения, взяв, скажем, $\boldsymbol{x}=(1, -1)$:

$$\begin{pmatrix}1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3 & 4\\ 4 & 3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1\\ 1\end{pmatrix}=-2<0.$$

Известно, что для произвольной положительно определённой матрицы $\mathbf{A}$ существует единственная симметричная матрица, являющаяся решением матричного уравнения $\mathbf{X}\cdot\mathbf{X}=\mathbf{A}$. Она называется *квадратным корнем* из матрицы $\mathbf{A}$ и обозначается через $\mathbf{A}^{1/2}$. Её можно явно выразить на основе теоремы о приведении матрицы $\mathbf{A}$ к главным осям: $\mathbf{A}^{1/2}=\mathbf{C}\mathbf{\Lambda}^{1/2}\mathbf{C}^T$.

С произвольной положительно определённой матрицей $\mathbf{A}$ связано множество точек в R^n, удовлетворяющих неравенству

$$\boldsymbol{x}^T\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}\le r^2. \tag{5}$$

Это множество называется *n-мерным эллипсоидом* с центром в начале координат.

Нетрудно убедиться, что матрица $\mathbf{A}^{-1}$ приводится к главным осям с помощью той же самой ортогональной матрицы $\mathbf{C}$, что и сама матрица $\mathbf{A}$: $\mathbf{C}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}=\mathbf{\Lambda}^{-1}$ (задача 10.3).

Перейдём к новым координатам $\tilde{\boldsymbol{x}}$ в базисе, образуемом столбцами матрицы $\mathbf{C}$, используя формулу (3) из темы 9: $\tilde{\boldsymbol{x}}^T=\boldsymbol{x}^T\mathbf{C}$. Умножая её обе части справа на матрицу $\mathbf{C}^T$, получим равенство $\tilde{\boldsymbol{x}}^T\mathbf{C}^T=\boldsymbol{x}^T\mathbf{C}\mathbf{C}^T=\boldsymbol{x}^T$. Транспонируя в последней формуле обе части, выводим равенство $\mathbf{C}\tilde{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{x}$. В новых координатах неравенство (5) приобретёт следующий вид:

$$\boldsymbol{x}^T\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{x}=(\tilde{\boldsymbol{x}}^T\mathbf{C}^T)\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{C}\tilde{\boldsymbol{x}})=\tilde{\boldsymbol{x}}^T(\mathbf{C}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C})\,\tilde{\boldsymbol{x}}=\tilde{\boldsymbol{x}}^T\mathbf{\Lambda}^{-1}\tilde{\boldsymbol{x}}=\frac{\tilde{x}_1^2}{\lambda_1}+\ldots+\frac{\tilde{x}_n^2}{\lambda_n}=\left(\frac{\tilde{x}_1}{\sqrt{\lambda_1}}\right)^2+\ldots+\left(\frac{\tilde{x}_n}{\sqrt{\lambda_n}}\right)^2\le r^2.$$

Таким образом, n-мерный эллипсоид представляет собой растянутый по новым осям n-мерный шар радиуса r с коэффициентами растяжения $\sqrt{\lambda_1},\ldots,\sqrt{\lambda_n}$ соответственно. При растяжении шара n-мерный объём увеличивается в $\sqrt{\lambda_1\lambda_2\ldots\lambda_n}=\sqrt{\det\mathbf{A}}$ раз: длины рёбер каждого из кубиков сетки, поместившихся внутри шара, увеличиваются в $\sqrt{\lambda_1},\ldots,\sqrt{\lambda_n}$ раз соответственно. Тем самым установлен геометрический смысл определителя как показателя n-мерного объёма.

10.3. Норма матрицы, число обусловленности, матрица Гильберта

Рассмотрим систему из n линейных уравнений от n неизвестных

$$\mathbf{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}.$$

Если матрица $\mathbf{A}$ вырождена, то для некоторых правых частей $\boldsymbol{b}$ решение системы $\boldsymbol{x}$ будет неединственным, а для других $\boldsymbol{b}$ оно может не существовать.

Рассмотрим численный пример

$$\begin{pmatrix}1 & 2\\ 2 & 4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3\\ 6\end{pmatrix}.$$

Столбцы матрицы, очевидно, линейно зависимы. Решением является пара координат любой из точек, лежащих на прямой $x_1 + 2x_2 = 3$, например, $(3, 0)$ или $(1, 1)$. При замене в правой части числа 6 на $6{,}001$ система перестанет иметь решение.

Если матрица $\mathbf{A}$ почти вырожденная, то можно ожидать, что малые изменения в правой части $\boldsymbol{b}$ вызовут очень большие изменения в решении $\boldsymbol{x}$. В качестве примера рассмотрим

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4{,}001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

Единственным решением данной системы служит вектор $\boldsymbol{x} = (3, 0)$. Если же в правой части заменить число 6 на $6{,}001$, то решением системы станет вектор $\boldsymbol{x} = (1, 1)$.

Определяемое ниже число обусловленности матрицы показывает насколько матрица близка к вырожденности. Сначала введём понятие нормы матрицы.

Определение. *Нормой* квадратной матрицы $\mathbf{A}$ называется

$$\|\mathbf{A}\| = \max_{\boldsymbol{x}\neq\mathbf{0}} \frac{|\mathbf{A}\boldsymbol{x}|}{|\boldsymbol{x}|} = \max_{|\boldsymbol{x}|=1} |\mathbf{A}\boldsymbol{x}|.$$

Таким образом, норма матрицы выражает наибольшую степень растяжения единичной сферы $x_1^2 + \ldots + x_n^2 = 1$ в результате линейного преобразования $\boldsymbol{y} = \mathbf{A}\boldsymbol{x}$. Известно, что $\|\mathbf{A}\|$ совпадает с квадратным корнем из наибольшего собственного значения матрицы $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$.

Пусть $\mathbf{A}$ — невырожденная матрица. Тогда существует обратная матрица $\mathbf{A}^{-1}$, и для её нормы $\|\mathbf{A}^{-1}\|$ имеет место следующее представление:

$$\|\mathbf{A}^{-1}\| = \max_{\boldsymbol{y}\neq\mathbf{0}} \frac{|\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{y}|}{|\boldsymbol{y}|} = \max_{\mathbf{A}\boldsymbol{x}\neq\mathbf{0}} \frac{|\boldsymbol{x}|}{|\mathbf{A}\boldsymbol{x}|} = \max_{\boldsymbol{x}\neq\mathbf{0}} \frac{|\boldsymbol{x}|}{|\mathbf{A}\boldsymbol{x}|} = 1 \Big/ \min_{\boldsymbol{x}\neq\mathbf{0}} \frac{|\mathbf{A}\boldsymbol{x}|}{|\boldsymbol{x}|} = 1/\min_{|\boldsymbol{x}|=1} |\mathbf{A}\boldsymbol{x}|.$$

Определение. *Числом обусловленности* матрицы $\mathbf{A}$ называется

$$\operatorname{cond}(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\| = \frac{\max\limits_{|\boldsymbol{x}|=1} |\mathbf{A}\boldsymbol{x}|}{\min\limits_{|\boldsymbol{x}|=1} |\mathbf{A}\boldsymbol{x}|}.$$

Также известно, что $\operatorname{cond}(\mathbf{A})$ совпадает с квадратным корнем из отношения наибольшего и наименьшего собственных значений матрицы $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$.

Определение. *Матрицей Гильберта* (введена Д. Гильбертом в 1874 г.) называется матрица $\mathbf{H}_n$ размерности n x n с элементами

$$h_{ij} = \frac{1}{i + j - 1}, \quad i, j = 1, 2, \ldots, n.$$

Например, матрица Гильберта 5 x 5 выглядит так:

$$\mathbf{H}_5 = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} & \frac{1}{8} \\ \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} & \frac{1}{8} & \frac{1}{9} \end{bmatrix}.$$

Матрицы Гильберта являются стандартным примером очень плохо обусловленных матриц:

$$\mathrm{cond}(\mathbf{H}_3) = 5{,}2\cdot 10^2, \quad \mathrm{cond}(\mathbf{H}_5) = 4{,}8\cdot 10^5, \quad \mathrm{cond}(\mathbf{H}_8) = 1{,}5\cdot 10^{10}.$$

Для численного эксперимента рассмотрим систему $\mathbf{H}_5\boldsymbol{x} = \mathbf{0}$. Её единственным решением служит вектор $\boldsymbol{x} = \mathbf{0}$. Теперь заменим нулевую правую часть на вектор $(0, 0, 0, 0, 10^{-3})$. Тогда решением новой системы окажется вектор $\boldsymbol{x} = (0{,}63, -12{,}6,\ 56{,}7, -88{,}2,\ 44{,}1)$.

Дополнение. Число обусловленности — мера неустойчивости решения системы.

Объясним, почему именно $\mathrm{cond}(\mathbf{A})$, а не, скажем, определитель $\det\mathbf{A}$, выражает степень неустойчивости решения системы линейных уравнений к возмущению правой части $\boldsymbol{b}$. Изменим вектор $\boldsymbol{b}$ на малую величину $\Delta\boldsymbol{b}$. При этом решение $\tilde{\boldsymbol{x}}$ изменится на $\Delta\boldsymbol{x}$:

$$\mathbf{A}(\tilde{\boldsymbol{x}} + \Delta\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}.$$

Отсюда выводим, что $\mathbf{A}\cdot\Delta\boldsymbol{x} = \Delta\boldsymbol{b}$. Согласно полученным выше формулам имеем неравенства:

$$\|\mathbf{A}\| = \max_{x\neq\mathbf{0}}\frac{|\mathbf{A}\boldsymbol{x}|}{|\boldsymbol{x}|} \geq \frac{|\mathbf{A}\tilde{\boldsymbol{x}}|}{|\tilde{\boldsymbol{x}}|} = \frac{|\boldsymbol{b}|}{|\tilde{\boldsymbol{x}}|} \quad\Leftrightarrow\quad \frac{1}{|\tilde{\boldsymbol{x}}|} \leq \frac{\|\mathbf{A}\|}{\boldsymbol{b}|},$$

$$\frac{1}{\|\mathbf{A}^{-1}\|} = \min_{x\neq\mathbf{0}}\frac{|\mathbf{A}\boldsymbol{x}|}{|\boldsymbol{x}|} \leq \frac{|\mathbf{A}\cdot\Delta\boldsymbol{x}|}{|\Delta\boldsymbol{x}|} = \frac{|\Delta\boldsymbol{b}|}{|\Delta\boldsymbol{x}|} \quad\Leftrightarrow\quad |\Delta\boldsymbol{x}| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\|\cdot|\Delta\boldsymbol{b}|.$$

Перемножая левые и правые части неравенств, выводим окончательное неравенство

$$\frac{|\Delta\boldsymbol{x}|}{|\tilde{\boldsymbol{x}}|} \leq \|\mathbf{A}\|\cdot\|\mathbf{A}^{-1}\|\cdot\frac{|\Delta\boldsymbol{b}|}{|\boldsymbol{b}|} = \mathrm{cond}(\mathbf{A})\cdot\frac{|\Delta\boldsymbol{b}|}{|\boldsymbol{b}|}.$$

Таким образом, при относительном изменении правой части $\delta\boldsymbol{b} = |\Delta\boldsymbol{b}|/|\boldsymbol{b}|$ относительная ошибка решения системы $\delta\boldsymbol{x} = |\Delta\boldsymbol{x}|/|\tilde{\boldsymbol{x}}|$ может составить не более, чем $\mathrm{cond}(\mathbf{A})\cdot\delta\boldsymbol{b}$.

То, что $\mathrm{cond}(\mathbf{A})$ является лучшей мерой степени вырожденности квадратных матриц, чем определитель, показывает следующий пример. Возьмём в качестве матрицы $\mathbf{A}$ квадратную диагональную матрицу размерности 10 x 10 с элементами 0,1 на главной диагонали. Тогда $\det\mathbf{A} = (0{,}1)^{10} = 10^{-10}$, что показывает близость к вырожденности, в то время как столбцы матрицы ортогональны, и в действительности матрица далека от вырожденности. Если же принять в качестве степени вырожденности число обусловленности, то получим $\mathrm{cond}(\mathbf{A}) = 1$.

Задачи для самостоятельного решения

10.1. Пусть $\mathbf{C}$ и $\mathbf{D}$ — произвольные ортогональные матрицы. Доказать, что их произведение $\mathbf{CD}$ также является ортогональной матрицей.

10.2. Пусть матрица $\mathbf{A}$ представляется в виде $\mathbf{B}^T\mathbf{B}$, где $\mathbf{B}$ — некоторая матрица (не обязательно квадратная). Доказать, что матрица $\mathbf{A}$: а) симметричная, б) неотрицательно определённая.

10.3. Доказать, что матрица $\mathbf{A}^{-1}$ приводится к главным осям с помощью той же самой ортогональной матрицы $\mathbf{C}$, что и сама матрица $\mathbf{A}$: $\mathbf{C}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C} = \mathbf{\Lambda}^{-1}$.

10.4*. Получить формулу (2).

10.5*. Используя то, что матрица $\begin{pmatrix} 4 & 1 & -1 \\ 1 & 4 & -1 \\ -1 & -1 & 4 \end{pmatrix}$ имеет собственные значения $\lambda_1 = 6,\ \lambda_2 = \lambda_3 = 3,$ найти её собственные векторы $\boldsymbol{c}_1,\ \boldsymbol{c}_2,\ \boldsymbol{c}_3$. (*Замечание*. В отличие от первой оси, вторая и третья оси определяются неоднозначно. Найдите какое-нибудь решение.)