



机器学习的线性代数基础与Python增强理解

王星

WANGXING@RUC.EDU.CN

参考

[HTTPS://BLOG.CSDN.NET/BRYANT MENG/ARTICLE/DETAILS/99010621](https://blog.csdn.net/BRYANT MENG/ARTICLE/DETAILS/99010621)

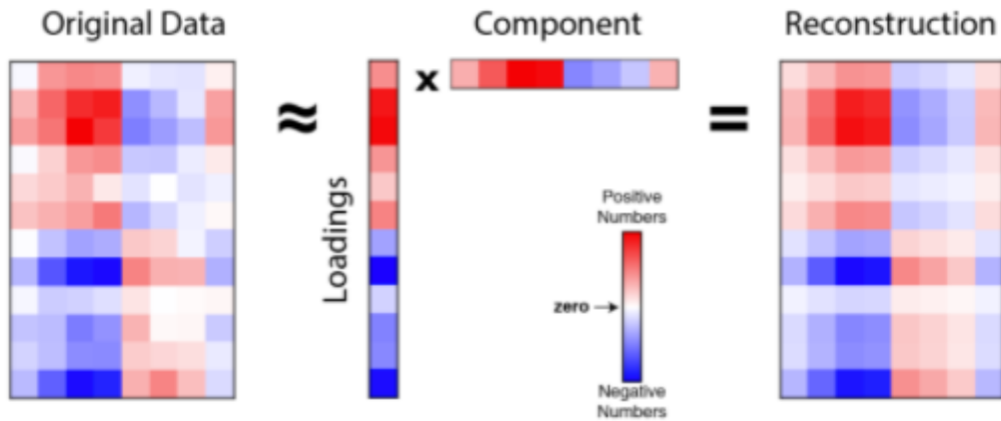
[HTTPS://ZHUANLAN.ZHIHU.COM/P/327042762](https://zhuanlan.zhihu.com/p/327042762)

[HTTPS://GITHUB.COM/MACROANALYST/LINEAR_ALGEBRA_WITH_PYTHON/BLOB/MASTER/CHAPTER%20%20-%20BASIC%20MATRIX%20ALGEBRA.IPYNB](https://github.com/MACROANALYST/LINEAR_ALGEBRA_WITH_PYTHON/blob/master/CHAPTER%20%20-%20BASIC%20MATRIX%20ALGEBRA.IPYNB)

线性代数----矩阵家族

1. 基本符号和基本概念---内积和外积
2. 矩阵的乘法和线性方程组的求解---2个视角4个空间：行视角和列视角，零空间和左零空间)
3. 矩阵的运算和性质
 - 转置(transpose)、对称矩阵(symmetric)、迹(trace)、范数(norm)
 - 行列式(deterministic)
 - 二次型和正定矩阵(Definite)
 - ✓ 特征值和特征向量(eigen,eigenvector)
 - 对称矩阵的特征值和特征向量
4. 可视化

1.内积和外积



内积

最常见的"教科书式"的矩阵乘法，可以看成2个向量的点积：

$$c_1 = [a_1 \quad a_2 \quad a_3] \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^3 a_i b_i$$

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ a_4 & a_5 & a_6 \\ a_7 & a_8 & a_9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & b_3 \\ b_4 & b_5 & b_6 \\ b_7 & b_8 & b_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & c_3 \\ c_4 & c_5 & c_6 \\ c_7 & c_8 & c_9 \end{bmatrix}$$

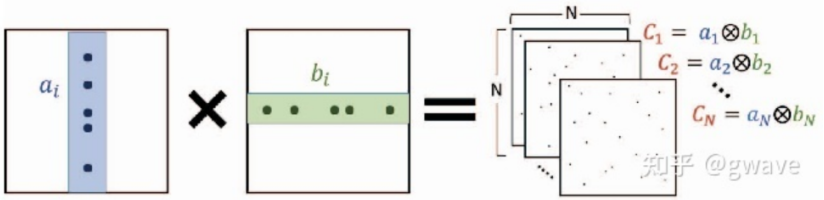
知乎 @gwave

外积

矩阵乘法也可看成是向量外积之和。

$$u_{[m \times 1]} v_{[1 \times n]} = b_{[m \times n]}$$

$$uv^T = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 4 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 8 & 10 \\ 6 & 8 & 10 \\ 3 & 4 & 5 \end{bmatrix}$$



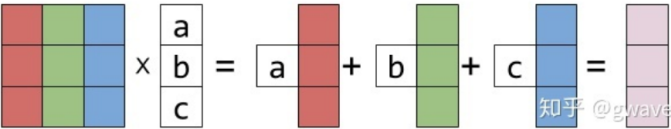
uv^T 的列空间是1维的，向量方向都与 u 相同；行空间也是类似的，向量方向都与 v^T 相同。所有非零 uv^T 都是秩1矩阵，它们是构建任何矩阵的完美基础砖块。上图体现了：矩阵乘法可以看成是 n 个秩1矩阵叠加之和。

2.1列空间

这种**以行为主的内积运算**(也称点积)，将左矩阵($m \times n$)第1行和右矩阵($n \times p$)第1列 (上例是向量，可视为1列的矩阵， $p = 1$) 进行点积，进行 n 次乘法和 $n - 1$ 次加法才得到结果矩阵的第1行第1列元素 a_{11} : $(2, 3) \cdot (x_1, x_2) = 2x_1 + 3x_2$ ，这种计算方式颗粒度太细，适合机器运算，却不利于理解；我们应该拥有更高维度更清晰的视角 —— **列向量**：

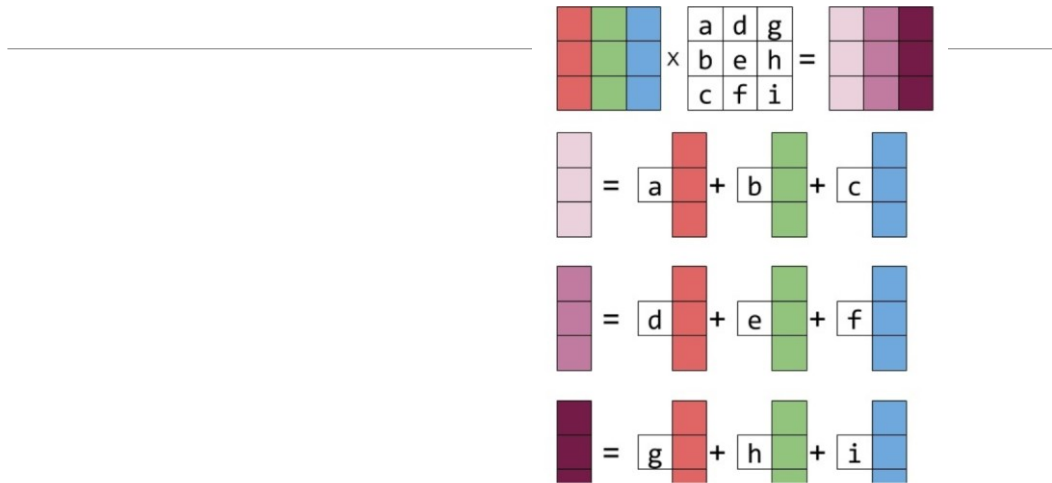
$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 4 \\ 3 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x_1 \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 7 \end{bmatrix}$$

以列为主的视角将矩阵乘法视为**对矩阵的列向量进行线性组合**，这是线性代数非常重要的本质和基础，并很自然地引出了**列空间**的概念。



矩阵乘法-列视角：列向量对矩阵进行线性组合，得到结果矩阵中的一列

扩展到矩阵的乘法



我们知道：两条相交的直线确定一个平面。 x_1, x_2 为任意实数， $x_1 \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 7 \end{bmatrix}$ 能组合出一个2维平面空间内的任何向量，该平面只是3维空间 R^3 中无数平面中的一个（子空间），但对于位于该平面内的任意向量 $b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$ ，一定存在 (x_1, x_2) ，能使得

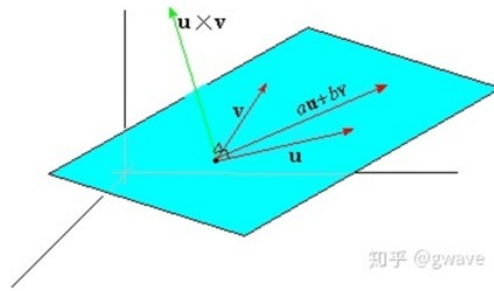
$$x_1 \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 7 \end{bmatrix} = b, \text{ 该平面是这两个向量所张成 (Span) 的列空间 (Column}$$

Space)，这两个向量是列空间的基 (Basis)，通过对基的线性组合，可以得到空间内的任意向量，难怪有人说线代是“搞基”。

基的选择可以很任性，只要不平行就行，俗称线性无关，要尽量选择垂直的，称为正交基，最好还要是长度为1的单位向量。一旦两个向量平行了，其中任一向量是另一向量的倍数，没有贡献新的信息量，两个向量线性相关，选基时与一个向量没有区别。

列空间由矩阵 A 的列向量线性组合 (Linear Combination) 填充而成, 记为 $C(A)$ 。

线性代数的初心和核心是求解 $Ax = b$, A 是 $m \times n$ 的矩阵, 以列向量表示: $[a_1, a_2]$
 —, x 和 b 分别是 $n \times 1$ 和 $m \times 1$ 的向量, b 位于 A 的列空间时, x 一定存在解
 — (x_1, x_2) 将 b 表达为 A 的列向量线性组合 $x_1 a_1 + x_2 a_2$ 。



u, v 通过线性组合张成的空间

考虑 $m \times n$ 的矩阵 A , 它的列为 $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$, 列空间:

$$C(A) = \{ \vec{b} \mid \vec{b} = A\vec{x}, \vec{x} \in \mathbb{R}^n \}$$

$$= \{ \vec{b} \mid \vec{b} = x_1 \vec{a}_1 + \dots + x_n \vec{a}_n, \vec{x} \in \mathbb{R}^n \}$$

$$= \text{Span}(\{ \vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n \})$$

$$\subset \mathbb{R}^m$$

2.2 行空间

- 矩阵右乘列向量，向量对矩阵的列进行线性组合，结果向量位于矩阵的列空间 $C(A)$ ；
- 矩阵左乘行向量，向量对矩阵的行进行线性组合，结果向量位于矩阵的行空间 $C(A^T)$ 。

$$\begin{bmatrix} \text{red} & \text{green} & \text{blue} \\ \text{red} & \text{green} & \text{blue} \\ \text{red} & \text{green} & \text{blue} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} \text{red} \\ \text{red} \\ \text{red} \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} \text{green} \\ \text{green} \\ \text{green} \end{bmatrix} + c \begin{bmatrix} \text{blue} \\ \text{blue} \\ \text{blue} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{pink} \\ \text{pink} \\ \text{pink} \end{bmatrix}$$

矩阵-向量乘法-列视角：矩阵右乘列向量，向量对矩阵的列进行线性组合

$$\begin{bmatrix} a & b & c \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \text{red} & \text{red} & \text{red} \\ \text{green} & \text{green} & \text{green} \\ \text{blue} & \text{blue} & \text{blue} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & \text{red} & \text{red} & \text{red} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b & \text{green} & \text{green} & \text{green} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c & \text{blue} & \text{blue} & \text{blue} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{pink} & \text{pink} & \text{pink} \end{bmatrix}$$

扩展到一般的矩阵

$$\begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \text{red} \\ \text{green} \\ \text{blue} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{pink} \\ \text{purple} \\ \text{dark purple} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \text{pink} \\ \text{purple} \\ \text{dark purple} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & \text{red} & \text{red} & \text{red} \\ b & \text{green} & \text{green} & \text{green} \\ c & \text{blue} & \text{blue} & \text{blue} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d & \text{red} & \text{red} & \text{red} \\ e & \text{green} & \text{green} & \text{green} \\ f & \text{blue} & \text{blue} & \text{blue} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} g & \text{red} & \text{red} & \text{red} \\ h & \text{green} & \text{green} & \text{green} \\ i & \text{blue} & \text{blue} & \text{blue} \end{bmatrix}$$

最后，总结一下以列视角和行视角的矩阵乘法：共同点都是以向量对矩阵的向量进行线性组合，不同点在于：列视角是右乘向量，行视角是左乘向量。

$$\begin{array}{c}
 \begin{bmatrix} | & | & \dots & | \\ a_1 & a_2 & \dots & a_n \\ | & | & \dots & | \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} | \\ b_j \\ | \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} | \\ c_j \\ | \end{bmatrix} = A \times \begin{bmatrix} | \\ b_j \\ | \end{bmatrix} \\
 \\
 \begin{bmatrix} \text{|||||} \\ \text{|||||} \\ \text{|||||} \\ \text{|||||} \\ \text{|||||} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} | \\ | \\ | \\ | \\ | \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} | \\ | \\ | \\ | \\ | \end{bmatrix} \\
 \\
 A \quad \times \quad B \quad = \quad C \\
 m \times n \quad n \times p \quad m \times p
 \end{array}$$

$$\begin{array}{c}
 \begin{bmatrix} - & a_i & - \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} -b_1- \\ -b_2- \\ \dots \\ -b_n- \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} - & c_i & - \end{bmatrix} \\
 \\
 \begin{bmatrix} \text{-----} \\ \text{-----} \\ \text{-----} \\ \text{-----} \\ \text{-----} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \text{-----} \\ \text{-----} \\ \text{-----} \\ \text{-----} \\ \text{-----} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{-----} \\ \text{-----} \\ \text{-----} \\ \text{-----} \\ \text{-----} \end{bmatrix} \\
 \\
 A \quad \times \quad B \quad = \quad C \\
 m \times n \quad n \times p \quad m \times p
 \end{array}$$

2.3 零空间

与行空间紧密相关的空间——**零空间**(Null Space, 也称线性映射的Kernel), 但不同于行空间/列空间的关注是 $Ax = b$ 中的 b , 零空间 $N(A)$ 关注的是 x 的空间, 该空间中的任何向量都是**齐次线性方程组**(Homogeneous linear equations) $Ax = 0$ 的解, 而这与线性代数的核心问题 $Ax = b$ 的求解密切相关。

这里不得不吐槽一下**齐次线性方程组**术语的翻译, Homogeneous的含义是‘同种类的’, 同种类的含义不仅是‘齐次’, 而且更重要的**方程等号右侧 (RHS) 都等于0!** 教科书的例子大多都是‘齐次’的, 在术语中强调齐次意义不大, 齐次**没有**体现出RHS**等于0**的重要特点。

看一个 $Ax = 0$ 的零空间的例子:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$C \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad C \text{ 是常数。还有一个平凡解 } \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -0 \end{bmatrix}, \text{ 可以认为是 } C = 0 \text{ 的情况。}$$

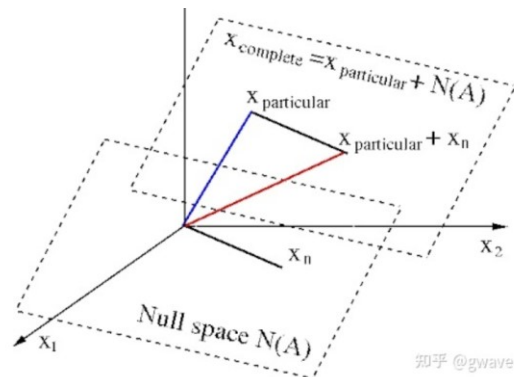
零空间在求解**非齐次线性方程组 (Non-homogeneous systems of linear equations)**

$Ax = b$ 中起到重要作用, 假设 u 和 v 是非齐次线性方程组 $Ax = b$ 的两个解, 那么:

$A(u - v) = Au - Av = b - b = 0$, 即 $(u - v)$ 位于 A 的零空间中。因此,

$Ax = b$ 完整的解 $X_{complete}$ 可以表述为两部分之和 $(v + z)$, v 是使 $Ax = b$ 成立的任意解, 称为特解 ($X_{particular}$), z 是 $Ax = 0$ 的零空间 $N(A)$ 。用几何语言来表述:

$Ax = b$ 的解是在特解 v 的基础上平移 A 的零空间。



最后，我们将上面的例子完整的计算下零空间，以展示完整过程，以及与行空间的关系。

• 考虑矩阵: $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 5 \end{bmatrix}$

• 该矩阵的零空间 $N(A)$ 包括所有向量 $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$, 使得:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

• 以线性方程组的形式来表示:

$$\begin{cases} x + y + 2z = 0 \\ x + 2y + 3z = 0 \\ x + 3y + 4z = 0 \\ x + 4y + 5z = 0 \end{cases}$$

• 以增广矩阵来表示:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 2 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 0 \\ 1 & 3 & 4 & 0 \\ 1 & 4 & 5 & 0 \end{array} \right)$$

• 高斯-乔丹消元法 (Gauss-Jordan elimination) 将方程组约减为RREF(Reduced Row Echelon Form, 约减的行阶梯形式):

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

• 重写方程组

$$\begin{cases} x = -z \\ y = -z \end{cases}$$

• 令 $z = 1$,得到零空间,

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = c \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} \text{ where } c \in \mathbb{R}$$

2.4 左零空间

A 右乘 x 即 $Ax = 0$ 得到了零空间, 那么让 A 左乘 x^T , 使 $x^T A = 0^T$, 会得到什么呢?

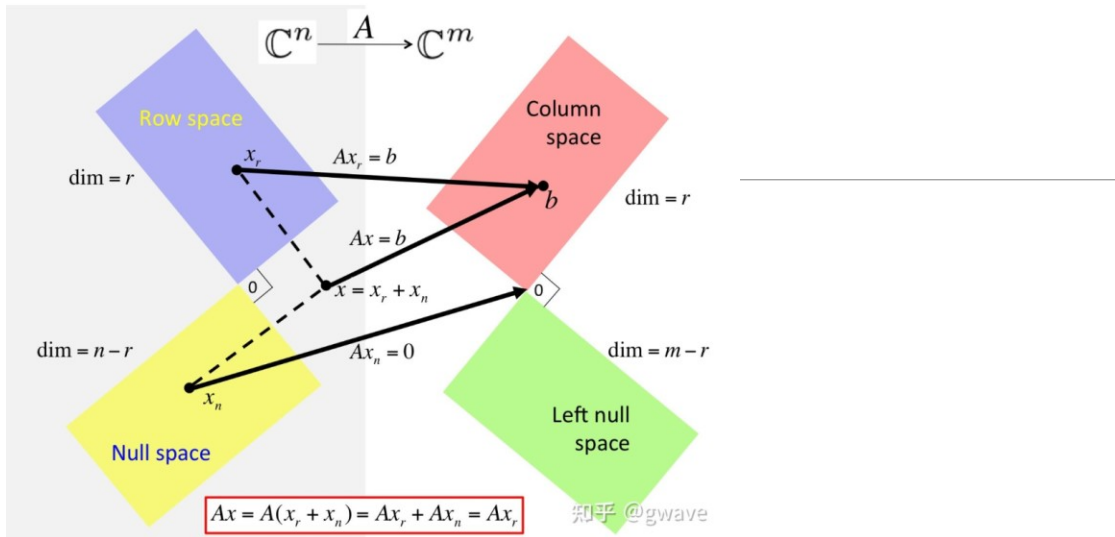
对! 你没猜错: **左零空间**(Left Null Space)!

之前提到, 行空间没有属于自己的符号^[1], 只能使用列空间的符号加转置 $C(A^T)$ 来表示; 而 $x^T A = 0^T$ 中的 x^T 不仅没有属于自己的符号, 甚至连像样的名字的都没有, 被嫌弃地称为**左零空间**, 已经卑微到不仅没有大名 $N(A^T)$, 就连小名也起的很随意, 只是在别人名字前加了个“左”, 这和“二狗”有什么差别? 难道左零是沦落天涯的二等公民, 不配拥有自己的名字? ?



- 左边 n 维空间, 由于 A 是 n 列的, 故 A 的行向量和 x 向量都是 n 维, 行空间 $C(A^T)$ 与零空间 $N(A)$ 这两个空间也都位于 \mathbb{R}^n 维空间中; 两者正交: $C(A^T) \perp N(A)$ 。
- 右边 m 维空间, 由于 A 是 m 行的, 故 A 的列向量和 x^T 向量都是 m 维, 列空间 $C(A)$ 与左零空间 $N(A^T)$ 这两个空间也都位于 \mathbb{R}^m 维空间中; 两者正交: $C(A) \perp N(A^T)$ 。
- $Ax = b$ 的解等于特解 x_r + 零空间 x_n 。

零空间也被称为线性映射的核(**kernel of Linear Map**), 简称Kernal或Ker; 相应的, 左零空间被称为Cokernel, 或者Coker^[2]。列空间也被称为Picture, 类似的, 行空间则为Co-Picture; 还有Variance和Co-Variance。



考虑 $Ax = 0$ ，行空间与零空间正交： $C(A^T) \perp N(A)$ ；同样的，因 $x^T A = 0^T$ ，左零空间与列空间正交： $C(A) \perp N(A^T)$ 。于是，这四个子空间构成了线性代数的 Big Picture，

$Ax = 0$ 可以看成是 A 的 m 个行向量与 x 点积的结果等于0，这意味所有的行向量与 x 都是正交的，即：**行空间与零空间正交**： $C(A^T) \perp N(A)$ 。（题图所示）

零空间在求解**非齐次线性方程组**（Non-homogeneous systems of linear equations）

$Ax = b$ 中起到重要作用，假设 u 和 v 是非齐次线性方程组 $Ax = b$ 的两个解，那么：

$A(u - v) = Au - Av = b - b = 0$ ，即 $(u - v)$ 位于 A 的零空间中。因此，

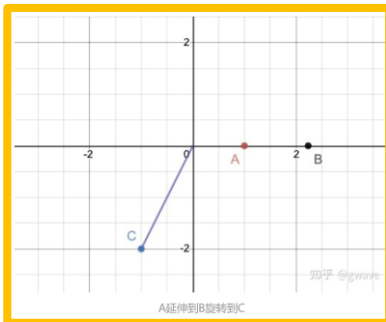
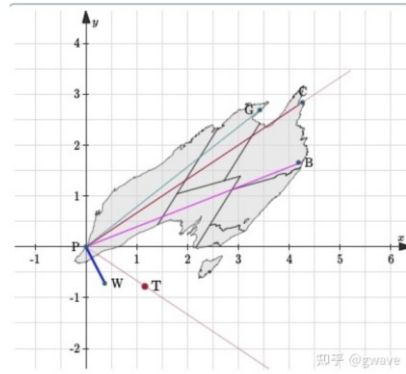
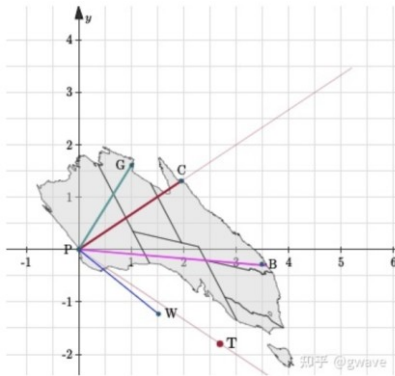
$Ax = b$ 完整的解 $X_{complete}$ 可以表述为两部分之和 $(v + z)$ ， v 是使 $Ax = b$ 成立的任意解，称为特解（ $X_{particular}$ ）， z 是 $Ax = 0$ 的零空间 $N(A)$ 。用几何语言来表述：

$Ax = b$ 的解是在特解 v 的基础上平移 A 的零空间。

$m \times n$ 的矩阵的左乘与右乘，以及4个核心的子空间。

	Ax (m维空间)	$x^T A / A^T y$ (n维空间)
b	列空间 $C(A)$	行空间 $C(A')$
x	左零空间 $N(A')$	零空间 $N(A)$

3.特征根和特征空间的几何意义



矩阵乘法的作用是线性变换(Linear Transformation), 将一个向量变换为另一个向量, 效果与函数相同: 输入向量 x , 输出向量 Ax , 即 $f(x) = Ax$, 或 $f: x \rightarrow Ax$, 比如:

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 4 \\ -2 & 5 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad Ax = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix} \quad (\text{了解列向量的同学看一眼便知, 对列向量})$$

$$\text{线性组合: } Ax = \begin{bmatrix} -1 & 4 \\ -2 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix} \cdot 1 + \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix} \cdot 0 = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix}, \quad \text{从函数的角度}$$

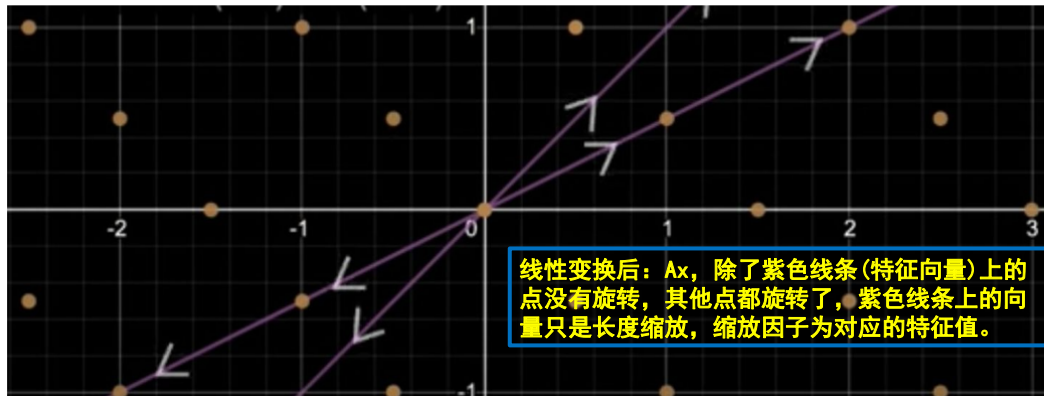
$$\text{看: } f(x) = f\left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix}.$$

从几何的角度来看, 此过程可分解为2步:

1. 缩放: 从A $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 延伸到B $\begin{bmatrix} \sqrt{5} \\ 0 \end{bmatrix}$
2. 旋转: 从B $\begin{bmatrix} \sqrt{5} \\ 0 \end{bmatrix}$ 旋转到C $\begin{bmatrix} -1 \\ -2 \end{bmatrix}$

是否存在矩阵乘法后，只长度缩放，不旋转的点呢？这里的点和向量是同义词。

平面内，除了2条直线上的点没有旋转之外(仅长度缩放)，所有其他点都是既缩放又旋转(不考虑原点)。这两条直线对应的就是**特征向量**，缩放比例就是**特征值**。



计算 A 的特征值和特征向量：

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 4 \\ -2 & 5 \end{bmatrix}, \text{ 令行列式 } |\lambda I - A| = 0, \quad I \text{ 是单位矩阵:}$$

$$|\lambda I - A| = \begin{vmatrix} \lambda + 1 & 4 \\ -2 & \lambda - 5 \end{vmatrix} = \lambda^2 - 4\lambda + 3 = 0, \quad \lambda_1 = 1; \quad \lambda_2 = 3$$

斜率较小的那条线的 $\lambda = 1$ ，说明此线上的向量长度没有改变；另一条直线对应的 $\lambda = 3$ ，说明它的每个向量的长度延伸3倍。

接下来求特征向量：

$$\lambda = 1 \text{ 时, 令 } (\lambda I - A)x = 0$$

$$\lambda I - A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -1 & 4 \\ -2 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & -4 \\ 2 & -4 \end{bmatrix} = 2 \cdot \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -2 \end{bmatrix}$$

$$\text{令 } (\lambda I - A)x = 0, \quad x = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}, \text{ 对应斜率较小的直线, 线上所有向量长度没有变化。}$$

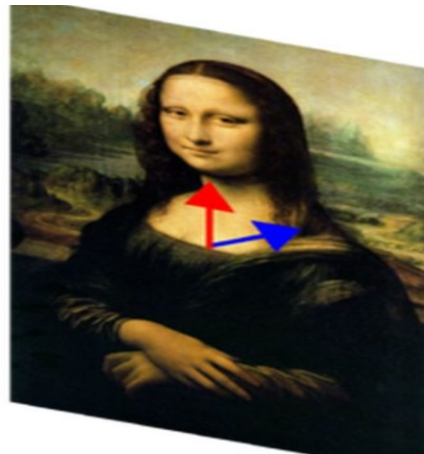
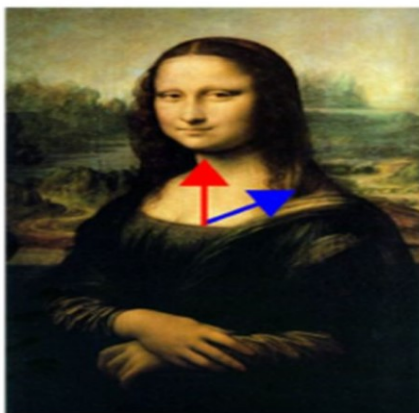
令 $(\lambda I - A)x = 0$, $x = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$, 对应斜率较小的直线, 线上所有向量长度没有变化。

$\lambda = 3$ 时, 令 $(\lambda I - A)x = 0$

$$\lambda I - A = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -1 & 4 \\ -2 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & -4 \\ 2 & -2 \end{bmatrix} = 2 \cdot \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

令 $(\lambda I - A)x = 0$, $x = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$, 对应斜率较大的直线, 线上所有向量长度放大3倍。

P.S. 令 $|\lambda I - A| = 0$ 的原因是基于特征向量和特征值的定义 $Ax = \lambda x$, 移项后求解零空间所致。



定理 1 实对称矩阵的特征多项式在复数域中的每一个根都是实数.

证明 设 A 是 n 级实对称矩阵. 设 λ_0 是 A 的特征多项式 $|\lambda I - A|$ 在复数域中的任意一个根, 于是 $|\lambda_0 I - A| = 0$. 从而齐次线性方程组 $(\lambda_0 I - A)X = 0$ 有非零解. 取它的一个非零解

$$\alpha = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}.$$

则 $(\lambda_0 I - A)\alpha = 0$. 从而

$$A\alpha = \lambda_0 \alpha. \quad (5)$$

想证 $\bar{\lambda}_0 = \lambda_0$, 于是在 (5) 式两边取复数共轭, 得

$$\bar{A}\bar{\alpha} = \bar{\lambda}_0 \bar{\alpha}, \quad (6)$$

由于 A 是实矩阵, 因此 $\bar{A} = A$. 从而 (6) 式也就是

$$A\bar{\alpha} = \bar{\lambda}_0 \bar{\alpha}. \quad (7)$$

(7) 式两边左乘 α' , 得

$$\alpha' A \bar{\alpha} = \bar{\lambda}_0 \alpha' \bar{\alpha}. \quad (8)$$

由于 A 是对称矩阵, 因此 $A' = A$. 在 (5) 式两边取转置, 然后用 $\bar{\alpha}$ 右乘, 得

$$\alpha' A \alpha = \lambda_0 \alpha' \alpha. \quad (9)$$

比较 (8)、(9) 两式, 得

$$\bar{\lambda}_0 \alpha' \bar{\alpha} = \lambda_0 \alpha' \bar{\alpha}.$$

即

$$(\bar{\lambda}_0 - \lambda_0) \alpha' \bar{\alpha} = 0. \quad (10)$$

由于 $\alpha \neq 0$, 因此

$$\begin{aligned} \alpha' \bar{\alpha} &= c_1 \bar{c}_1 + c_2 \bar{c}_2 + \cdots + c_n \bar{c}_n \\ &= |c_1|^2 + |c_2|^2 + \cdots + |c_n|^2 \neq 0. \end{aligned}$$

于是从 (10) 式得, $\bar{\lambda}_0 - \lambda_0 = 0$. 即 $\bar{\lambda}_0 = \lambda_0$. 因此 λ_0 是实数. ■

定理 2 实对称矩阵 A 的属于不同特征值的特征向量是正交的.

证明 设 λ_1 与 λ_2 是 A 的不同特征值, α_i 是 A 的属于 λ_i 的特征向量, $i = 1, 2$. 由于

$$\lambda_1(\alpha_1, \alpha_2) = (\lambda_1 \alpha_1, \alpha_2) = (A\alpha_1, \alpha_2) = (A\alpha_1)' \alpha_2 = \alpha_1' A' \alpha_2 = \alpha_1' A \alpha_2,$$

$$\lambda_2(\alpha_1, \alpha_2) = (\alpha_1, \lambda_2 \alpha_2) = (\alpha_1, A\alpha_2) = \alpha_1' A \alpha_2,$$

因此 $\lambda_1(\alpha_1, \alpha_2) = \lambda_2(\alpha_1, \alpha_2)$. 于是 $(\lambda_1 - \lambda_2)(\alpha_1, \alpha_2) = 0$. 由于 $\lambda_1 \neq \lambda_2$, 因此 $(\alpha_1, \alpha_2) = 0$. 即 α_1 与 α_2 正交.

<https://blog.csdn.net/Jinyindao2430>

定理 3 实对称矩阵一定正交相似于对角矩阵.

证明 对于实对称矩阵的级数 n 作数学归纳法.

$n = 1$ 时, (a) 已经是对角矩阵, 且 $I_1^{-1}(a)I_1 = (a)$.

假设任意一个 $n - 1$ 级实对称矩阵都能正交相似于对角矩阵. 现在来看 n 级实对称矩阵 A .

取 A 的一个特征值 λ_1 (这由定理 1 保证可取到), 取 A 的属于 λ_1 的一个特征向量 η_1 , 且 $|\eta_1| = 1$. η_1 可扩充成 \mathbb{R}^n 的一个基 (见第 3 章 §4 定理 1 后面的注), 然后经过施密特正交化和单位化, 可得到 \mathbb{R}^n 的一个标准正交基: $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n$. 令

$$T_1 = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n),$$

则 T_1 是 n 级正交矩阵. 我们有

$$\begin{aligned} T_1^{-1}AT_1 &= T_1^{-1}(A\eta_1, A\eta_2, \dots, A\eta_n) \\ &= (T_1^{-1}\lambda_1\eta_1, T_1^{-1}A\eta_2, \dots, T_1^{-1}A\eta_n). \end{aligned}$$

因为 $T_1^{-1}T_1 = I$, 所以

$$T_1^{-1}(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n) = (\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n).$$

于是得, $T_1^{-1}\eta_1 = \epsilon_1$. 从而 $T_1^{-1}AT_1$ 的第 1 列是 $\lambda_1\epsilon_1$. 因此可以设

$$T_1^{-1}AT_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & a \\ 0 & B \end{pmatrix}.$$

由于 T_1 是正交矩阵, A 是实对称矩阵, 因此 $T_1^{-1}AT_1$ 也是实对称矩阵. 从而得, $\alpha = 0$, 并且 B 是 $n-1$ 级实对称矩阵. 据归纳假设, 有 $n-1$ 级正交矩阵

<https://blog.csdn.net/Jinyindao243052>

T_2 , 使得

$$T_2^{-1}BT_2 = \text{diag}\{\lambda_2, \dots, \lambda_n\}.$$

令

$$T = T_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & T_2 \end{bmatrix},$$

由于上式右端的两个矩阵都是 n 级正交矩阵, 因此 T 是 n 级正交矩阵, 并且有

$$\begin{aligned} T^{-1}AT &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & T_2 \end{bmatrix}^{-1} T_1^{-1}AT_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & T_2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & T_2^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & T_2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & T_2^{-1}BT_2 \end{bmatrix} \\ &= \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}. \end{aligned}$$