矩阵的相似对角化

Dezeming Family

2021 年 7 月 20 日

DezemingFamily 系列书和小册子因为是电子书，所以可以很方便地进行修改和重新发布。如果您获得了 DezemingFamily 的系列书，可以从我们的网站 [https://dezeming.top/] 找到最新版。对书的内容建议和出现的错误欢迎在网站留言。

20210720：完成第一版。

目录

一　相似对角化

矩阵的相似对角化就是，对于方阵 A，存在相似变换矩阵 P，使得 $P^{-1}AP = \Lambda$，Λ 是对角矩阵。

我们变换一下公式：

$$P^{-1}AP = \Lambda \tag{一.1}$$

$$AP = P\Lambda \tag{一.2}$$

设 P 的第 i 列的列向量为 P_i：

$$A\begin{bmatrix} P_1 & P_2 & ... & P_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_1 & P_2 & ... & P_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ \cdots & & & \\ & & & \lambda_n \end{bmatrix} \tag{一.3}$$

$$= \begin{bmatrix} \lambda_1 P_1 & \lambda_2 P_2 & ... & \lambda_n P_n \end{bmatrix} \tag{一.4}$$

也就是说，$AP_i = \lambda_i P_i$，现在我们可以去联想一下矩阵的特征值和特征向量了，即 λ_i 为矩阵 A 的第 i 个特征值，P_i 为对应于 λ_i 的特征向量。

P 需要是一个可逆矩阵，也就是说 A 的特征向量需要是线性无关的，即，n 阶方阵 A 与对角矩阵相似的充分必要条件是 A 有 n 个线性无关的特征向量。

我们可以知道，矩阵要想可以与对角阵相似，它的相异特征值数量不一定等于阶数，例如我们已知某个对角阵为：

$$\Lambda = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{一.5}$$

我们随便找一个可逆矩阵 P，令 $P\Lambda P^{-1} = A$，矩阵 A 的相似对角矩阵就是 Λ 了。

令 $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m$ 是矩阵 A 的互异特征值，重数分别为 $r_1, r_2, ..., r_m$，且 $\sum_{i=1}^{m} r_i = n$。A 与对角矩阵相似的充要条件为：

$$r(A - \lambda_i E) = n - r_i, \quad i = 1, 2, ..., m \tag{一.6}$$

在《矩阵与方程组的解》中，$(A - \lambda_i E)X = 0$ 的基础解系的个数为 $n - r_i$。对于 $AP_i = \lambda_i P_i$，可以得到 $(A - \lambda_i E)P_i = 0$，要想解出的 P_i 有 r_i 个线性无关的向量，也就是说要满足上面对秩的条件。

我们解出的向量 P_i 顺序不唯一，因此矩阵 A 的相似对角阵也不唯一，对于多重特征值，可选的特征向量不唯一，但对应的特征值是唯一的，所以说，当矩阵 A 确定了以后，如果不计顺序，对角阵 Λ 的对角线上的值也都是确定的。

有的矩阵可能会有复数特征值和特征向量，而我们接下来介绍的矩阵的特征值将都是实数。

二　实对称矩阵相似对角化

所谓实对称矩阵 A，其元素 $a_{i,j} = a_{j,i}$。

2 1　性质一：特征值都是实数

实对称矩阵有一个很重要的性质，即特征值都是实数，证明如下：

对于任意特征值 λ_i 对应的特征向量 α_i，首先取共轭：

$$\overline{A}\overline{\alpha}_i = \overline{\lambda}_i\overline{\alpha}_i \tag{二.1}$$

其中，$\overline{A}$ 表示对矩阵 A 的每个元素都取共轭，$\overline{\alpha}_i$ 表示对向量 α_i 的每个元素都取共轭。

因为是实对称矩阵，因此上式的两端都取转置：

$$(\overline{A}\overline{\alpha}_i)^T = (\overline{\lambda}_i\overline{\alpha}_i)^T \tag{二.2}$$

$$(A\overline{\alpha}_i)^T = (\overline{\lambda}_i\overline{\alpha}_i)^T \tag{二.3}$$

$$\overline{\alpha}_i^T A^T = \overline{\lambda}_i\overline{\alpha}_i^T \Longrightarrow \overline{\alpha}_i^T A = \overline{\lambda}_i\overline{\alpha}_i^T \tag{二.4}$$

两边同时右乘 α_i：

$$\overline{\alpha}_i^T A\alpha_i = \overline{\lambda}_i\overline{\alpha}_i^T\alpha_i \tag{二.5}$$

$$\lambda_i\overline{\alpha}_i^T\alpha_i = \overline{\lambda}_i\overline{\alpha}_i^T\alpha_i \tag{二.6}$$

因为 α_i 是非 $\mathbf{0}$ 向量，所以 $\overline{\alpha}_i^T\alpha_i \neq 0$，所以 $\overline{\lambda}_i = \lambda_i$，因此这是一个实数。

2 2　性质二：相异特征值对应特征向量正交

设 $i \neq j$，两个相异特征值 λ_i 和 λ_j 对应于特征向量 α_i 和 α_j，我们对其中一个取转置，就能推出：

$$(A\alpha_i)^T = (\lambda_i\alpha_i)^T \tag{二.7}$$

$$\alpha_i^T A^T = \lambda_i\alpha_i^T = \alpha_i^T A \tag{二.8}$$

$$\alpha_i^T A\alpha_j = \lambda_i\alpha_i^T\alpha_j \tag{二.9}$$

$$\lambda_j\alpha_i^T\alpha_j = \lambda_i\alpha_i^T\alpha_j \tag{二.10}$$

$$(\lambda_j - \lambda_i)\alpha_i^T\alpha_j = 0 \tag{二.11}$$

因为相异，所以 $\alpha_i^T\alpha_j = 0$，因此是正交的。

2 3　性质三：k 重特征值对应 k 个特征向量

对于一般矩阵，k 重特征值不一定有 k 个线性无关的特征向量（如果所有多重特征值都有对应重数的线性无关特征向量，则可以进行相似对角化），但实对称矩阵的 k 重特征值一定有 k 个线性无关的特征向量。即实对称矩阵一定可以进行相似对角化。

这个性质的证明涉及线性空间和不变子空间等一些理论知识，我会在矩阵分析中进行更详细的介绍，因此这里就不再证明了，但要注意的是这个性质非常重要！我们知道协方差矩阵（见 DezemingFamily 的《协方差与相关系数》）就是实对称矩阵，也就是说可以进行相似对角化，且相异特征值对应的特征向量相互正交。

2 4　正交相似对角化

对于 n 阶实对称矩阵，一定会有正交矩阵 Q（见 DezemingFamily 的《向量组和矩阵的正交性》），使得：

$$Q^{-1}AQ = Q^{T}AQ = \Lambda \tag{二.12}$$

令 $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m$ 是实对称矩阵 A 的互异特征值，重数分别为 $r_1, r_2, ..., r_m$，且 $\sum_{i=1}^{m} r_i = n$。对于相异特征值，它们是相互正交的；对于 t 重特征值，对应的 t 个线性无关特征向量可以转化为单位正交向量，因此它们就可以构成单位正交矩阵。

使用正交矩阵对实对称矩阵的对角化又叫正交相似对角化。

参考文献

[1] 吴臻, 刘建亚. 线性代数 [M]. 山东大学出版社, 2004.