13 Eigen Decomposition 特征值分解

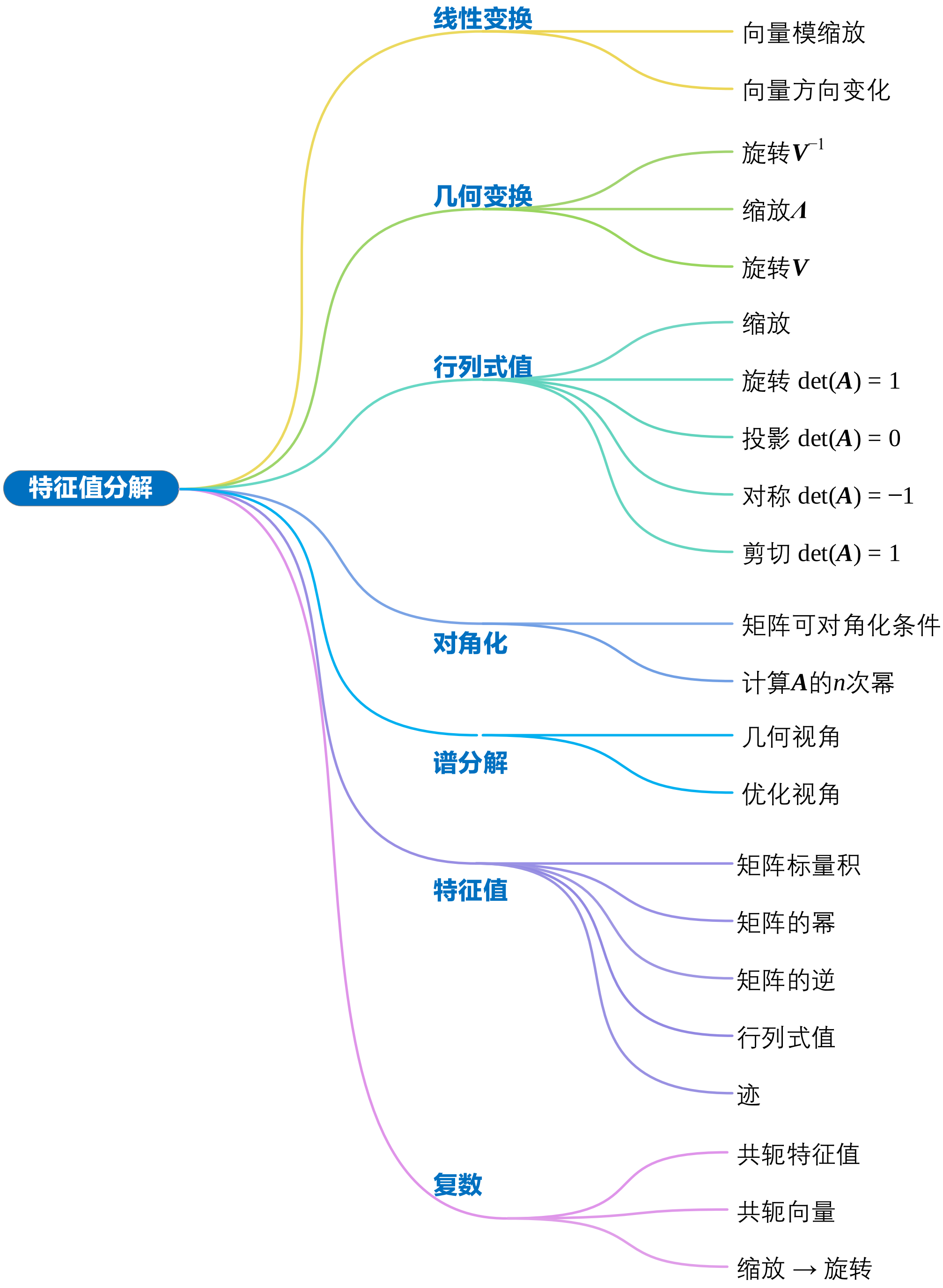
旋转 → 缩放 → 旋转

如果不能用数学表达，人类任何探索都不能被称之为真正的科学。

No human investigation can be called real science if it cannot be demonstrated mathematically.

—— 列奥纳多·达·芬奇 (Leonardo da Vinci) | 文艺复兴三杰之一 | 1452 ~ 1519

- `numpy.meshgrid()` 产生网格化数据
- `numpy.prod()` 指定轴的元素乘积
- `numpy.linalg.inv()` 矩阵求逆
- `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- `numpy.cos()` 计算余弦值
- `numpy.sin()` 计算正弦值
- `numpy.tan()` 计算正切值
- `numpy.flip()` 指定轴翻转数组
- `numpy.fliplr()` 左右翻转数组
- `numpy.flipud()` 上下翻转数组


特征值分解
线性变换
向量模缩放
向量方向变化
几何变换
旋转$\boldsymbol{V}^{-1}$
缩放$\boldsymbol{\Lambda}$
旋转$\boldsymbol{V}$
行列式值
缩放
旋转 $\det(\boldsymbol{A}) = 1$
投影 $\det(\boldsymbol{A}) = 0$
对称 $\det(\boldsymbol{A}) = -1$
剪切 $\det(\boldsymbol{A}) = 1$
对角化
矩阵可对角化条件
计算$\boldsymbol{A}$的n次幂
谱分解
几何视角
优化视角
特征值
矩阵标量积
矩阵的幂
矩阵的逆
行列式值
迹
复数
共轭特征值
共轭向量
缩放 → 旋转

13.1 几何角度看特征值分解

本书第 8 章讲解线性变换时提到，几何视角下，方阵对应缩放、旋转、投影、剪切等几何变换中一种甚至多种的组合，而矩阵分解可以帮我们找到这些几何变换的具体成分。本章要讲的特征值分解能帮我们找到某些特定方阵中“缩放”和“旋转”这两个成分。

举个例子

给定如下一个矩阵 $\boldsymbol{A}$，具体如下：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1.25 & -0.75\\ -0.75 & 1.25\end{bmatrix} \tag{1}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 乘向量 $\boldsymbol{w}_1$ 得到一个新向量 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}_1$，比如：

$$\boldsymbol{w}_1=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{w}_1=\begin{bmatrix}1.25 & -0.75\\ -0.75 & 1.25\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1.25\\ -0.75\end{bmatrix} \tag{2}$$

如图 1 所示，从几何角度，对比原向量 $\boldsymbol{w}_1$，经过 $\boldsymbol{A}$ 的映射，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}_1$ 的方向和模都发生了变化。也就是说，$\boldsymbol{A}$ 起到了缩放、旋转两方面作用。

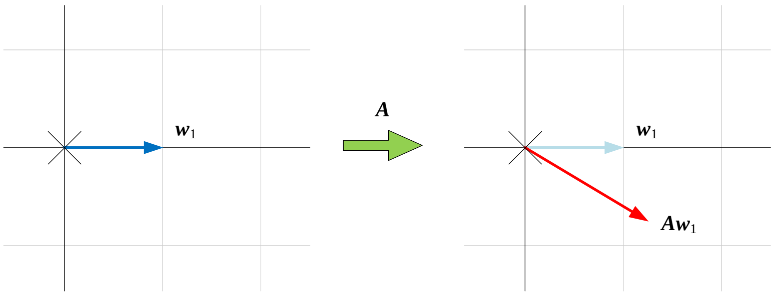


图 1. 我们发现相比原向量 $\boldsymbol{w}_1$，新向量 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}_1$ 的方向和模都发生变化

图 2 给出 81 个不同朝向向量 $\boldsymbol{w}$，它们都是单位向量，即向量模均为 1。

经过 $\boldsymbol{A}$ 的映射得到图 3 所示 81 个不同 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}$ 结果。图 3 中，多数情况，$\boldsymbol{w}$ (蓝色箭头) 到 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}$ (红色箭头) 同时发生旋转、缩放。

请大家特别注意图 3 中如下四个向量 (背景为浅蓝色)：

$$\boldsymbol{w}_{11}=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{w}_{31}=\begin{bmatrix}-\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{w}_{51}=\begin{bmatrix}-\sqrt{2}/2\\ -\sqrt{2}/2\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{w}_{71}=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2\\ -\sqrt{2}/2\end{bmatrix} \tag{3}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和这四个向量相乘得到的结果和原向量相比，仅仅发生缩放，也就是向量模变化，但是方向没有变化。$\boldsymbol{A}$ 对这些向量只产生缩放变换，不产生旋转效果，那么这些向量就称为 $\boldsymbol{A}$ 特征向量，伸缩的比例就是特征值。

⚠ 注意，准确来说，如果 $\boldsymbol{w}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}$ 方向平行，同向或反向。

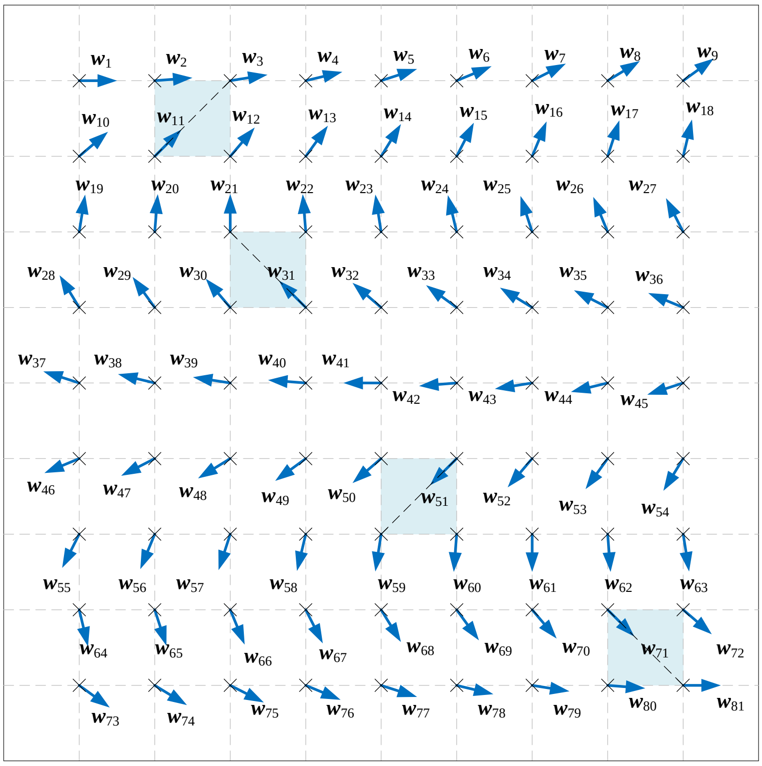


图 2. 81 个朝向不同方向的单位向量

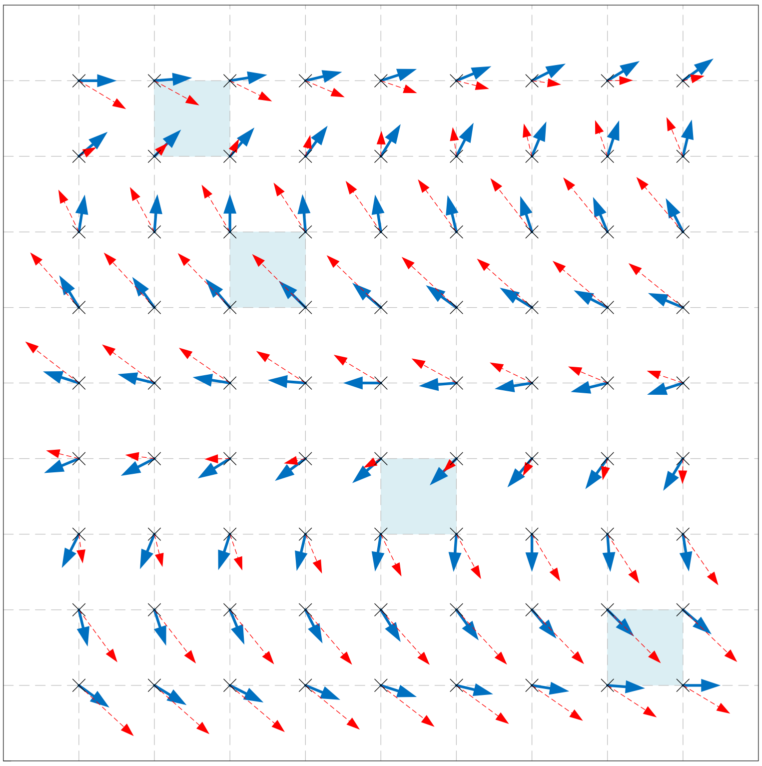


图 3. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 乘 $\boldsymbol{w}$ 得到的 81 个不同结果

单位圆

为了更好看清矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的作用，我们将不同朝向的向量都放在一个单位圆中，如图 4 左图。

图 4 左图中，向量的终点落在单位圆上。为了方便可视化，图 4 左图只展示四个蓝色箭头的线段，它们都是特征向量。图 4 右图为经过 $\boldsymbol{A}$ 映射后得到向量，终点落在旋转椭圆上。对比图 4 椭圆和正圆的缩放比例，大家可以试着估算特征值大小。

不禁感叹，椭圆真是无处不在。本书后文椭圆还将出现在不同场合，特别是和协方差矩阵相关的内容中。

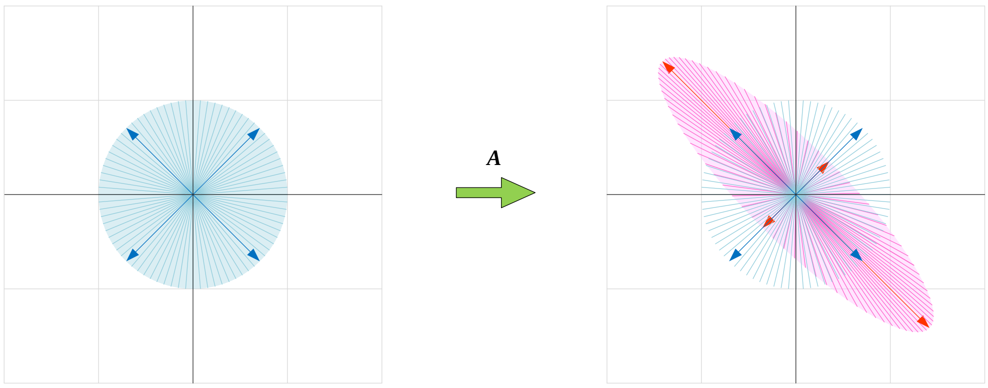


图 4. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对一系列向量的映射结果

Bk4_Ch13_01.py 绘制图 2、图 3、图 4。需要说明的是，为了方便大家理解以及保证图形的矢量化，丛书不会直接使用 Python 出图。所有图片后期都经过多道美化工序。因此，大家使用代码获得的图片和书中图片存在一定差异，但是图片美化中绝不会篡改数据。

13.2 旋转 → 缩放 → 旋转

根据本书第 11 章所述，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解可以写成：

$$\boldsymbol{A} = \overset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{V}}\ \overset{\text{Scale}}{\boldsymbol{\Lambda}}\ \overset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{V}^{-1}} \tag{4}$$

几何视角，$\boldsymbol{A}$ 乘任意向量 $\boldsymbol{w}$ 代表“旋转 → 缩放 →旋转”，即，

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} = \overset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{V}}\ \overset{\text{Scale}}{\boldsymbol{\Lambda}}\ \overset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{V}^{-1}}\ \boldsymbol{w} \tag{5}$$

⚠ 注意，几何变换顺序是从右向左，即旋转 (V^{-1}) → 缩放 (Λ) →旋转 (V)。

举个 2 × 2 矩阵的例子

(4) 等式右乘 V 得到：

$$AV = V\Lambda \tag{6}$$

将 V 展开写成 $[v_1, v_2]$ 并代入上式得到：

$$A\begin{bmatrix} v_1 & v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 & v_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{bmatrix} \tag{7}$$

展开 (7) 得到：

$$\begin{bmatrix} Av_1 & Av_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 v_1 & \lambda_2 v_2 \end{bmatrix} \tag{8}$$

对于上一节给出的例子，将具体数值代入 (4)，得到：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix}}_{A} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{V}\underbrace{\begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}}_{\Lambda}\underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{V^{-1}} \tag{9}$$

下面，我们分别讨论 v_1 和 v_2 的几何特征。

第一特征向量

v_1 为：

$$v_1 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{10}$$

A 乘 v_1 得到 Av_1：

$$Av_1 = \begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/4 \\ \sqrt{2}/4 \end{bmatrix} = \underbrace{\frac{1}{2}}_{\lambda_1} \times \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{11}$$

可以发现，相比 v_1，Av_1 方向没有发生变化，A 仅仅产生缩放作用，缩放比例为 $\lambda_1 = 1/2$。

图 5 中蓝色箭头代表 v_1，将 (4) 代入 (11)，将 A 拆解为“旋转→缩放→旋转”三步几何操作：

$$Av_1 = \overset{\text{Rotate}}{V}\ \overset{\text{Scale}}{\Lambda}\ \overset{\text{Rotate}}{V^{-1}}\ v_1 \tag{12}$$

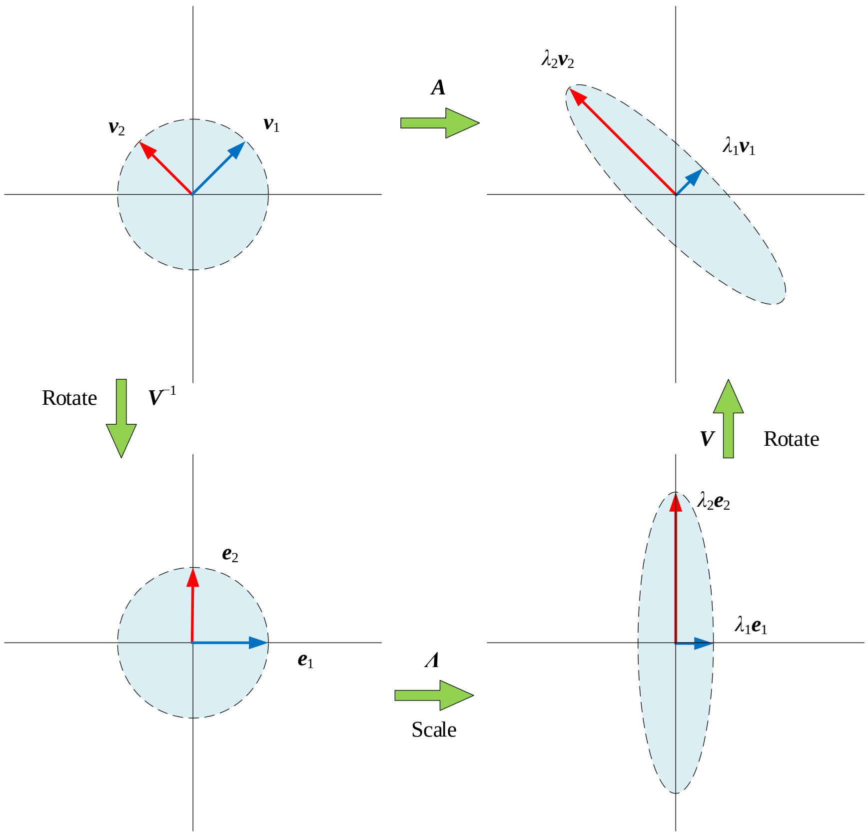


图 5. "旋转→缩放→旋转"操作

$\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_1$ 相对 $\boldsymbol{v}_1$ 顺时针旋转 45°：

$$\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\boldsymbol{e}_1 \tag{13}$$

然后再利用 $\boldsymbol{\Lambda}$ 完成缩放操作，得到 $\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_1$：

$$\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}0.5 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.5\\0\end{bmatrix}=\underset{\lambda_1}{0.5}\boldsymbol{e}_1 \tag{14}$$

最后利用 $\boldsymbol{V}$ 完成逆时针旋转 45°，得到 $\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_1$：

$$\begin{aligned}\underbrace{\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}}_{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{v}_1&=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\underset{\lambda_1}{0.5}\boldsymbol{e}_1\\&=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.5\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/4\\ \sqrt{2}/4\end{bmatrix}=\underset{\lambda_1}{0.5}\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2\end{bmatrix}\\&=\lambda_1\boldsymbol{v}_1\end{aligned} \tag{15}$$

第二特征向量

类似地，下面讨论 $\boldsymbol{A}$ 乘 $\boldsymbol{v}_2$ 对应的“旋转→缩放→旋转”操作。

$\boldsymbol{v}_2$ 为：

$$\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{16}$$

$\boldsymbol{A}$ 乘 $\boldsymbol{v}_2$ 得到 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2$：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} = \underset{\lambda_2}{2} \times \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{17}$$

相比 $\boldsymbol{v}_2$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2$ 方向没有发生变化，$\boldsymbol{A}$ 产生缩放作用，缩放比例为 $\lambda_2 = 2$。

$\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_2$ 将 $\boldsymbol{v}_2$ 顺时针旋转 45°：

$$\underset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{V}^{-1}} \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{e}_2 \tag{18}$$

再缩放得到 $\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_2$：

$$\underset{\text{Scale}}{\boldsymbol{\Lambda}} \boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} = \underset{\lambda_2}{2} \boldsymbol{e}_2 \tag{19}$$

最后旋转得到 $\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_2$：

$$\begin{aligned} \underset{\text{Rotate}}{\boldsymbol{V}} \boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{v}_2 &= \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \underset{\lambda_2}{2} \boldsymbol{e}_2 \\ &= \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} = \underset{\lambda_2}{2} \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \\ &= \lambda_2 \boldsymbol{v}_2 \end{aligned} \tag{20}$$

整个几何变换过程如图 5 中红色箭头所示。

Bk4_Ch13_02.py 绘制图 5。

13.3 再谈行列式值和线性变换

计算本章第一节给出矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值 $\det(\boldsymbol{A})$：

$$\det(\boldsymbol{A})=\det\left(\begin{bmatrix}1.25 & -0.75\\ -0.75 & 1.25\end{bmatrix}\right)=1 \tag{21}$$

本书第 4 章提到过，2 × 2 矩阵行列式值相当于几何变换前后“面积缩放系数”。上式中 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值为 1，因此几何变换前后面积没有任何缩放。

这一点也可以通过 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的行列式值加以验证：

$$\begin{aligned}\det(\boldsymbol{A})&=\det\left(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1}\right)=\det(\boldsymbol{V})\det(\boldsymbol{\Lambda})\det\left(\boldsymbol{V}^{-1}\right)\\&=\det(\boldsymbol{\Lambda})\det\left(\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{-1}\right)=\det(\boldsymbol{\Lambda})\\&=\lambda_1\lambda_2=\frac{1}{2}\times 2=1\end{aligned} \tag{22}$$

上式说明，如果 $\boldsymbol{A}$ 可以进行特征值分解，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值等于 $\boldsymbol{A}$ 的所有特征值之积。

图 6 给出一个正方形，内部和边缘整齐排列散点。在 $\boldsymbol{A}$ 的作用下，正方形完成“旋转→缩放→旋转”三步几何操作。不难发现，得到的菱形和原始正方形的面积一致，这一点印证了 $|\boldsymbol{A}| = 1$。

回过头来看图 4 右图旋转椭圆，它的半长轴长度为 2，而半短轴长度为 1/2。但是，得到的椭圆面积和原来单位圆面积一样。

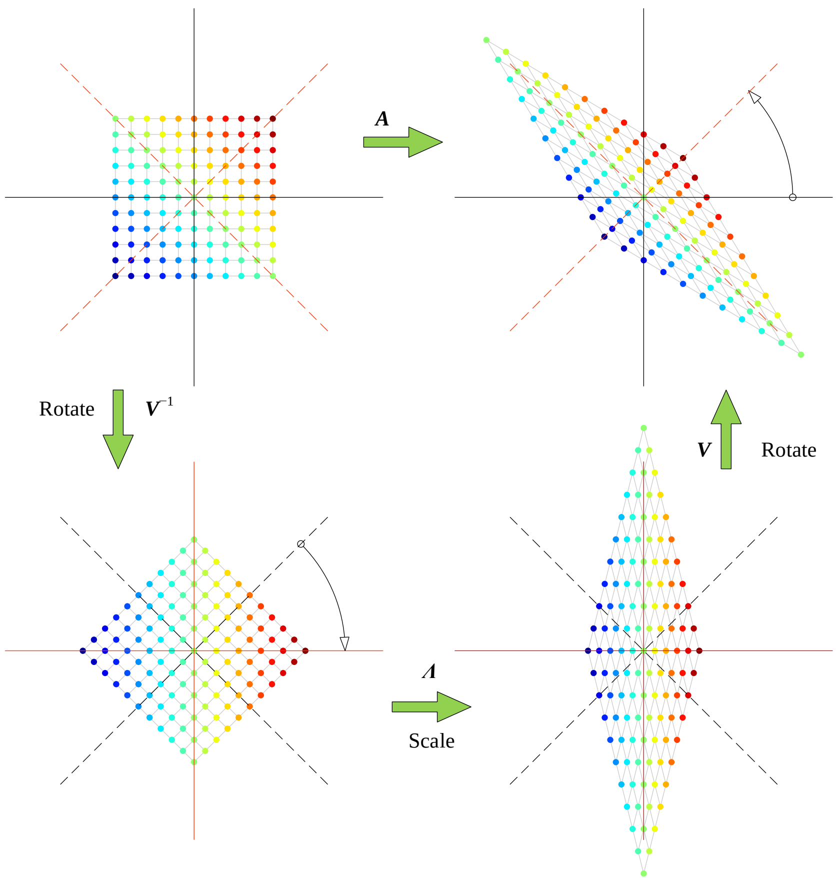


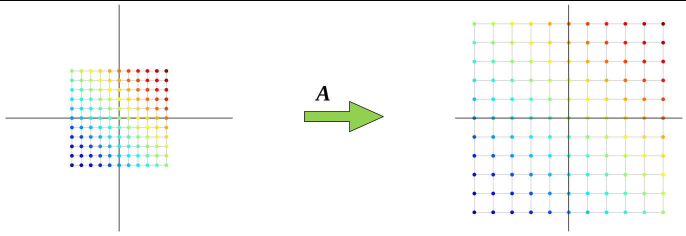
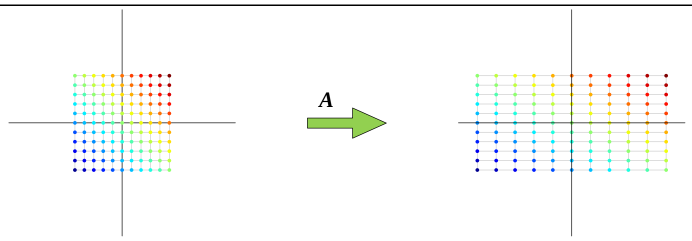
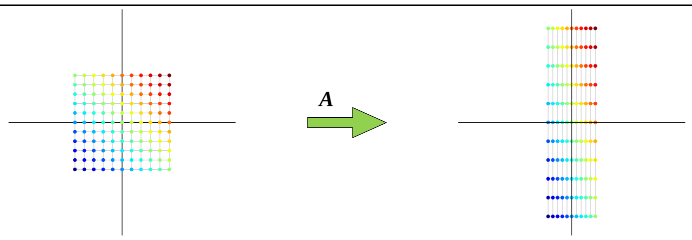
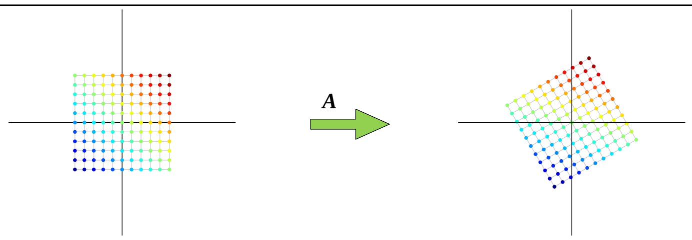
图 6. 正方形经过矩阵 $\boldsymbol{A}$ 线性变换

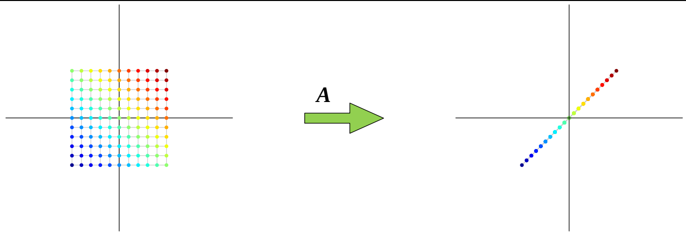
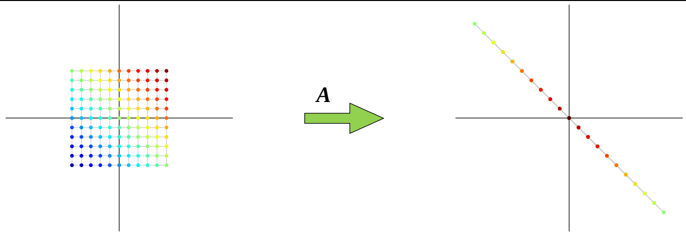
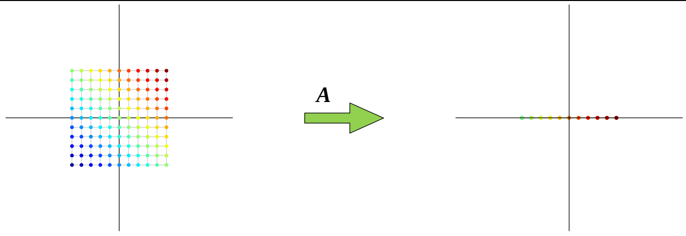
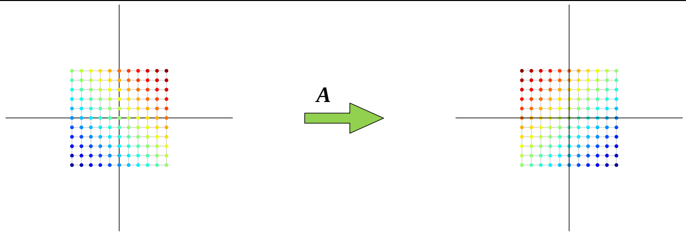
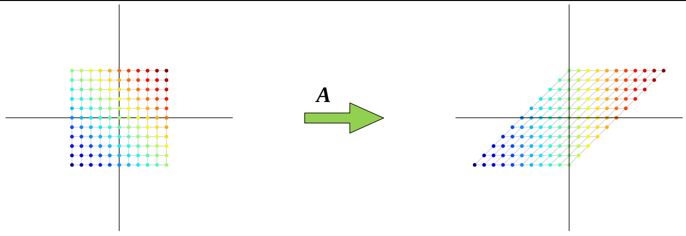
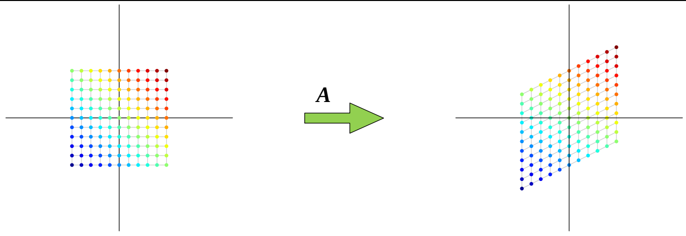
线性变换、特征值、行列式值

表 1 总结常见 2×2 矩阵对应的线性变换、特征值、行列式值。表 1 告诉我们特征值可以为正数、负数、0，甚至是复数。复数特征值都是成对出现，且共轭。本章最后专门讲解特征值分解中出现复数现象。

此外，请大家自行判断表中哪些矩阵可逆，也就是几何变换可逆。

表 1. 常见 2×2 矩阵对应的线性变换、特征值、行列式值

矩阵 $\boldsymbol{A}$	几何特征
等比例缩放 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1 = 2\\ \lambda_2 = 2\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A}) = 4$	
不等比例缩放 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1 = 2\\ \lambda_2 = 1\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A}) = 2$	
不等比例缩放 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.5 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1 = 2\\ \lambda_2 = 0.5\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A}) = 1$	
旋转 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\sqrt{3}/2 & -0.5\\ 0.5 & \sqrt{3}/2\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1 = \sqrt{3}/2 + 0.5i\\ \lambda_2 = \sqrt{3}/2 - 0.5i\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A}) = 1$	

投影 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.5 & 0.5\\ 0.5 & 0.5\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=1\\ \lambda_2=0\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=0$	
非正交映射 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & -1\\ -1 & 1\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=2\\ \lambda_2=0\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=0$	
横轴投影 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=1\\ \lambda_2=0\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=0$	
纵轴对称 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=1\\ \lambda_2=-1\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=-1$	
剪切 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=1\\ \lambda_2=1\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=1$	
剪切 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0.5 & 1\end{bmatrix}$ $\begin{cases}\lambda_1=1\\ \lambda_2=1\end{cases}$ $\det(\boldsymbol{A})=1$	

13.4 对角化、谱分解

可对角化

如果存在一个非奇异矩阵 $\boldsymbol{V}$ 和一个对角矩阵 $\boldsymbol{D}$，使得方阵 $\boldsymbol{A}$ 满足：

$$\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{D} \tag{23}$$

则称 $\boldsymbol{A}$ **可对角化** (diagonalizable)。

只有可对角化的矩阵才能特征值分解：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{24}$$

其中，矩阵 $\boldsymbol{D}$ 就是特征值矩阵。

如果 $\boldsymbol{A}$ 可以对角化，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的平方可以写成：

$$\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{V}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{-1} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^2\boldsymbol{V}^{-1} = \boldsymbol{V}\begin{bmatrix} (\lambda_1)^2 & & & \\ & (\lambda_2)^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & (\lambda_D)^2 \end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{25}$$

类似地，$\boldsymbol{A}$ 的 n 次幂可以写成：

$$\boldsymbol{A}^n = \boldsymbol{V}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{-1} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^n\boldsymbol{V}^{-1} = \boldsymbol{V}\begin{bmatrix} (\lambda_1)^n & & & \\ & (\lambda_2)^n & & \\ & & \ddots & \\ & & & (\lambda_D)^n \end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{26}$$

谱分解

特别地，如果 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵，$\boldsymbol{A}$ 的特征值分解可以写成：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_D \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \\ &= \lambda_1\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \lambda_2\boldsymbol{v}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + \cdots \lambda_D\boldsymbol{v}_D\boldsymbol{v}_D^{\mathrm{T}} = \sum_{j=1}^{D}\lambda_j\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}} \\ &= \lambda_1\boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1 + \lambda_2\boldsymbol{v}_2 \otimes \boldsymbol{v}_2 + \cdots \lambda_D\boldsymbol{v}_D \otimes \boldsymbol{v}_D = \sum_{j=1}^{D}\lambda_j\boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j \end{aligned} \tag{27}$$

其中，V 为正交矩阵，满足 $V^{\mathrm{T}}V = VV^{\mathrm{T}} = I$。

上式告诉我们为什么对称矩阵的特征分解又叫**谱分解** (spectral decomposition)，因为特征值分解将矩阵拆解成一系列特征值和特征向量张量积乘积，就好比将白光分解成光谱中各色光一样。

再进一步，将 V 整理到 (27) 等式的左边：

$$V^{\mathrm{T}}AV = \Lambda \tag{28}$$

同样将 V 写成其列向量并展开上式，

$$\underbrace{\begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}} \\ v_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ v_D^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}}_{V^{\mathrm{T}}} A \underbrace{\begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_D \end{bmatrix}}_{V} = \underbrace{\begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}}Av_1 & v_1^{\mathrm{T}}Av_2 & \cdots & v_1^{\mathrm{T}}Av_D \\ v_2^{\mathrm{T}}Av_1 & v_2^{\mathrm{T}}Av_2 & \cdots & v_2^{\mathrm{T}}Av_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_D^{\mathrm{T}}Av_1 & v_D^{\mathrm{T}}Av_2 & \cdots & v_D^{\mathrm{T}}Av_D \end{bmatrix}}_{V^{\mathrm{T}}AV} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}}_{\Lambda} \tag{29}$$

观察上式，我们发现，当 $i = j$ 时，方阵对角线元素满足：

$$v_j^{\mathrm{T}}Av_j = \lambda_j \tag{30}$$

当 $i \neq j$ 时，方阵非对角线元素满足：

$$v_i^{\mathrm{T}}Av_j = 0 \tag{31}$$

谱分解格拉姆矩阵

本书中见到的对称矩阵多数是格拉姆矩阵。对于数据矩阵 X，它的格拉姆矩阵 G 为 $G = X^{\mathrm{T}}X$。G 就是 (29) 中的矩阵 A，代入得到：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xv_1 & v_1^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xv_2 & \cdots & v_1^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xv_D \\ v_2^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xv_1 & v_2^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xv_2 & \cdots & v_2^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xv_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_D^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xv_1 & v_D^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xv_2 & \cdots & v_D^{\mathrm{T}}X^{\mathrm{T}}Xv_D \end{bmatrix}}_{V^{\mathrm{T}}GV} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}}_{\Lambda} \tag{32}$$

特别地，如果 X 列满秩，G 可逆，G 的逆矩阵可以写成如下特征值分解：

$$G^{-1} = V \underbrace{\begin{bmatrix} 1/\lambda_1 & & & \\ & 1/\lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1/\lambda_D \end{bmatrix}}_{\Lambda^{-1}} V^{\mathrm{T}} \tag{33}$$

令 $y_j = Xv_j$。如图 7 所示，由于 y_j 是单位矩阵，矩阵乘积 Xv_j 相当于数据矩阵 X 向 span(v_j) 投影结果为 y_j。

(32) 可以写成：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 & \cdots & \boldsymbol{y}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_D \\ \boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 & \cdots & \boldsymbol{y}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{y}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 & \boldsymbol{y}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 & \cdots & \boldsymbol{y}_D^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{V}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{34}$$

观察上式，我们发现当 $i \neq j$ 时，$\boldsymbol{y}_i$ 和 $\boldsymbol{y}_j$ 正交。我们在本书第 10 章介绍过这一结论，上述推导让我们“知其所以然”。

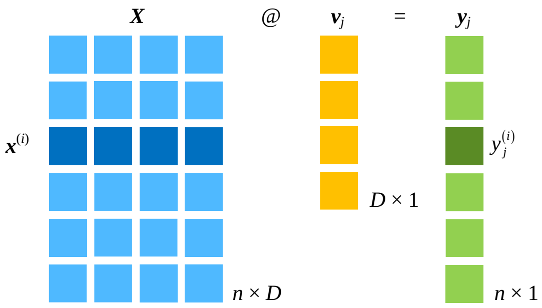


图 7. 数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 向 $\mathrm{span}(\boldsymbol{v}_j)$ 投影结果为 $\boldsymbol{y}_j$

注意，(32) 上式中矩阵每个元素显然都是标量。本书之前一直强调，看到矩阵乘积结果为标量时，一定要想一想矩阵乘积能否写成 L^2 范数。

(34) 对角线元素显然可以写成 L^2 范数：

$$\left\|\boldsymbol{y}_j\right\|_2^2 = \left\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_j\right\|_2^2 = \lambda_j \tag{35}$$

几何视角

该怎么理解 (35)？

我们还是要拿出看家本领——几何视角。

如图 8 所示，用散点 ● 代表数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，散点 ● 向 $\mathrm{span}(\boldsymbol{v}_j)$ 投影结果为 $\boldsymbol{y}_j$，即图中 ×。$\boldsymbol{y}_j$ 中的每个值就是 × 到原点的距离。

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的第 i 行行向量为 $\boldsymbol{x}^{(i)}$，即图 8 中红点 ●。$\boldsymbol{x}^{(i)}$ 向 $\boldsymbol{v}_j$ 投影结果 $y_j^{(i)}$ 就是 $\boldsymbol{x}^{(i)}$ 在 $\mathrm{span}(\boldsymbol{v}_j)$ 的坐标：

$$y_j^{(i)} = \boldsymbol{x}^{(i)}\boldsymbol{v}_j \tag{36}$$

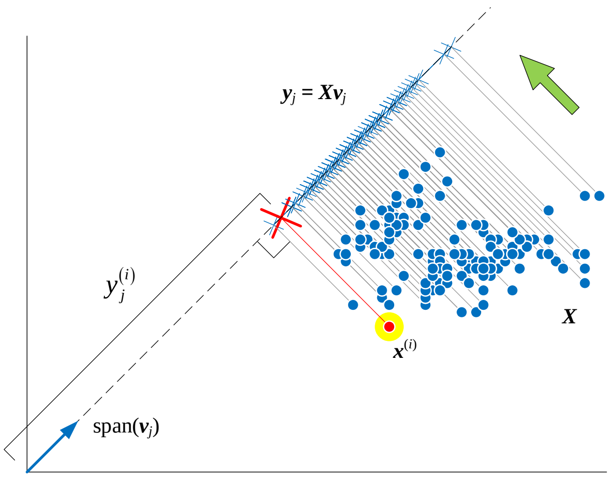


图 8. 数据矩阵 X 向 span(v_j) 投影结果为 y_j，几何视角

有了这个视角，我们知道 (35) 中 $\|y_j\|_2^2$ 代表 $y_j^{(i)}$ 到原点距离 (有正负) 的平方和，即：

$$\|y_j\|_2^2 = \left(y_j^{(1)}\right)^2 + \left(y_j^{(2)}\right)^2 + \cdots \left(y_j^{(n)}\right)^2 = \lambda_j \tag{37}$$

注意，这些距离的平方和恰好等于特征值 λ_j。

若 (34) 中特征值 λ_j 按大小排列，即 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots \lambda_D$, 这说明特征向量 v_j 也有主次之分。数据矩阵 X 朝不同特征向量 v 投影，得到的 $\|y\|_2^2 = \|Xv\|_2^2$ 有大、有小。

有大小之分，就意味存在优化问题。

我们先给结论，在 $\mathbb{R}^D$ 有无数个 v 中，X 朝特征向量 v_1 投影对应的 $\|y_1\|_2^2 = \|Xv_1\|_2^2$ 最大，这个最大值为 λ_1。本书第 18 章将提供优化视角告诉我们“为什么”。

以鸢尾花为例

本书第 10 章计算了鸢尾花数据矩阵 X 的格拉姆矩阵 G，如图 9 所示。图 9 中 G 中元素没有保留任何小数位。

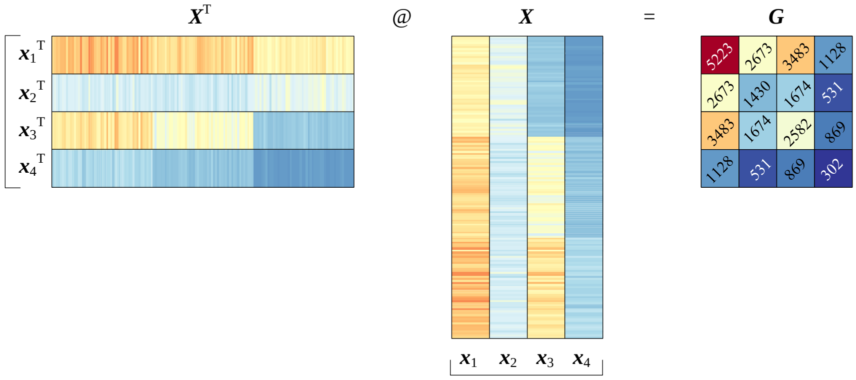


图 9. 矩阵 X 的格拉姆矩阵，图片来自本书第 10 章

格拉姆矩阵 G 为对称矩阵，对 G 特征值分解得到：

$$G = V\Lambda V^T = \begin{bmatrix} 0.75 & 0.28 & 0.50 & 0.32 \\ 0.38 & 0.54 & -0.67 & -0.31 \\ 0.51 & -0.70 & -0.05 & -0.48 \\ 0.16 & -0.34 & -0.53 & 0.75 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9208.3 & & & \\ & 315.4 & & \\ & & 11.9 & \\ & & & 3.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.75 & 0.28 & 0.50 & 0.32 \\ 0.38 & 0.54 & -0.67 & -0.31 \\ 0.51 & -0.70 & -0.05 & -0.48 \\ 0.16 & -0.34 & -0.53 & 0.75 \end{bmatrix}^T \tag{38}$$

上式中，V 仅保留两位小数位，特征值仅保留一位小数位。

(38) 也回答了本书第 10 章矩阵 V 从哪里来的问题。除了特征值分解，本书第 15、16 章介绍的奇异值分解也可以帮助我们获得矩阵 V。

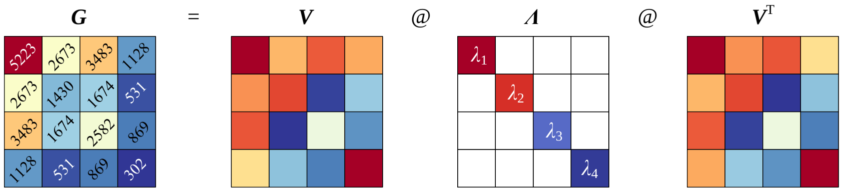


图 10. 矩阵 X 的格拉姆矩阵的特征值分解

利用谱分解方式展开 (38) 得到：

$$\begin{aligned} G &= \lambda_1 v_1 \otimes v_1 + \lambda_2 v_2 \otimes v_2 + \lambda_3 v_3 \otimes v_3 + \lambda_4 v_4 \otimes v_4 \\ &= 9208.3 v_1 \otimes v_1 + 315.4 v_2 \otimes v_2 + 11.9 v_3 \otimes v_3 + 3.5 v_4 \otimes v_4 \end{aligned} \tag{39}$$

由于 V 是规范正交基，因此在 $\mathbb{R}^4$ 空间中，V 的作用仅仅是旋转。

而真正决定具体哪个 v_j“更重要”的是特征值 λ_j 大小。

观察上式容易发现，随着特征值 λ_j 不断减小，对应 $\boldsymbol{v}_j \otimes \boldsymbol{v}_j$ 的影响力也在衰减。图 11 中五幅热图采用相同色谱，$\lambda_1 \boldsymbol{v}_1 \otimes \boldsymbol{v}_1$ 影响力最大，剩下三个成分影响几乎可以忽略不计。根据本书第 10 章代码，请大家自行编写代码绘制本节热图。

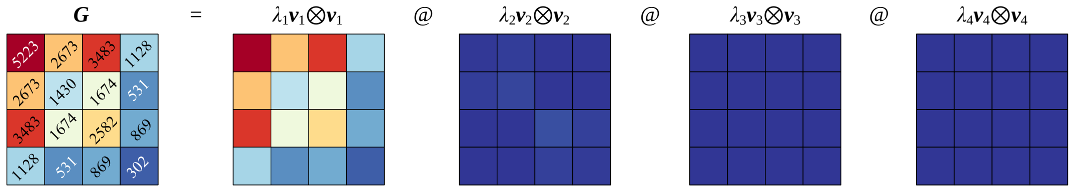


图 11. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵的谱分解

13.5 聊聊特征值

本节介绍特征值重要性质。

前文几次提到，给定矩阵 $\boldsymbol{A}$，其特征值 λ 和特征向量 $\boldsymbol{v}$ 关系为：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \lambda \boldsymbol{v} \tag{40}$$

$\boldsymbol{A}$ 标量积 $k\boldsymbol{A}$ 对应的特征值为 λk，即，

$$(k\boldsymbol{A})\boldsymbol{v} = (k\lambda)\boldsymbol{v} \tag{41}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}^2$ 的特征向量仍然为 $\boldsymbol{v}$，特征值为 λ^2：

$$\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{v} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{A}(\lambda\boldsymbol{v}) = \lambda(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}) = \lambda^2\boldsymbol{v} \tag{42}$$

推广上式，n 为任意整数，$\boldsymbol{A}^n$ 的特征值为 λ^n：

$$\boldsymbol{A}^n\boldsymbol{v} = \lambda^n\boldsymbol{v} \tag{43}$$

(43) 也可以推广得到：

$$\boldsymbol{A}^n\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^n \tag{44}$$

如果逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 存在，$\boldsymbol{A}^{-1}$ 的特征向量仍为 $\boldsymbol{v}$，特征值为 $1/\lambda$：

$$\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{v} = \frac{1}{\lambda}\boldsymbol{v} \tag{45}$$

前文提到，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值为其特征值乘积：

$$\det(\boldsymbol{A}) = \prod_{j=1}^{D} \lambda_j \tag{46}$$

如果任一特征值为 0，则 det(*A*) 为零，这种情况 *A* 起到降维作用。本书第 4 章讲多维空间“平行体”和“正立方体”体积时，提到过这一点。

A 标量积 *kA* 的行列式值为：

$$\det(k\boldsymbol{A}) = k^D \prod_{j=1}^{D} \lambda_j \tag{47}$$

这相当于“平行体”和“正立方体”每个维度上边长都等比例缩放，缩放系数为 k。而体积的缩放比例为 k^D。

如果方阵 *A* 的形状为 $D \times D$，且 *A* 的秩 (rank) 为 r，则 *A* 有 $D - r$ 个特征值为 0。

矩阵 *A* 的迹等于其特征值之和：

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{D} \lambda_i \tag{48}$$

我们将会在主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 中用到 (48) 结论。

13.6 特征值分解中的复数现象

本章前文在对实数矩阵进行特征值分解时，我们偶尔发现特征值、特征向量存在虚数。这一节讨论这个现象。

举个例子

给定如下 2 × 2 实数矩阵 *A*：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \tag{49}$$

对 *A* 进行特征值分解，得到两个特征值分别为：

$$\lambda_1 = 1 + i, \quad \lambda_2 = 1 - i \tag{50}$$

共轭特征值、共轭特征向量

这对共轭特征值出现的原因是，方阵 *A* 特征方程有一对复数解：

$$|\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}| = 0 \tag{51}$$

求解出的非实数的特征值会以共轭复数形式成对出现，因此它们也常被称作**共轭特征值** (conjugate eigenvalues)。所谓**共轭复数** (complex conjugate)，是指两个实部相等，虚部互为相反数的复数。

(49) 中 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 λ_1 和 λ_2 对应的特征向量分别是：

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} i \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} -i \\ 1 \end{bmatrix} \tag{52}$$

这样的特征向量被称作**共轭特征向量** (conjugate eigenvector)。

展开来说，本书前文讲述的向量矩阵等概念都是建立在 $\mathbb{R}^n$ 上，我们可以把同样的数学工具推广到复数空间 $\mathbb{C}^n$ 上。

$\mathbb{C}^n$ 中的任意复向量 $\boldsymbol{x}$ 的共轭向量 $\bar{\boldsymbol{x}}$，也是 $\mathbb{C}^n$ 中的向量。$\bar{\boldsymbol{x}}$ 中每个元素是 $\boldsymbol{x}$ 对应元素的共轭复数。比如，给定复数向量 $\boldsymbol{x}$ 和对应的共轭向量 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 如下：

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 1+i \\ 3-2i \end{bmatrix}, \quad \bar{\boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} 1-i \\ 3+2i \end{bmatrix} \tag{53}$$

一个特殊的 2 × 2 矩阵

给定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 如下：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a & -b \\ b & a \end{bmatrix} \tag{54}$$

其中，a 和 b 均为实数，且不同时等于 0。

容易求得 $\boldsymbol{A}$ 的复数特征值为一对共轭复数：

$$\lambda = a \pm bi \tag{55}$$

两者的关系如图 12 所示。图 12 横轴为实部，纵轴为虚部。

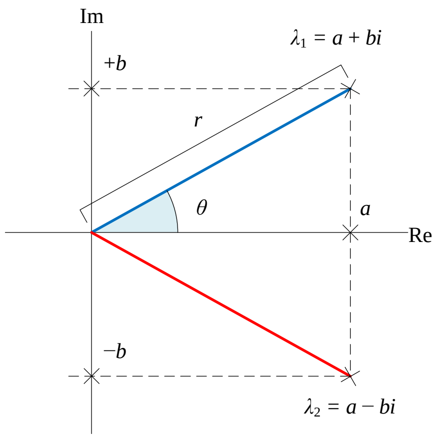


图 12. 一对共轭特征值

图 12 中，两个共轭特征值的模相等，令 r 为复数特征值的模，容易发现，r 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 行列式值的平方根：

$$r = |\lambda| = \sqrt{a^2 + b^2} = \sqrt{|\boldsymbol{A}|} \tag{56}$$

因此，$\boldsymbol{A}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{A} = \sqrt{a^2 + b^2}\begin{bmatrix} \frac{a}{\sqrt{a^2+b^2}} & \frac{-b}{\sqrt{a^2+b^2}} \\ \frac{b}{\sqrt{a^2+b^2}} & \frac{a}{\sqrt{a^2+b^2}} \end{bmatrix} = r\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{R}}\underbrace{\begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{S}} \tag{57}$$

图 12 所示复平面上，θ 为 (0, 0) 到 (a, b) 线段和水平轴正方向夹角，θ 也称作为复数 $\lambda_1 = a + bi$ 的辐角。

几何视角

有了上述分析，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的几何变换就变得很清楚，$\boldsymbol{A}$ 是缩放 ($\boldsymbol{S}$) 和旋转 ($\boldsymbol{R}$) 的复合。给平面上某个 $\boldsymbol{x}_0$，将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不断作用在 $\boldsymbol{x}_0$ 上：

$$\boldsymbol{x}_n = \boldsymbol{A}^n \boldsymbol{x}_0 \tag{58}$$

如图 13 (a) 所示，当缩放系数 $r = 1.2 > 1$，我们可以看到，随着 n 增大，向量 $\boldsymbol{x}_n$ 不断旋转向外发散。如图 13 (b) 所示，当缩放系数 $r = 0.8 < 1$，随着 n 增大，向量 $\boldsymbol{x}_n$ 不断旋转向内收缩。注意，图 12 中平面是复平面，横轴是实数轴，纵轴是虚数轴。而图 13 则是实数 x_1x_2 平面。

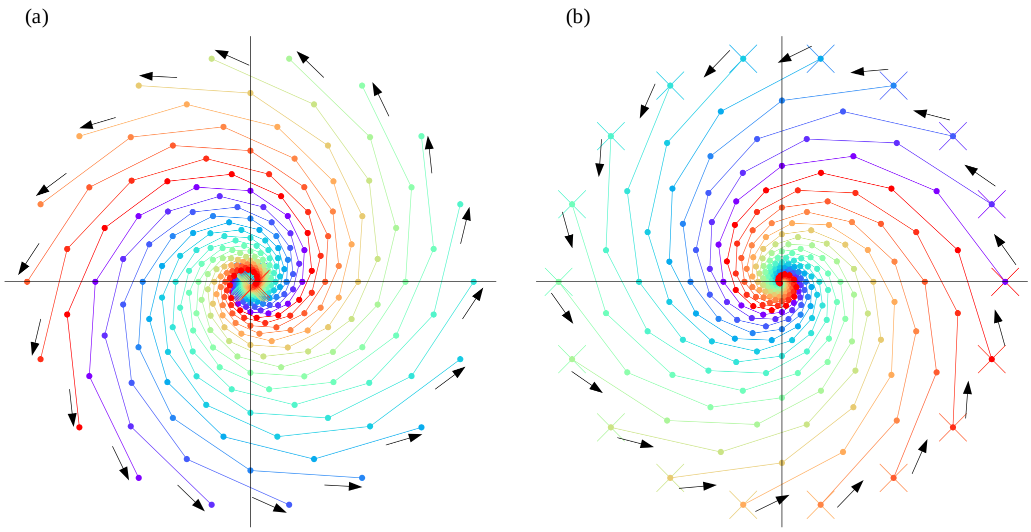


图 13. 在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 几何变换重复下，向量的 $\boldsymbol{x}$ 位置变化

Bk4_Ch13_03.py 绘制图 13。

下图四副子图其实是一张图，它代表着特征值分解的几何视角——旋转 → 缩放 → 旋转。这一点对于理解特征值分解尤其重要。

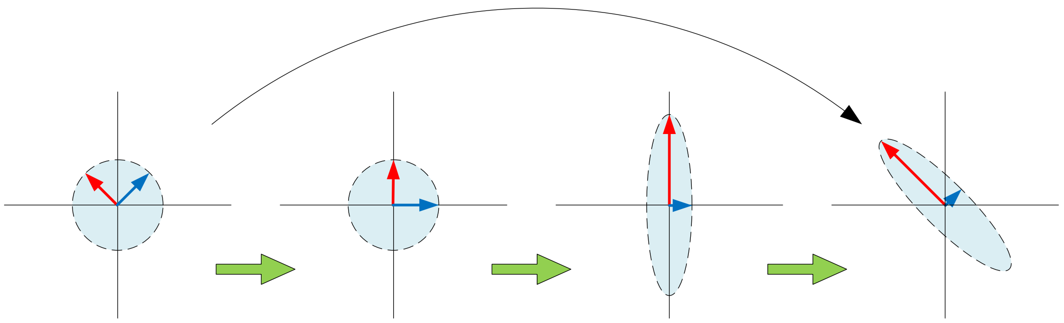


图 14. 总结本章重要内容的四副图

此外，请大家特别注意对称矩阵的特征值分解又叫谱分解，结果中 $\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，即规范正交基。

本章最后以我们在对实数矩阵分解中遇到的复数现象为例，介绍了共轭特征值和共轭特征向量。注意，复数矩阵自有一套体系，比如复数矩阵的转置叫做**埃尔米特转置** (Hermitian transpose)，记号一般用上标 $^{\mathrm{H}}$。复数矩阵相关内容不在本书范围内，感兴趣的读者可以自行学习。