

## 线性代数 (XII)

Lecturer: 杨启哲

Last modified: 2025 年 5 月 11 日

## 1 特征值介绍

这一章我们从斐波那契数列开始, 斐波那契数列  $0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, \dots$ , 是一个递归数列, 定义为

$$F_n = \begin{cases} 0 & n = 0 \\ 1 & n = 1 \\ F_{n-1} + F_{n-2} & n \geq 2 \end{cases}$$

如果我们将其递推过程写成矩阵的形式, 即:

$$\begin{bmatrix} F_{n+1} \\ F_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_n \\ F_{n-1} \end{bmatrix}$$

我们将这个矩阵记为  $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ , 则斐波那契数列可以如下计算:

$$\begin{bmatrix} F_{n+1} \\ F_n \end{bmatrix} = A^n \begin{bmatrix} F_1 \\ F_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^n \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (1)$$

另一方面, 由递推公式的求法 (求  $a, c$  满足  $F_{k+2} + aF_{k+1} = c(F_{k+1} + aF_k)$ ) 我们可以得到:

$$\begin{aligned} F_{k+1} + \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} F_k &= \frac{1 + \sqrt{5}}{2} (F_k + \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} F_{k-1}) \\ F_{k+1} + \frac{-1 - \sqrt{5}}{2} F_k &= \frac{1 - \sqrt{5}}{2} (F_k + \frac{-1 - \sqrt{5}}{2} F_{k-1}) \end{aligned}$$

将上述式子写成矩阵的形式有:

$$\begin{bmatrix} F_{k+1} + \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} F_k \\ F_{k+1} + \frac{-1 - \sqrt{5}}{2} F_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_k + \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} F_{k-1} \\ F_k + \frac{-1 - \sqrt{5}}{2} F_{k-1} \end{bmatrix}$$

从而通过类似的讨论可以得到:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} F_{k+1} + \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} F_k \\ F_{k+1} + \frac{-1 - \sqrt{5}}{2} F_k \end{bmatrix} &= \left( \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \right)^k \begin{bmatrix} F_1 + \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} F_0 \\ F_1 + \frac{-1 - \sqrt{5}}{2} F_0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k & 0 \\ 0 & \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1 + \frac{-1 + \sqrt{5}}{2} F_0 \\ F_1 + \frac{-1 - \sqrt{5}}{2} F_0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2)$$

注意到:

$$\begin{bmatrix} F_1 + \frac{-1+\sqrt{5}}{2}F_0 \\ F_1 + \frac{-1-\sqrt{5}}{2}F_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \\ 1 & \frac{-1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1 \\ F_0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} F_{k+1} + \frac{-1+\sqrt{5}}{2}F_k \\ F_{k+1} + \frac{-1-\sqrt{5}}{2}F_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \\ 1 & \frac{-1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{k+1} \\ F_k \end{bmatrix}$$

从而有:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} F_{k+1} + \frac{-1+\sqrt{5}}{2}F_k \\ F_{k+1} + \frac{-1-\sqrt{5}}{2}F_k \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \\ 1 & \frac{-1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{k+1} \\ F_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \\ 1 & \frac{-1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_k \\ F_{k-1} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} F_{k+1} + \frac{-1+\sqrt{5}}{2}F_k \\ F_{k+1} + \frac{-1-\sqrt{5}}{2}F_k \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_k + \frac{-1+\sqrt{5}}{2}F_{k-1} \\ F_k + \frac{-1-\sqrt{5}}{2}F_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \\ 1 & \frac{-1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_k \\ F_{k-1} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

因此我们得到了:

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \\ 1 & \frac{-1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \\ 1 & \frac{-1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix}$$

令:  $X = \begin{bmatrix} 1 & \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \\ 1 & \frac{-1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix}$ ,  $\Lambda = \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}$ 。则上述式子可改写为:

$$XA = \Lambda X, \quad \text{即: } A = X^{-1}\Lambda X.$$

注意到此时:

$$X^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{5+\sqrt{5}}{10} & \frac{5-\sqrt{5}}{10} \\ \frac{\sqrt{5}}{5} & -\frac{\sqrt{5}}{5} \end{bmatrix}$$

回到等式(1)和等式(2), 注意到:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} F_{k+1} \\ F_k \end{bmatrix} &= \left( \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right)^k \begin{bmatrix} F_1 \\ F_0 \end{bmatrix} \\ &= \left( X^{-1} \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} X \right)^k \begin{bmatrix} F_1 \\ F_0 \end{bmatrix} \\ &= \left( X^{-1} \begin{bmatrix} \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k & 0 \\ 0 & \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^k \end{bmatrix} X \right) \begin{bmatrix} F_1 \\ F_0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

这也说明等式等式(1)和等式(2)是一致的, 同时  $A = X^{-1}\Lambda X$  的分解也给出了一个简单的计算  $A^n$  的方式。

**特征值和特征向量** 令  $X^{-1}$  的列向量是  $x_1, x_2$ 。我们有:

$$AX^{-1} = [Ax_1 \ Ax_2] = X^{-1} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} = [x_1 \ x_2] \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} = [\lambda x_1 \ \lambda x_2]$$

也就是:

$$Ax_1 = \lambda_1 x_1, \quad Ax_2 = \lambda_2 x_2$$

我们称  $\lambda_1, \lambda_2$  是  $A$  的**特征值 (Eigenvalue)**, 而  $x_1, x_2$  是相应的**特征向量 (Eigenvector)**。下面首先尝试给出如下的定义:

## 定义 1.1 (特征值和特征向量, 尝试定义)

令  $A$  是一个  $n \times n$  的矩阵,  $\lambda$  是一个实数,  $x \in \mathbb{R}^n$  是一个非零的  $n$  维向量。如果:

$$Ax = \lambda x.$$

则称  $\lambda$  是  $A$  的特征值 (Eigenvalue),  $x$  是  $\lambda$  对应的特征向量 (Eigenvector)。

一些例子 下面通过一些例子来理解上述概念。

## 例 1.2 (斐波那契矩阵的特征值和特征向量)

先来回顾前面斐波那契上的例子:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

由前面讨论:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{5+\sqrt{5}}{10} \\ \frac{\sqrt{5}}{5} \end{bmatrix} = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \begin{bmatrix} \frac{5+\sqrt{5}}{10} \\ \frac{\sqrt{5}}{5} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{5-\sqrt{5}}{10} \\ -\frac{\sqrt{5}}{5} \end{bmatrix} = \frac{1-\sqrt{5}}{2} \begin{bmatrix} \frac{5-\sqrt{5}}{10} \\ -\frac{\sqrt{5}}{5} \end{bmatrix}$$

从而对于矩阵  $A$ :

1. 其有两个特征值:  $\lambda_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ ,  $\lambda_2 = \frac{1-\sqrt{5}}{2}$ , 对应的特征向量为:  $x_1 = \begin{bmatrix} \frac{5+\sqrt{5}}{10} \\ \frac{\sqrt{5}}{5} \end{bmatrix}$ ,  $x_2 = \begin{bmatrix} \frac{5-\sqrt{5}}{10} \\ -\frac{\sqrt{5}}{5} \end{bmatrix}$ .

2. 回顾之前的计算:

$$AX^{-1} = A \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} = X^{-1} \Lambda$$

## 例 1.3 (对角矩阵的特征值和特征向量)

考察对角矩阵:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{bmatrix}$$

显然我们有:

$$\Lambda e_i = \lambda_i e_i, \quad \text{这里 } e_i = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

从而  $\Lambda$  的特征值为  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ , 每个  $\lambda_i$  对应的特征向量为  $e_i$ 。

#### 例 1.4 (投影矩阵的特征值和特征向量)

现在来考察投影矩阵，令  $A$  是一个  $m \times n$  且  $\text{rank}(A) = n$  的矩阵，则投影至  $C(A)$  的投影矩阵  $P$  可以表示为：

$$P = A(A^T A)^{-1} A^T$$

注意到  $Px$  是  $x$  到  $C(A)$  上的投影，所以  $Px = \lambda x$  只有两种情况：

1.  $x \in C(A)$ , 此时  $Px = 1x = x$
2.  $x \in C(A)^\perp$  即  $x \in N(A^T)$ , 此时  $Px = 0x = 0$

**特征值为 0 的情况** 假设  $n \times n$  的矩阵  $A$  存在特征值 0，即存在一个非零的  $x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$  满足：

$$Ax = 0x = 0$$

这说明  $Ax = 0$  有非零解，即  $\dim(N(A)) \geq 1$ ，进一步有：

#### 引理 1.5

下述是等价的：

1.  $A$  具有特征值 0。
2.  $N(A) \neq \{0\}$ 。
3.  $\text{rank}(A) < n$ 。
4.  $\det(A) = 0$ 。

**特征值和特征向量的几何解释** 下面从几何的角度来理解一下特征值的意义。令  $A$  是一个  $n \times n$  的矩阵，将其看作一个函数  $f_A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ ，即：

$$f_A(x) = Ax$$

则当  $x$  是  $A$  的特征向量，即  $Ax = \lambda x$  时我们有：

$$f_A(x) = \lambda x$$

这意味着  $f_A$  不改变  $x$  的方向!

另一方面，考察矩阵： $A = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0.7 \end{bmatrix}$ ，有：

$$A \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.4 \end{bmatrix}, \quad A \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

从而  $1, \frac{1}{2}$  是其两个特征值， $\begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.4 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$  是相应的特征向量，注意到这两个向量是线性无关的，意味

着任何一个向量都可以表示成其线性组合，比如：

$$\begin{bmatrix} 0.8 \\ 0.2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.4 \end{bmatrix} + 0.2 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

从而：

$$A^{100} \begin{bmatrix} 0.8 \\ 0.2 \end{bmatrix} = (1)^{100} \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.4 \end{bmatrix} + 0.2 \left(\frac{1}{2}\right)^{100} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.4 \end{bmatrix}$$

这也给出了  $A^n x$  的一种估计方式。

**特征值的计算** 进一步回顾上述例子中特征值的计算，实际是就是：

$$Ax = \lambda x \implies (\lambda E - A)x = 0 \text{ 有非零解}$$

因此有下列定理：

### 定理 1.6

令  $A$  是  $n \times n$  的矩阵， $\lambda$  是  $A$  的特征值当且仅当：

$$\det(\lambda E - A) = 0$$

**证明：**

$$\begin{aligned} \lambda \text{ 是 } A \text{ 的特征值} &\iff Ax = \lambda x \text{ 有非零解} \\ &\iff (\lambda E - A)x = 0 \text{ 有非零解} \\ &\iff \text{rank}(\lambda E - A) < n \\ &\iff \det(\lambda E - A) = 0 \end{aligned}$$

□

将  $\lambda$  看成一个变量，则对于  $n \times n$  的矩阵  $A$ ：

$$f(\lambda) = \det(\lambda E - A)$$

是一个关于  $\lambda$  的  $n$  次多项式，我们将其称为矩阵  $A$  的特征多项式：

### 定义 1.7 (特征多项式 (Characteristic Polynomial))

令  $A$  是  $n \times n$  的矩阵，则称  $f(\lambda) = \det(\lambda E - A)$  是  $A$  的特征多项式 (Characteristic Polynomial)。

不难得出如下结论：

### 陈述 1.8

令  $A$  是  $n \times n$  的矩阵，则其特征多项式  $f(\lambda)$  的零点即为  $A$  的特征值。

我们依旧通过一些例子来理解特征多项式：

1. 对于矩阵  $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ , 其特征多项式为:

$$\det(\lambda E - A) = \begin{vmatrix} \lambda - 1 & -1 \\ -1 & \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \lambda - 1$$

该多项式的两个零点为:

$$\lambda_1 = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{1 - \sqrt{5}}{2}$$

2. 对角矩阵:  $\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{bmatrix}$  的特征多项式为:

$$(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2) \cdots (\lambda - \lambda_n)$$

其对应的零点为:

$$\lambda_1, \dots, \lambda_n (\text{可能重复})$$

**消元法会改变特征值!** 高斯-若尔当消元法是课程中一个重要的工具, 但下面的例子表明, 该过程会改变矩阵的特征值:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \implies U = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

我们有:

$$1. f_A(\lambda) = (1 - \lambda)(6 - \lambda) - 6 = \lambda(\lambda - 7) \implies \lambda_1 = 0, \lambda_2 = 7.$$

$$2. f_U(\lambda) = (1 - \lambda)(0 - \lambda) - 0 = \lambda(\lambda - 1) \implies \lambda_1 = 0, \lambda_2 = 1.$$

**旋转矩阵的特征值和特征向量** 现在来关注一个特殊的例子: 旋转矩阵。考察如下的矩阵:

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \frac{\pi}{2} & -\sin \frac{\pi}{2} \\ \sin \frac{\pi}{2} & \cos \frac{\pi}{2} \end{bmatrix}$$

其特征多项式为:

$$\det(\lambda E - Q) = \begin{vmatrix} \lambda & 1 \\ -1 & \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + 1$$

其两个零点为:

$$\lambda_1 = i, \lambda_2 = -i$$

从而  $Q$  有两个复数特征值, 其对应的特征向量为:

$$Q \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} = -i \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}$$

$$Q \begin{bmatrix} i \\ 1 \end{bmatrix} = i \begin{bmatrix} i \\ 1 \end{bmatrix}$$

也是在  $\mathbb{C}^2$  上的向量！

上述例子说明了定义 1.1 的不足之处，即即使考虑的是实数矩阵  $A$ ，其特征值和特征向量也可能是复数的。我们需要对定义 1.1 进行修正：

### 定义 1.9 (特征值和特征向量)

令  $A$  是一个  $n \times n$  的矩阵， $\lambda \in \mathbb{C}$ ,  $x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ 。如果：

$$Ax = \lambda x$$

则称  $\lambda$  是  $A$  的特征值 (Eigenvalue),  $x$  是  $\lambda$  对应的特征向量 (Eigenvector)。

不难验证，上述的所有讨论在定义 1.9 下依旧成立，因此并不需要花费篇幅修改之前的内容。现在可以总结如下计算特征值和特征向量的方法：

1. 计算  $A$  的特征多项式，即  $\lambda E - A$  的行列式  $\det(\lambda E - A)$ .
2. 计算  $\det(\lambda E - A)$  的根，我们一共会得到  $n$  个特征值（可能重复）。这使得  $\lambda E - A$  变成一个奇异矩阵 ( $\text{rank}(A) < n$ ).
3. 对每个  $\lambda$ ，通过解方程  $(\lambda E - A)x = 0$  来获取  $\lambda$  对应的特征向量  $x$ .

### 注 1.10

在一般意义下：

1. 矩阵可以有复数。
2. 向量空间是可以通过复数扩充的，即数乘允许  $c \in \mathbb{C}$  进行运算。
3. 甚至复数域的结论会更加优美。

但在本课程中：

1. 出于课程的面向对象和内容，我们只考虑实数的矩阵。
2. 但是我们依旧会讨论到复数的特征值和特征向量。

**特征值的数目** 本节的最后，我们来讨论一下特征值的数目。由陈述 1.8，我们知道特征值的数目和特征多项式的零点数目是相同的。注意到 代数基本定理：

### 定理 1.11 (Fundamental Theorem of Algebra)

对于任一的  $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{C}$ ，我们有

$$x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_{n-1} x + a_n = (x - b_1)(x - b_2) \cdots (x - b_n)$$

这里  $b_1, \dots, b_n \in \mathbb{C}$ ，即任一单变元的  $n$  次复系数多项式恰好有  $n$  个复数根（可重复）。

得益于定义1.7，不难得出：

### 推论 1.12

令  $A$  是一个  $n \times n$  的矩阵，则在计算重根的意义下， $A$  恰好有  $n$  个  $\mathbb{C}$  中的特征值。

### 例 1.13

考察矩阵

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

其特征多项式为  $f(\lambda) = \lambda^2(\lambda^2 + 1)$ ，注意到  $f(\lambda) = 0$  一共有 4 个解：

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 0, \lambda_3 = i, \lambda_4 = -i$$

这里 0 是一个重根，在计算重复次数以后可以得到其一共有 4 个特征值。

## 2 对角化矩阵

回顾上节斐波那契数列中提到的等式1和等式2：

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} F_{k+1} \\ F_k \end{bmatrix} &= \left( \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right)^k \begin{bmatrix} F_1 \\ F_0 \end{bmatrix} \\ &= \left( X' \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} (X')^{-1} \right)^k \begin{bmatrix} F_1 \\ F_0 \end{bmatrix} \\ &= \left( X' \begin{bmatrix} \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k & 0 \\ 0 & \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^k \end{bmatrix} (X')^{-1} \right) \begin{bmatrix} F_1 \\ F_0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

中间的对角矩阵  $\Lambda$  极大的简化了我们对  $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^k$  的计算，我们把这过程称为对角化 (Diagonalization)，下面给出正式的定义：

### 定义 2.1 (Diagonalization)

一个方阵  $A$  是可对角化的 (Diagonalizable)，如果其存在一个可逆矩阵  $X$  和对角矩阵  $\Lambda$  使得：

$$A = X\Lambda X^{-1}, \text{ 或者等价的 } \Lambda = X^{-1}AX$$

## 推论 2.2

若  $A = X\Lambda X^{-1}$ , 其中  $X = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ , 则对于任意的  $k \geq 1$  我们有:

$$A^k = X\Lambda^k X^{-1} = X \begin{bmatrix} \lambda_1^k & & & \\ & \lambda_2^k & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n^k \end{bmatrix} X^{-1}$$

我们也称这是矩阵的谱分解。

## 例 2.3

考察矩阵  $A = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$ , 我们有:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

其中  $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$  是可逆矩阵, 并且:

$$\left( \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \right)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

$A = X\Lambda X^{-1}$  可以理解成  $AX = X\Lambda$ , 从而  $A$  可以对角化说明的是:

1.  $X$  的每一列都应该是  $A$  的特征向量。
2.  $X$  是可逆的, 所以  $A$  需要有  $n$  个线性无关的特征向量。

也即下述定理:

## 定理 2.4

$n \times n$  的矩阵可对角化当且仅当  $A$  有  $n$  个线性无关的特征向量。

**证明:** 假设  $A$  有  $n$  个特征值  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ (可以重复), 对应的特征向量  $x_1, \dots, x_n$  是线性无关的:

$$Ax_1 = \lambda_1 x_1, \dots, Ax_n = \lambda_n x_n$$

定义下列矩阵:

$$\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = \begin{bmatrix} \lambda_1^k & & & \\ & \lambda_2^k & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n^k \end{bmatrix}, \quad X = [x_1, \dots, x_n]$$

则有：

1.  $A\Lambda = A \begin{bmatrix} x_1, \dots, x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Ax_1, \dots, Ax_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 x_1, \dots, \lambda_n x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1, \dots, x_n \end{bmatrix} \Lambda = X\Lambda.$
2.  $\text{rank}(X) = n$ , 从而  $X$  可逆, 即:  $A = X\Lambda X^{-1}$ 。

另一方面, 定义下列矩阵:

$$\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = \begin{bmatrix} \lambda_1^k & & & \\ & \lambda_2^k & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n^k \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} x_1, \dots, x_n \end{bmatrix}$$

容易验证:

1. 对于每个  $x_i$ , 有  $Ax_i = \lambda_i x_i$ 。
2.  $x_1, \dots, x_n$  是线性无关的。

□

**一些例子** 还是通过一些例子来进行理解。

1. 回顾之前提到的矩阵:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

其特征多项式为  $f_A(\lambda) = \lambda^2 - 4\lambda + 3 = (\lambda - 1)(\lambda - 3)$ , 分别计算其对应的特征向量为:

- (1)  $\lambda = 1$  时解方程  $(A - E)x = 0$  得一个其特征向量为  $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ .
- (2)  $\lambda = 3$  时解方程  $(A - 3E)x = 0$  得一个其特征向量为  $\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$ .

2. 下列矩阵:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad C = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

不可对角化。

- $A$  的特征值为  $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ , 只有一个特征向量。
- $B$  的特征值为  $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ , 只有一个特征向量。
- $C$  的特征值为  $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$ , 只有一个特征向量。

## 注 2.5

注意到矩阵  $C$  是可逆的，因此可逆和可对角化并没有直接的关系。

- (1) 矩阵是否可逆取决于是否有零特征值 ( $\lambda = 0$ )。
- (2) 矩阵是否可对角化取决于是否有  $n$  个特征向量。

下述定理给出了  $n$  个线性无关的特征向量的一个充分条件：

## 定理 2.6

令  $x_1, \dots, x_k$  是  $A$  的  $k$  个特征向量，并且其对应的特征值两两不相同。则  $x_1, \dots, x_k$  是线性无关的。

从而  $n$  个不同的特征值蕴含了可对角化的结论：

## 推论 2.7

如果  $n \times n$  的矩阵  $A$  有  $n$  个不同的特征值，则  $A$  是可对角化的。

下面开始对定理 2.6 进行证明，其直观理解是，当  $\lambda$  互不相等的时候，下属两个等式不可能相等：

$$\begin{aligned} Ax &= \lambda x = c_1 \lambda x_1 + \cdots + c_k \lambda x_k \\ A(c_1 x_1 + \cdots + c_k x_k) &= c_1 \lambda_1 x_1 + \cdots + c_k \lambda_k x_k \end{aligned}$$

**证明：**[定理 2.6 的证明.] 对  $k$  做归纳法， $k = 1$  的时候是显然的。

假设  $k \geq 2$ ，并且：

$$c_1 x_1 + \cdots + c_k x_k = 0$$

下面证明  $c_1 = c_2 = \cdots = c_k = 0$ ，反设结论不成立，即存在  $c_i \neq 0$ ，即：

$$x_i = \sum_{j \in [k] \setminus \{i\}} -\frac{c_j}{c_i} x_j$$

从而有：

$$\lambda_i x_i = Ax_i = \sum_{j \in [k] \setminus \{i\}} -\frac{c_j}{c_i} Ax_j = \sum_{j \in [k] \setminus \{i\}} -\frac{c_j}{c_i} \lambda_j x_j$$

注意到，由归纳假设：

$x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_k$  是线性无关的

从而：

1. 如果  $\lambda_i = 0$ ，则有  $\frac{c_j}{c_i} \lambda_j = 0$ ，从而  $\frac{c_j}{c_i} = 0$ ， $x_i = 0$ ，矛盾。

2. 如果  $\lambda_i \neq 0$ ，则有：

$$x_i = \sum_{j \in [k] \setminus \{i\}} -\frac{c_j}{c_i} x_j \text{ 和 } x_i = \sum_{j \in [k] \setminus \{i\}} -\frac{c_j}{c_i} \frac{\lambda_j}{\lambda_i} x_j$$

注意到  $\lambda_j \neq \lambda_i$ , 所以存在不全为 0 的  $d_1, \dots, d_{i-1}, d_{i+1}, \dots, d_k$  满足:

$$d_1x_1 + \dots + d_{i-1}x_{i-1} + d_{i+1}x_{i+1} + \dots + d_kx_k = 0$$

与  $x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_k$  是线性无关的矛盾。

□

**相似矩阵** 再来考虑一下对角化的形式:

$$A = X \Lambda X^{-1}$$

当特征向量组成的矩阵  $X$  改变的时候, 我们得到了无数个不同的矩阵。

- 但这些矩阵的特征值都是相同的。

更一般的, 对于

$$A = BCB^{-1}$$

其中  $B$  是可逆矩阵, 即使  $C$  不可以对角化, 我们也可以得到跟  $C$  具有相同特征值的一大类矩阵。我们称这样一个关系叫相似 (similar):

**定义 2.8 (相似矩阵 (Similar Matrix))**

给定矩阵  $A, B$ , 如果存在可逆矩阵  $P$ , 使得:

$$A = PBP^{-1}$$

则称矩阵  $A$  和  $B$  是相似的。

**引理 2.9**

相似矩阵  $A$  和  $B$  的特征值相同。

**证明:** 假设  $Bx = \lambda x$ , 则我们有:

$$A(Px) = PBP^{-1}(Px) = PBx = \lambda Px$$

□

**引理 2.10**

相似关系是一个等价关系。

**证明:**

1. 自反性:  $A = PAP^{-1}$ , 其中  $P = E$ .
2. 对称性:  $A = PBP^{-1} \implies B = P^{-1}AP$ .
3. 传递性:  $A = PBP^{-1}, B = QCR^{-1} \implies A = PQCR^{-1}P^{-1}$ .

□

**相似矩阵的直观理解** 我们先补充一些线性变换上的概念。这一部分的定理具体证明都会在正式介绍线性变换的时候完成，现在只是为了帮助大家建立起一个概念。假设一个线性空间  $V$  的两组基为  $e_1, \dots, e_n$  和  $f_1, \dots, f_n$ ，则存在  $c_{ij} \in \mathbb{R}$ ,  $i, j \in [n]$  满足：

$$f_1 = c_{11}e_1 + c_{21}e_2 + \cdots + c_{n1}e_n$$

$$f_2 = c_{12}e_1 + c_{22}e_2 + \cdots + c_{n2}e_n$$

...

$$f_n = c_{1n}e_1 + c_{2n}e_2 + \cdots + c_{nn}e_n$$

记：

$$\begin{pmatrix} f_1 & f_2 & \cdots & f_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix} \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{bmatrix} \quad (3)$$

则上式右边的矩阵被称作基  $e_1, \dots, e_n$  到  $f_1, \dots, f_n$  的过渡矩阵。当  $V = \mathbb{R}^n$  时等式3可以转换成矩阵的形式：

$$\begin{bmatrix} f_1 & f_2 & \cdots & f_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{bmatrix}$$

而对于  $V$  上的一个元素  $u$ ，假设存在  $c_1, \dots, c_n$  满足：

$$u = c_1e_1 + c_2e_2 + \cdots + c_ne_n$$

则称  $u$  在基  $e_1, \dots, e_n$  下的坐标为  $(c_1, \dots, c_n)$ ，也用列向量  $(c_1, \dots, c_n)^T$  表示。我们有如下的定理：

### 定理 2.11

令一个线性空间  $V$  的两组基为  $\bar{e} = \{e_1, \dots, e_n\}$  和  $\bar{f} = \{f_1, \dots, f_n\}$ ， $M$  是  $\bar{e}$  到  $\bar{f}$  的过渡矩阵。则对于任意的  $u \in V$ ，令其在  $\bar{e}$  下的坐标为  $(c_1, \dots, c_n)^T$ ，在  $\bar{f}$  下的坐标为  $(d_1, \dots, d_n)^T$ ，则有：

$$\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}.$$

为了叙述清楚相似矩阵的本质，我们还需要引入线性变换在不同基下的表示。设  $V$  是一个线性空间， $T: V \rightarrow W$  是一个线性变换， $\bar{e} = \{e_1, \dots, e_n\}$  和  $\bar{f} = \{f_1, \dots, f_m\}$  是  $V$  和  $W$  上的一组基。则意味着

对对于  $i \in [n], j \in [m]$ , 存在  $a_{ij} \in \mathbb{R}$  使得:

$$T(v_1) = a_{11}w_1 + \cdots + a_{1m}w_m$$

$$T(v_2) = a_{21}w_1 + \cdots + a_{2m}w_m$$

⋮

$$T(v_n) = a_{n1}w_1 + \cdots + a_{nm}w_m$$

则称下列矩阵:

$$A_T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix}$$

为线性变换  $T$  在基  $\bar{e}$  和  $\bar{f}$  下的矩阵。特别的, 当  $V = W$  时并且  $\bar{e} = \bar{f}$  时, 称  $A_T$  是基  $\bar{e}$  下线性变换  $T$  对应的矩阵。

下列定理给出了线性变换在不同基下的矩阵与相应坐标之间的联系:

### 定理 2.12

令  $v \in V$  和  $w \in W$ 。若  $x \in \mathbb{R}^n$  是  $v$  在基  $\bar{v}$  下的坐标,  $y \in \mathbb{R}^m$  是  $T(v)$  在基  $\bar{w}$  下的坐标, 则我们有:

$$T(v) = w \iff y = A_T x$$

### 例 2.13

我们这里通过一个  $\mathbb{R}^2$  上的例子来简单介绍一下, 考虑如下的两组基:

$$e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, e_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \text{ 和 } f_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}, f_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \end{bmatrix}$$

我们分别用  $\bar{e}$  和  $\bar{f}$  来表示这两组基, 则  $\bar{e}$  到  $\bar{f}$  的过渡矩阵  $M$  满足:

$$\begin{bmatrix} f_1 & f_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 \end{bmatrix} M \implies \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} M$$

从而该过渡矩阵  $M$  为:

$$M = \left( \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -2 & 3 \end{bmatrix}$$

注意到对于  $\begin{bmatrix} 5 \\ 6 \end{bmatrix}$  有:

$$\begin{bmatrix} 5 \\ 6 \end{bmatrix} = 5e_1 + e_2 = 5f_1 + \frac{11}{3}f_2$$

即其在基  $\bar{e}$  下的坐标为  $(5, 1)$ , 在基  $\bar{f}$  下的坐标为  $(5, \frac{11}{3})$ , 并且有:

$$\begin{bmatrix} 5 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ \frac{11}{3} \end{bmatrix}$$

再考虑如下  $\mathbb{R}^2$  上的线性变换  $T$ :

$$T\bar{e}_1 = 2\bar{e}_1, T\bar{e}_2 = 3\bar{e}_2$$

则  $T$  在  $\bar{e}$  上对应的矩阵为:

$$A_T = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$$

另一方面, 注意到:

$$\begin{aligned} T\bar{f}_1 &= T(\bar{e}_1 - 2\bar{e}_2) = T\bar{e}_1 - 2T\bar{e}_2 = 2\bar{e}_1 - 6\bar{e}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ -4 \end{bmatrix} = 2\bar{f}_1 - \frac{2}{3}\bar{f}_2 \\ T\bar{f}_2 &= T(3\bar{e}_2) = 3T\bar{e}_2 = 9\bar{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 9 \end{bmatrix} = 3\bar{f}_2 \end{aligned}$$

从而  $T$  在  $\bar{f}$  上对应的矩阵为:

$$A'_T = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ -\frac{2}{3} & 3 \end{bmatrix}$$

现在回到相似矩阵, 考察如下两个矩阵:

$$Q = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}, Q' = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

由定义  $Q$  和  $Q'$  是相似的, 考虑如下两组基:

$$\bar{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \bar{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \text{ 和 } \bar{f}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \bar{f}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

给定  $\mathbf{u} = (5, 4) = 5\bar{e}_1 + 4\bar{e}_2 = 9\bar{f}_1 + 5\bar{f}_2$ , 则有:

$$Q \begin{bmatrix} 5 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 12 \end{bmatrix}, Q' \begin{bmatrix} 9 \\ 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 22 \\ 10 \end{bmatrix}$$

从而我们有:

$$[\bar{e}_1 \quad \bar{e}_2] \begin{bmatrix} 10 \\ 12 \end{bmatrix} = 10\bar{e}_1 + 12\bar{e}_2 = \begin{bmatrix} 10 \\ 12 \end{bmatrix} = 22\bar{f}_1 + 10\bar{f}_2 = [\bar{f}_1 \quad \bar{f}_2] \begin{bmatrix} 22 \\ 10 \end{bmatrix}$$

这说明, 当  $Q$  和  $Q'$  分别代表了在  $\bar{e}_1, \bar{e}_2$  和  $\bar{f}_1, \bar{f}_2$  这两组基下的线性变换的时候, 其实表示的是同一个线性变换, 即: 两个相似矩阵本质上是在不同基下的相同线性变换! 我们将其表述为如下的定理:

### 定理 2.14

令  $V$  是一个  $n$  维的向量空间， $\bar{v}$  和  $\bar{v}'$  是  $V$  的两组基。考虑  $V \rightarrow V$  的一个线性变换  $T$ ，令：

- $M$  是  $\bar{v}$  到  $\bar{v}'$  的过渡矩阵。
- $A$  是在基  $\bar{v}$  下  $T$  对应的矩阵。
- $B$  是在基  $\bar{v}'$  下  $T$  对应的矩阵。

则有：

$$B = M^{-1}AM.$$

即同一个线性变换在不同基下表示的矩阵是相似的。

### 例 2.15

在例 2.13 中，我们有：

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ -\frac{2}{3} & 3 \end{bmatrix} = \left( \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -2 & 3 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -2 & 3 \end{bmatrix},$$

即： $A'_T = M^{-1}AM$ 。