第 21 课 特征值和特征向量

特征值与特征向量初探

给定矩阵 A ，矩阵 A 乘以向量 x，就像是使用矩阵 A 作用在向量 x上，最后得到新的向量 Ax。在这里，矩阵 A 就像是一个函数，接受一个向量 x 作为输入，给出向量 Ax 作为输出。

在这一过程中，我们对一些特殊的向量很感兴趣，也即 x 和 Ax 始终保持同一个方向，这是比较特殊的，因为在大多情况下，Ax 与 x 指向不同的方向。

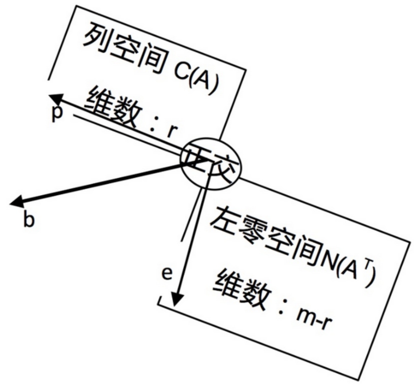
在这种特殊的情况下，Ax 平行于 x，**我们把满足这个条件的<u>非零</u>向量 x 称为 A 特征向量，而 λ 为 A 的特征值** 。这个平行条件用方程表示就是：

$$Ax = \lambda x$$

对这个式子，我们试着计算特征值为 0 的特征向量，易得 $Ax = 0x = 0$，因此，特征值为 0 的特征向量位于 A 的零空间中。

显然对于奇异矩阵（不可逆），必然存在非零向量使得 $Ax = 0$，所以**若矩阵是奇异的，那么它有一个特征值为 $\lambda = 0$。**

- 我们先来看投影矩阵 $P = A(A^TA)^{-1}A^T$ 的特征值和特征向量。



  - 用向量 b 乘以投影矩阵 P 得到投影向量 Pb，在这个过程中，只有当 b 本身已经处于投影平面（即 A 的列空间）中时，Pb 才可能与 b 是同向的，此时 b 投影前后完全相同（$Pb = 1 \cdot b$ ）。因此，**投影平面（A 的列空间）中的所有向量都是投影矩阵的特征向量，且它们的特征值为 1。**
  - 再来观察投影平面的法向量，也即向量 e 。既然向量 e 与投影平面垂直，那么必然有 $Pe = 0$，任何向量都与 0 向量是同向的。因此，**投影平面的所有法向量（A 的左零空间）也同样是投影矩阵的特征向量，且它们的特征值为 0。**

  综上可知，**投影矩阵 $P = A(A^TA)^{-1}A^T$ 的特征值为 $\lambda = 1, 0$。**

- 再看另外一个例子，二阶置换矩阵 $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$，经过这个矩阵处理的二维向量 x，其元素会互相交换，即：$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ 会变为 $\begin{bmatrix} x_2 \\ x_1 \end{bmatrix}$。若交换后的 $\begin{bmatrix} x_2 \\ x_1 \end{bmatrix}$ 是初始向量 $\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ 与一个因子的乘积，那么根据特征值和特征向量的定义可知：

  - A 有特征值为 1 的特征向量（即经过矩阵交换元素前后仍然不变），型为 $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$。
  - A 有特征值为 -1 的特征向量（即经过矩阵交换元素前后方向相反），型为 $\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$。

  就此例，我们提前说一些特征值的性质：

- **一个 $n \times n$ 的矩阵包含 n 个特征值（可能其中有一些特征值的值相同，甚至有些特征值非实数），而这些特征值的和与该矩阵对角线元素的和相同（$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i=\sum_{i=1}^{n}a_{ii}$），我们把矩阵对角线元素之和称为矩阵的迹。**

  在上面二阶转置矩阵的例子中，如果我们求得了一个特征值 1，那么利用迹的性质，我们就可以直接推出另一个特征值是 -1。这条性质我们将在本课后面给予证明。

- **对称矩阵，其特征向量互相垂直。**

  矩阵越特殊，则我们得到的特征值与特征向量也就越特殊。**看上面的二阶置换矩阵中，因为它是一个对称矩阵，所以其特征值为实数：$1,-1$，而且它们的特征向量是正交的。**

  证明：对称矩阵的特征向量正交。

$$
\begin{gathered}
\text{设 } \lambda_1 \text{ 和 } \lambda_2 \text{ 是对称矩阵 } A \text{ 的两个不同的特征值，对应的特征向量分别为 } x_1 \text{ 和 } x_2\\
\therefore Ax_1=\lambda_1x_1,\ Ax_2=\lambda_2x_2\\
\text{对 } Ax_1=\lambda_1x_1 \text{ 左乘 } x_2^T \text{ 得：} \quad x_2^TAx_1=\lambda_1x_2^Tx_1\\
x_2^TAx_1=(Ax_2)^Tx_1=(\lambda_2x_2)^Tx_1=\lambda_2x_2^Tx_1=\lambda_1x_2^Tx_1\\
\text{也即 } (\lambda_1-\lambda_2)x_2^Tx_1=0\\
\text{又 } \because \lambda_1\neq\lambda_2\\
\therefore x_2^Tx_1=0\\
\therefore \text{对称矩阵的特征向量正交。}
\end{gathered}
$$

求解特征值和特征向量：$Ax=\lambda x$

对于方程 $Ax=\lambda x$ ，有两个未知数，我们需要利用一些技巧从这一个方程中一次解出两个未知数（一个是特征值一个是特征向量），**首先移项得** $(A-\lambda I)x=0$。

观察新方程 $(A-\lambda I)x=0$，右边的矩阵 λI 相当于将 A 矩阵平移了 λ 个单位，而**如果新方程有非零解 x（因为要求特征向量不可为零向量），则这个平移后的矩阵 $(A-\lambda I)$ 一定是奇异矩阵。**

我们现在想要求的特征向量正是 $(A-\lambda I)x=0$ 的非零解 x，这就需要 $(A-\lambda I)$ 为奇异矩阵，结合行列式可得：

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

这样一来，方程中就没有 x 了，$\det(A-\lambda I)=0$ **也叫作特征方程。求解特征方程的带特征值 λ，代回 $(A-\lambda I)x=0$，继续求 $(A-\lambda I)$ 的零空间即可。**

- 举一个简单的例子，求解 $A=\begin{bmatrix}3&1\\1&3\end{bmatrix}$ 的特征值与相应的特征向量。

  首先计算 $\det(A-\lambda I)=\begin{vmatrix}3-\lambda&1\\1&3-\lambda\end{vmatrix}=0$，由二阶行列式公式可得：$(3-\lambda)^2-1=\lambda^2-6\lambda+8=0$，求得 $\lambda_1=4,\lambda_2=2$。可以看到**一次项系数 -6 和矩阵的迹 $3+3$ 有关，此外，常数项 8 与矩阵的行列式有关。至于为什么，我们将在后面给予解释。**

  继续计算特征向量，$A-4I=\begin{bmatrix}-1&1\\1&-1\end{bmatrix}$，显然矩阵是奇异的（如果是非奇异说明特征值计算有误），解出 λ_1 对应的一个特征向量 $x_1=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$；同理计算另一个特征向量，$A-2I=\begin{bmatrix}1&1\\1&1\end{bmatrix}$，解出 λ_2 对应的一个特征向量 $x_2=\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$。

  回顾前面转置矩阵的例子，对矩阵 $A'=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$ 有 $\lambda_1=1,x_1=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$,$\lambda_2=-1,x_2=\begin{bmatrix}-1\\1\end{bmatrix}$
  。

  看转置矩阵 A' 与本例中的对称矩阵 A 有什么联系。

易知 $A=A'+3I$，两个矩阵特征向量相同，而其特征值刚好相差 3。也就是**如果给一个矩阵加上 $3I$，则它的特征值会加 3，而特征向量不变。**

这一点是很容易证明的，**如果 $Ax=\lambda x$，则 $(A+3I)x=\lambda x+3x=(\lambda+3)x$，所以 x 还是原来的 x ，而 λ 变为 $\lambda+3$。**

但**假设我们加的不是 cI （c 为常数）而是其他一般的矩阵 B，那么就不能像上面这么做了。比如已知 $Ax=\lambda x, Bx=\alpha x$，那么 $(A+B)x=(\lambda+\alpha)x$ 一般是错误的。问题的关键在于：我们无法相信 A 的特征向量 x 也是 B 的特征向量，也即这两个式子中的特征向量 x 并不一定相同，所以上述两个式子的通常情况是：$Ax=\lambda x, By=\alpha y$ ，它们也就无从相加了。而若 $B=cI$，那么我们总能保证 A 的特征向量 x 也会是 B 的特征向量，因为给定任意向量 x，显然都有 $cIx=cx$，也即 B 的特征向量实际上包含了 A 的特征向量。**

对于刚刚的例子，我们已经发现一次项系数似乎和矩阵的迹存在关系，更普遍地，能注意到矩阵的特征值之和等于矩阵的迹。同时如果我们计算矩阵 A 的行列式，能发现 $\det(A)=8=\lambda_1\cdot\lambda_2$。下面我们给出两条有关矩阵特征值的性质：

- 矩阵的特征值之和等于矩阵的迹
- 矩阵的特征值之积等于矩阵的行列式

鉴于这两条性质的证明需要用到根与系数的关系，也即韦达定理，所以我们先给予韦达定理的证明。

$$\text{给定方程 } a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+a_{n-2}x^{n-2}+\cdots+a_1x+a_0=0 \quad (1)$$
$$\text{假设上述方程的有根 } x_1,x_2,\cdots,x_n\text{，那么给定方程可改写为如下形式：}$$
$$a_n(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)\cdots(x-x_n)=0 \qquad (2)$$
$$\text{根据初高中多项式展开的知识可知：}$$
$$\text{对于所有括号只取第一项 } x\text{，则有 } C_n^nx^n=x^n$$
$$\text{所以 } x_n \text{ 的系数为 } C_n^na_n=a_n\text{，与 }(1)\text{ 中相符。}$$
$$\text{同理，所有括号中我们对其中 } n-1 \text{ 个取第一项，那么 } x^{n-1} \text{ 的系数为}$$
$$-a_n(x_1+x_2+\ldots+x_n)\text{，也即 }(1)\text{ 中 } a_{n-1}=-a_n(x_1+x_2+\ldots+x_n)\text{。}$$
$$\therefore -\frac{x^{n-1}\text{的系数}}{x^n\text{的系数}}=-\frac{a_{n-1}}{a_n}=-\frac{-a_n(x_1+x_2+\ldots+x_n)}{a_n}=(x_1+\ldots+x_n)$$
$$\text{对应到一元二次方程 } ax^2+bx+c=0 \text{ 里即 } x_1+x_2=-\frac{b}{a}\text{。}$$
$$\text{同理，所有括号中我们都取第二项，那么我们将得到常数项 } (-1)^na_nx_1x_2\ldots x_n$$
$$\text{也即 }(1)\text{ 中 } a_0=(-1)^na_nx_1x_2\ldots x_n\text{。}$$
$$\therefore \frac{\text{常数项}}{x^n\text{的系数}}=\frac{a_0}{a_n}=\frac{(-1)^na_nx_1x_2\ldots x_n}{a_n}=(-1)^nx_1x_2\ldots x_n$$
$$\therefore (-1)^n\frac{\text{常数项}}{x^n\text{的系数}}=x_1x_2\ldots x_n$$
$$\text{对应到一元二次方程 } ax^2+bx+c=0 \text{ 里也即 } x_1x_2=(-1)^2\frac{c}{a}=\frac{c}{a}$$

- **矩阵的特征值之和等于矩阵的迹：**$\sum_{i=1}^n\lambda_i=\sum_{i=1}^na_{ii}$

证明：设 $A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$，则

$$\det(A-\lambda I)=\begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33}-\lambda & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn}-\lambda \end{vmatrix}$$

按行列式的定义可以将其展开成 $n!$ 项非零行列式相加的形式

除了 $(a_{11}-\lambda)(a_{22}-\lambda)\cdots(a_{nn}-\lambda)$ 项含有所有 $(a_{11}-\lambda),(a_{22}-\lambda),\cdots,(a_{nn}-\lambda)$

的 n 个因子外，其他项最多仅含 $(a_{11}-\lambda)(a_{22}-\lambda)\ldots(a_{nn}-\lambda)$ 这些因子中的 $n-2$ 个

比如 $a_{12}a_{21}(a_{33}-\lambda)\ldots(a_{nn}-\lambda)$。

$\therefore \lambda^n$ 和 λ^{n-1}只可能来自包含所有因子的 $(a_{11}-\lambda)(a_{22}-\lambda)\ldots(a_{nn}-\lambda)$ 项

$$\therefore \det(A-\lambda I)=(a_{11}-\lambda)(a_{22}-\lambda)\cdots(a_{nn}-\lambda)+\cdots$$

$$=(-1)^n\lambda^n+(-1)^{n-1}(a_{11}+a_{22}+\cdots+a_{nn})\lambda^{n-1}+\cdots$$

于是 可知 $\det(A-\lambda I)$ 的 λ^{n-1} 的系数为 $(-1)^{n-1}(a_{11}+a_{22}+\ldots+a_{nn})$

令 $\det(A-\lambda I)=0$ 可得特征方程，根据根与系数关系可知：

$$\text{特征值之和}=\text{特征方程的根之和}=-\frac{\lambda^{n-1}\text{项的系数}}{\lambda^n\text{项的系数}}$$

综上，$\lambda_1+\lambda_2+\ldots+\lambda_n(\text{特征值之和})=(a_{11}+a_{22}+\ldots+a_{nn})$

- **矩阵的特征值之积等于矩阵的行列式：** $\prod_{i=1}^n\lambda_i=\det(A)$

证明：设 $A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$，则

$$\det(A-\lambda I)=\begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33}-\lambda & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn}-\lambda \end{vmatrix}$$

按行列式的定义可以将其展开成 $n!$ 项非零行列式相加的形式

这 $n!$ 项中必然存在不包含任何诸如 $(a_{11}-\lambda),(a_{22}-\lambda),\cdots,(a_{nn}-\lambda)$的因子的非零行列式

这样的行列式自然也就不包括 λ 项。

$$\det(A-\lambda I)=\underbrace{(a_{11}-\lambda)(a_{22}-\lambda)\cdots(a_{nn}-\lambda)}_{(-1)^n\lambda^n+(-1)^{n-1}(a_{11}+a_{22}+\ldots+a_{nn})\lambda^{n-1}}+\underbrace{(\cdots)}_{\text{其他项,包含 }\lambda^{n-2}\text{ 到 }\lambda\text{ 的项}}+\underbrace{(C)}_{\text{常数项,不包含任何 }\lambda\text{ 项}}$$

于是可知 λ^n 的系数为 $(-1)^n$，令 $\lambda=0$，则有 $\det(A)=C$。

令 $\det(A-\lambda I)=0$ 可得特征方程，根据根与系数的关系可知：

$$\text{特征值之积}=\text{特征方程的根之积}=(-1)^n\frac{\text{常数项}}{\lambda^n\text{项的系数}}$$

也即 $\lambda_1\lambda_2\ldots\lambda_3(\text{特征值之积})=\det(A)$

- 我们再来看旋转矩阵的例子，旋转 90° 的矩阵 $Q=\begin{bmatrix}\cos 90^\circ & -\sin 90^\circ\\ \sin 90^\circ & \cos 90^\circ\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$（作用到向量上能将向量旋转 90°，用 Q 表示旋转矩阵是因为**旋转矩阵是正交矩阵中相当重要的例子**）。

  根据上面提到特征值的两个性质：特征值之和等于矩阵的迹，特征值之积等于矩阵的行列式，则对于 Q 矩阵，有 $\begin{cases}\lambda_1+\lambda_2 & =0\\ \lambda_1\cdot\lambda_2 & =1\end{cases}$，再来思考特征值与特征向量的由来，哪些非向量旋转 90° 后与自己平行，于是就遇到了麻烦，我们发现，似乎不存在非零向量旋转 90° 能与旋转前的自己同向，同时似乎也不存在特征值来满足前面的方程组（λ_1 与 λ_2 异号但其相乘结果却为正数）。

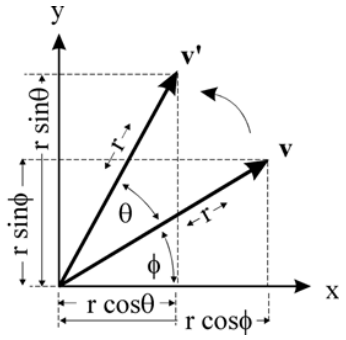
  由 $\det(Q-\lambda I)=\begin{vmatrix}\lambda & -1\\ 1 & \lambda\end{vmatrix}=\lambda^2+1=0$ 可得特征值为 $\lambda_1=i,\lambda_2=-i$。这两个特征值显然满足 $\begin{cases}\lambda_1+\lambda_2 & =0\\ \lambda_1\cdot\lambda_2 & =1\end{cases}$，但这两个特征值并不是实数。我们发现，**即使矩阵全是实数，其特征值也可能不是实数，本例中的实数矩阵其特征值就为一对共轭复数。**

  实际上，**如果矩阵是对称的或者说接近对称的，那么特征值一般就是实数。如果越不对称，就像上面旋转矩阵的例子，$Q^T=-Q$，这说明旋转矩阵是一个反对称的矩阵，这样的矩阵，其特征值往往就是纯虚数。**

  实数特征值让特征向量伸缩而虚数让其旋转。

  到现在为止我们看到，对于好的矩阵（最上面提到的置换矩阵）有实特征值及正交的特征向量，对于不好的矩阵（90° 旋转矩阵）有纯虚的特征值。

  上面我们提到了旋转矩阵，下面将就二维情况进行推导

  如图所示点 v 绕原点旋转 θ 角，得到点 v'，假设 v 点的坐标是 (x,y)，那么可以推导得到 v' 的坐标 (x',y')

  $$\text{首先假设原点到 } v \text{ 的距离是 } r\text{，} v \text{ 点对应的向量与 } x \text{ 轴的夹角是 } \phi\text{，那么：}$$
  $$x=r\cos\phi\quad y=r\sin\phi$$
  $$x'=r\cos(\theta+\phi)\quad y'=r\sin(\theta+\phi)$$
  $$\text{通过三角函数展开易得：}$$
  $$x'=r\cos\theta\cos\phi-r\sin\theta\sin\phi$$
  $$y'=r\sin\theta\cos\phi+r\cos\theta\sin\phi$$
  $$\text{用 } x \text{ 和 } y \text{ 进行替换有：}$$
  $$x'=x\cos\theta-y\sin\theta$$
  $$y'=x\sin\theta+y\cos\theta$$

- 再来看一个更糟的情况，$A=\begin{bmatrix}3 & 1\\ 0 & 3\end{bmatrix}$。

  这是一个三角矩阵，对于这样的矩阵我们可以直接得出其特征值，即矩阵对角线上的元素。
  $\det(A-\lambda I)=\begin{vmatrix}3-\lambda & 1\\ 0 & 3-\lambda\end{vmatrix}=(3-\lambda)^2=0$，于是 $\lambda_1=3,\lambda_2=3$。特征值为实数，看上去似乎很好，但实际上这是非常糟糕的情况，这体现在特征向量上。

代入特征值计算特征向量：代入 $\lambda_1 = 3$ 得 $(A-\lambda I)x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$，算出 $x_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$。而当我们把第二个特征值 $\lambda_2 = 3$ 代入时，等式和之前是一样的，又得到相同的向量。于是，我们根本无法找到另外一个与 x_1 线性无关的特征向量了。

本例中的矩阵是一个退化矩阵，我们只能找到一个方向上的特征向量而不是两个。对于一个退化矩阵，重复的特征值在特殊情况下可能导致特征向量的短缺。