设 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $\boldsymbol{n}$ 阶可对角化的矩阵，特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 与其相对应的特征向量分别为 $\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_n$，如果记

$$\boldsymbol{P}=\left[\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n\right]$$

那么

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n\end{bmatrix}\boldsymbol{P}^{-1}$$

$$=[\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n]\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\beta_1{}^T \\ \beta_2{}^T \\ \vdots \\ \beta_n{}^T\end{bmatrix}$$

$$=\lambda_1\alpha_1\beta_1{}^T+\lambda_2\alpha_2\beta_2{}^T+\cdots+\lambda_n\alpha_n\beta_n{}^T$$

其中

$$\boldsymbol{P}^{-1}=\begin{bmatrix}\beta_1{}^T \\ \beta_2{}^T \\ \vdots \\ \beta_n{}^T\end{bmatrix}$$

可对角化矩阵的谱分解步骤：

（1）首先求出矩阵 A 的全部互异特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_r$ 及每个特征值 λ_i 所决定的线性无关的特征向量 $\alpha_{i1},\alpha_{i2},\cdots,\alpha_{in_i}$

$$P=\left[\alpha_{11},\ldots\alpha_{1n_1},\alpha_{21},\ldots\alpha_{2n_2},\ldots\alpha_{r1},\ldots,\alpha_{rn_r}\right]$$

（2）写出

$$(P^{-1})^T=\left[\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_n\right]$$

（3）令 $\boxed{G_i = \alpha_{i1}\beta_{i1}^T + \alpha_{i2}\beta_{i2}^T + \cdots + \alpha_{in_i}\beta_{in_i}^T}$

（4）最后写出

$$A = \lambda_1 G_1 + \lambda_2 G_2 + \cdots + \lambda_r G_r$$

例：已知矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 6 & 0 \\ -3 & -5 & 0 \\ -3 & -6 & 0 \end{bmatrix}$$

为一个可对角化矩阵，求其谱分解表达式.

解: 首先求出矩阵 A 的特征值与特征向量. 容易计算

$$|\lambda I - A| = (\lambda - 1)^2(\lambda + 2)$$

从而 A 的特征值为 $\lambda_1 = \lambda_2 = 1, \lambda_3 = -2$.

再求出分别属于这三个特征值的三个线性无关的特征向量

$$\alpha_1 = [2,-1,0]^T, \alpha_2 = [0,0,1]^T, \alpha_3 = [-1,1,1]^T$$

于是

$$P=\left[\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3\right]=\begin{bmatrix}2&0&-1\\-1&0&1\\0&1&1\end{bmatrix},\quad P^{-1}=\left[\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3\right]^{-1}=\begin{bmatrix}1&1&0\\-1&-2&1\\1&2&0\end{bmatrix},\quad (P^{-1})^T=\begin{bmatrix}1&-1&1\\1&-2&2\\0&1&0\end{bmatrix}$$

取

$$\beta_1=[1,1,0]^T,\beta_2=[-1,-2,1]^T,\beta_3=[1,2,0]^T$$

令

$$G_1=\alpha_1\beta_1^T+\alpha_2\beta_2^T=\begin{bmatrix}2&2&0\\-1&-1&0\\-1&-2&1\end{bmatrix},\quad G_2=\alpha_3\beta_3^T=\begin{bmatrix}-1&-2&0\\1&2&0\\1&2&0\end{bmatrix}$$

那么其谱分解表达式为 $A=G_1-2G_2$.