

# 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
- 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

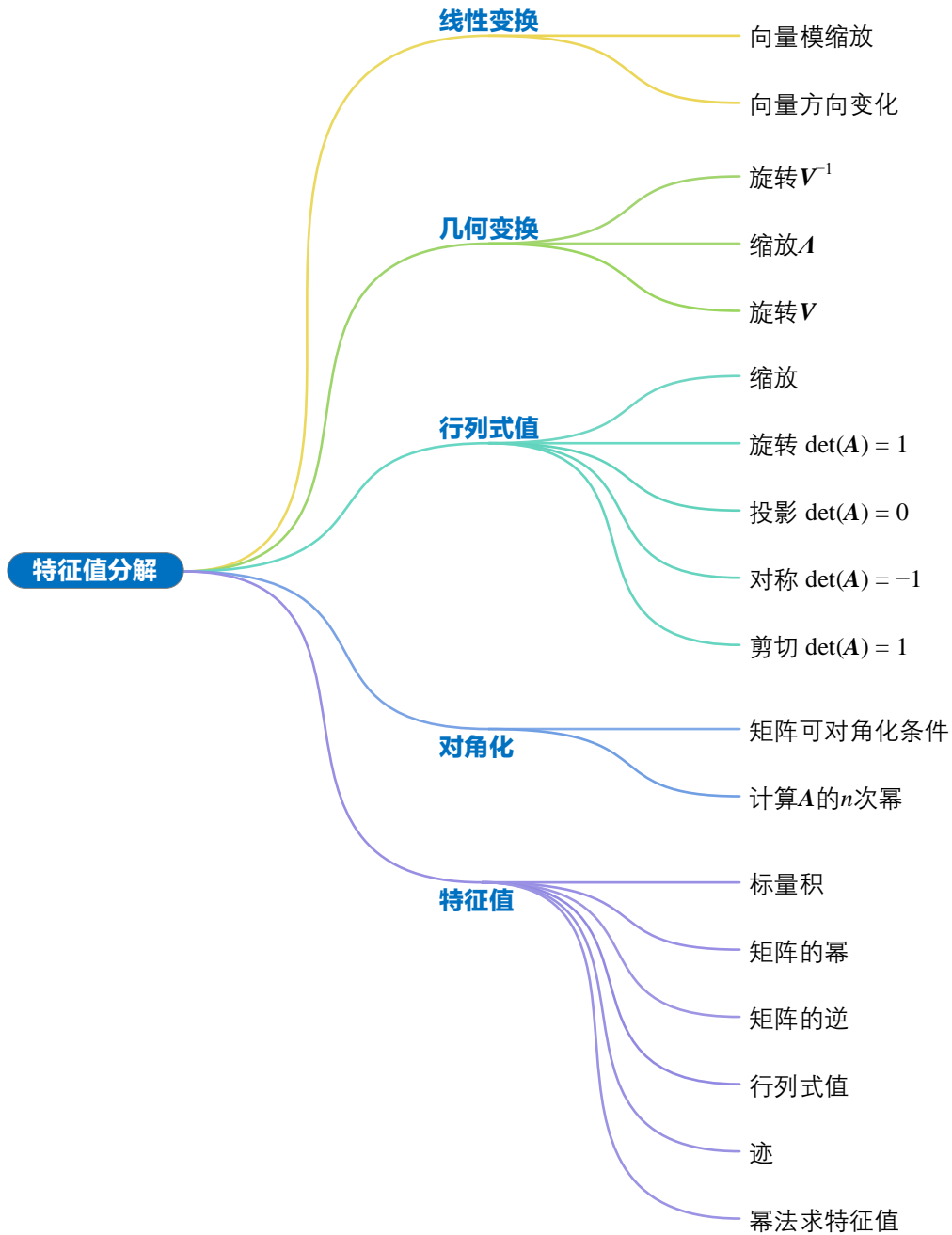
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)



## 13.1 几何角度看特征值分解

本书前文讲解线性变换时提到，几何视角下，方阵对应缩放、旋转、投影、剪切等各种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。本章专门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  $A$ ，具体如下：

$$A = \begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix} \quad (1)$$

矩阵  $A$  乘向量  $w_1$  得到一个新向量  $Aw_1$ ，比如：

$$w_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad Aw_1 = \begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.25 \\ -0.75 \end{bmatrix} \quad (2)$$

如图 1 所示，从几何角度，我们发现相比原向量  $w_1$ ，新向量  $Aw_1$  的方向和模都发生了变化。也就是说， $A$  起到了缩放、旋转两方面作用。

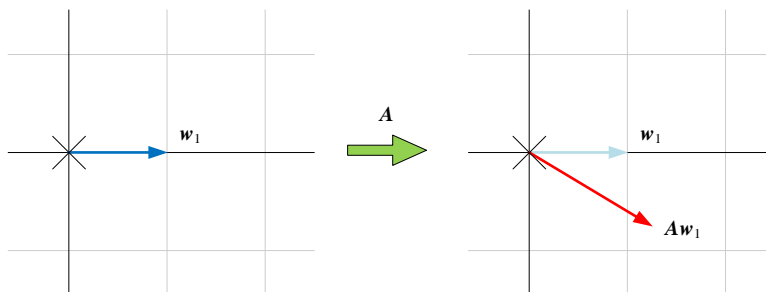


图 1. 我们发现相比原向量  $w_1$ ，新向量  $Aw_1$  的方向和模都发生变化

下面，给出如图 2 所示的 81 个不同朝向向量  $w$ ，它们都是单位向量，也就是模均为 1。用矩阵  $A$  乘这些向量，我们来分析一下  $Aw$  结果特点。

图 3 所示为  $Aw$  对比  $w$  的结果。 $w$  (蓝色箭头) 到  $Aw$  (红色箭头) 这个变化过程中，原向量  $w$  主要发生旋转、缩放。

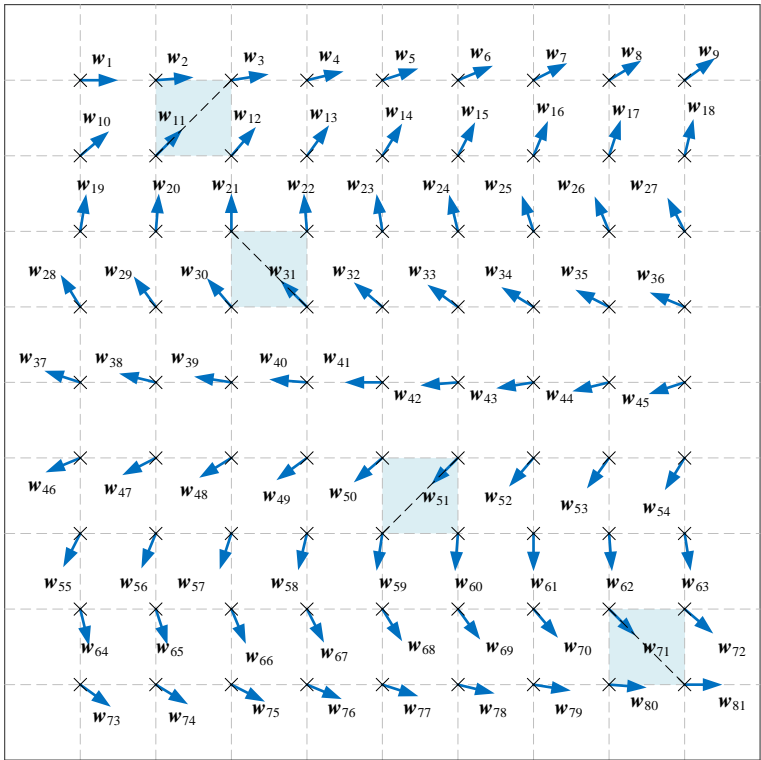


图 2. 81 个朝向不同方向的单位向量

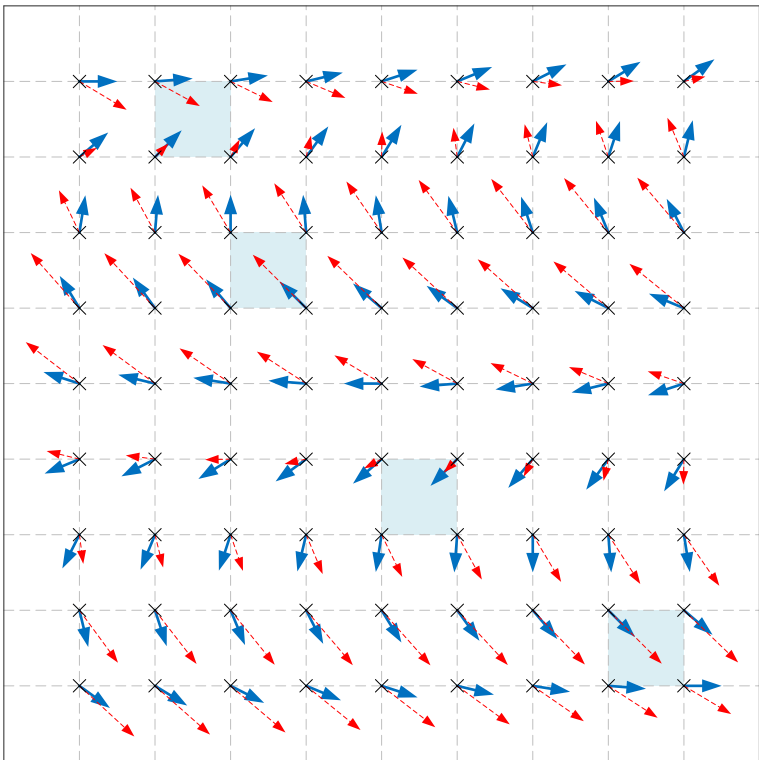


图 3. 矩阵  $A$  乘  $w$  得到的结果

请大家特别注意图 3 中如下四个向量 (背景为浅蓝色):

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

矩阵  $\mathbf{A}$  和这四个向量相乘得到的结果和原向量相比, 仅仅发生缩放变化, 也就是向量长度变化, 但是方向没有变化。

但是如果矩阵  $\mathbf{A}$  对某些向量只发生缩放变换, 不产生旋转效果, 那么这些向量就称为这个矩阵的特征向量, 伸缩的比例就是特征值。

### 单位圆

为了更好看清矩阵  $\mathbf{A}$  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; 注意, 为了方便可视化, 图 4 左图只展示四个有箭头的线段, 它们都是特征向量。

图 4 左图中, 向量的终点落在单位圆上。图 4 右图为经过  $\mathbf{A}$  转换后得到向量终点落椭圆上。图 4 中箭头对应的向量就是特征向量。通过图 4 中椭圆相对单位圆的缩放比例, 大家也可以大概估算特征值大小。

此外, 我们不禁感叹, 椭圆真是无处不在; 本书后文椭圆还将出现在不同场合。

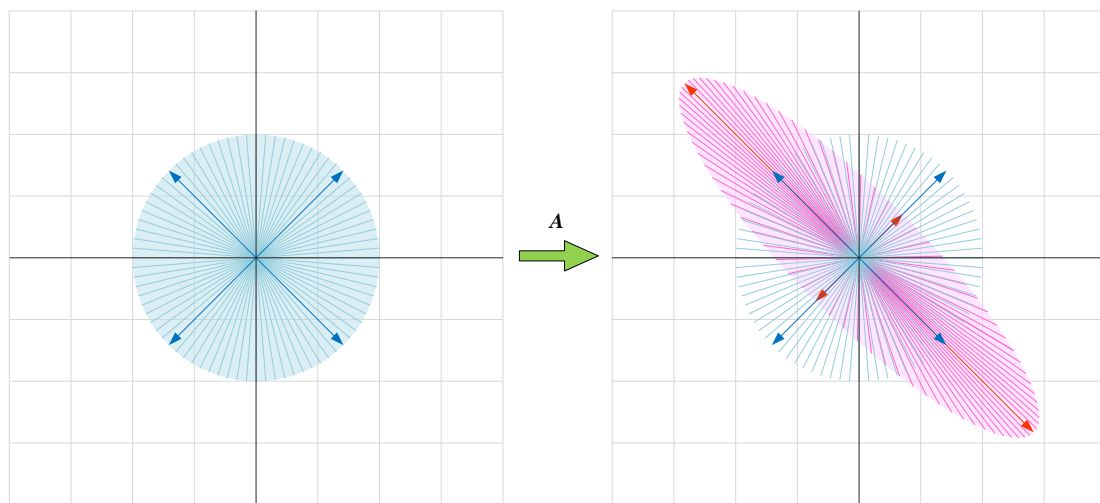


图 4. 矩阵  $\mathbf{A}$  对一系列向量的作用结果



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, 所有图片都经过后期多道工序美化。因此, 大家使用代码获得的图片可能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。

```

# Bk4_Ch13_01.py

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

A = np.array([[1.25, -0.75],
              [-0.75, 1.25]])

xx1, xx2 = np.meshgrid(np.linspace(-8, 8, 9), np.linspace(-8, 8, 9))
num_vecs = np.prod(xx1.shape);

thetas = np.linspace(0, 2*np.pi, num_vecs)

thetas = np.reshape(thetas, (-1, 9))
thetas = np.flipud(thetas);

uu = np.cos(thetas);
vv = np.sin(thetas);

fig, ax = plt.subplots()

ax.quiver(xx1,xx2,uu,vv,
          angles='xy', scale_units='xy',scale=1,
          edgecolor='none', facecolor= 'b')

plt.ylabel('$x_2$')
plt.xlabel('$x_1$')
plt.axis('scaled')
ax.set_xlim([-10, 10])
ax.set_ylim([-10, 10])
ax.grid(linestyle='--', linewidth=0.25, color=[0.5,0.5,0.5])
ax.set_xticks(np.linspace(-10,10,11));
ax.set_yticks(np.linspace(-10,10,11));
plt.show()

# Matrix multiplication
V = np.array([uu.flatten(),vv.flatten()]).T;
W = V@A;

uu_new = np.reshape(W[:,0],(-1, 9));
vv_new = np.reshape(W[:,1],(-1, 9));

fig, ax = plt.subplots()

ax.quiver(xx1,xx2,uu,vv,
          angles='xy', scale_units='xy',scale=1,
          edgecolor='none', facecolor= 'b')

ax.quiver(xx1,xx2,uu_new,vv_new,
          angles='xy', scale_units='xy',scale=1,
          edgecolor='none', facecolor= 'r')

plt.ylabel('$x_2$')
plt.xlabel('$x_1$')
plt.axis('scaled')
ax.set_xlim([-10, 10])
ax.set_ylim([-10, 10])
ax.grid(linestyle='--', linewidth=0.25, color=[0.5,0.5,0.5])
ax.set_xticks(np.linspace(-10,10,11));
ax.set_yticks(np.linspace(-10,10,11));
plt.show()

fig, ax = plt.subplots()
ax.quiver(xx1*0,xx2*0,uu,vv,
          angles='xy', scale_units='xy',scale=1,
          edgecolor='none', facecolor= 'b')

ax.quiver(xx1*0,xx2*0,uu_new,vv_new,
          angles='xy', scale_units='xy',scale=1,
          edgecolor='none', facecolor= 'r')

```

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

```
plt.ylabel('$x_2$')
plt.xlabel('$x_1$')
plt.axis('scaled')
ax.set_xlim([-2, 2])
ax.set_ylim([-2, 2])
ax.grid(linestyle='--', linewidth=0.25, color=[0.5,0.5,0.5])
ax.set_xticks(np.linspace(-2,2,5));
ax.set_yticks(np.linspace(-2,2,5));
plt.show()
```

## 13.2 旋转 → 缩放 → 旋转

根据上文所述，矩阵  $A$  的特征值分解可以写成：

$$\overset{\text{Rotate}}{A} = \overset{\text{Scale}}{V} \overset{\text{Rotate}}{A} V^{-1} \quad (4)$$

注意，如果没有特殊说明，本书中的特征向量都是单位向量。

$A$  乘任意向量是一个“旋转 → 缩放 → 旋转”顺序操作，即，

$$\overset{\text{Rotate}}{Aw} = \overset{\text{Scale}}{V} \overset{\text{Rotate}}{A} V^{-1} w \quad (5)$$

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

### 举个 $2 \times 2$ 矩阵的例子

(4) 等式右乘  $V$  得到：

$$AV = VA \quad (6)$$

将  $V$  展开写作  $[v_1, v_2]$ ：

$$A[v_1 \ v_2] = [v_1 \ v_2] \begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{bmatrix} \quad (7)$$

(7) 展开得到：

$$[Av_1 \ Av_2] = [\lambda_1 v_1 \ \lambda_2 v_2] \quad (8)$$

对于上一节给出的例子，将具体数值代入 (4)，可以得到：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix}}_A = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_V \underbrace{\begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}}_A \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{V^{-1}} \quad (9)$$

下面，我们分别讨论  $v_1$  和  $v_2$ 。

## 第一特征向量

$v_1$  为：

$$v_1 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \quad (10)$$

$A$  乘  $v_1$  得到  $Av_1$ ：

$$Av_1 = \begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/4 \\ \sqrt{2}/4 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \times \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \quad (11)$$

$\lambda_1$

可以发现，相比  $v_1$ ，得到的结果  $Av_1$  方向没有发生变化，仅仅施加缩放效果，缩放的比例为  $\lambda_1 = 1/2$ 。

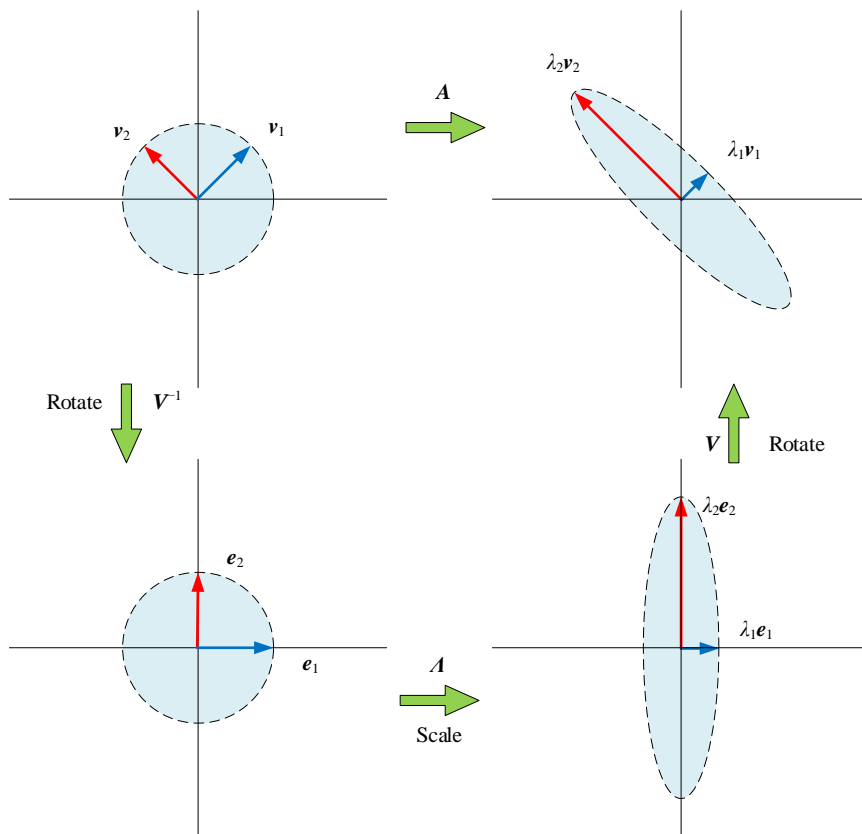


图 5. “旋转→缩放→旋转”操作

如图 5 中蓝色箭头所示，将 (4) 代入 (11)，将  $A$  拆解为“旋转→缩放→旋转”：

$$Av_1 = \overset{\text{Rotate}}{V} \overset{\text{Scale}}{A} \overset{\text{Rotate}}{V^{-1}} v_1 \quad (12)$$



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

$$\mathbf{V}^{-1}\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{e}_1 \quad (13)$$

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

$$A\mathbf{V}^{-1}\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0 \end{bmatrix} = 0.5 \underset{\lambda_1}{\mathbf{e}_1} \quad (14)$$

最后逆时针旋转  $45^\circ$ , 得到  $\mathbf{V}A\mathbf{V}^{-1}\mathbf{v}_1$ :

$$\begin{aligned} \underbrace{\mathbf{V}A\mathbf{V}^{-1}}_A \mathbf{v}_1 &= \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} 0.5 \underset{\lambda_1}{\mathbf{e}_1} \\ &= \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/4 \\ \sqrt{2}/4 \end{bmatrix} = 0.5 \underset{\lambda_1}{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}} \\ &= \lambda_1 \mathbf{v}_1 \end{aligned} \quad (15)$$

## 第二特征向量

同理, 讨论  $A$  乘  $\mathbf{v}_2$  对应的“旋转→缩放→旋转”操作。

$\mathbf{v}_2$  为:

$$\mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \quad (16)$$

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

$$A\mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 1.25 & -0.75 \\ -0.75 & 1.25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} = 2 \underset{\lambda_2}{\times} \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \quad (17)$$

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

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

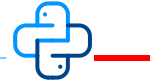
再缩放得到  $A\mathbf{V}^{-1}\mathbf{v}_2$ :

$$\underset{\text{Scale}}{A\mathbf{V}^{-1}} \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} = 2 \underset{\lambda_2}{\mathbf{e}_2} \quad (19)$$

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

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

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。

```
# Bk4_Ch13_02.py
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def visualize(X_circle, X_vec, title_txt):

    fig, ax = plt.subplots()

    plt.plot(X_circle[0,:], X_circle[1,:], 'k',
             linestyle = '--',
             linewidth = 0.5)

    plt.quiver(0,0,X_vec[0,0],X_vec[1,0],
               angles='xy', scale_units='xy',scale=1,
               color = [0, 0.4392, 0.7529])

    plt.quiver(0,0,X_vec[0,1],X_vec[1,1],
               angles='xy', scale_units='xy',scale=1,
               color = [1,0,0])

    plt.axvline(x=0, color= 'k', zorder=0)
    plt.axhline(y=0, color= 'k', zorder=0)

    plt.ylabel('$x_2$')
    plt.xlabel('$x_1$')

    ax.set_aspect(1)
    ax.set_xlim([-2.5, 2.5])
    ax.set_ylim([-2.5, 2.5])
    ax.grid(linestyle='--', linewidth=0.25, color=[0.5,0.5,0.5])
    ax.set_xticks(np.linspace(-2,2,5));
    ax.set_yticks(np.linspace(-2,2,5));
    plt.title(title_txt)
    plt.show()

theta = np.linspace(0, 2*np.pi, 100)

circle_x1 = np.cos(theta)
circle_x2 = np.sin(theta)

V_vec = np.array([[np.sqrt(2)/2, -np.sqrt(2)/2],
                  [np.sqrt(2)/2,  np.sqrt(2)/2]])

X_circle = np.array([circle_x1, circle_x2])

# plot original circle and two vectors
visualize(X_circle,V_vec,'Original')
```

```

A = np.array([[1.25, -0.75],
              [-0.75, 1.25]])

# plot the transformation of A
visualize(A@X_circle, A@V_vec, '$A$')

%% Eigen decomposition
# A = V @ D @ V.T
lambdas, V = np.linalg.eig(A)

D = np.diag(np.flip(lambdas))
V = V.T # reverse the order

print('=== LAMBDA ===')
print(D)
print('=== V ===')
print(V)

# plot the transformation of V.T
visualize(V.T@X_circle, V.T@V_vec, '$V^T$')

# plot the transformation of D @ V.T
visualize(D@V.T@X_circle, D@V.T@V_vec, '$\u039BV^T$')

# plot the transformation of V @ D @ V.T
visualize(V@D@V.T@X_circle, V@D@V.T@V_vec, '$V\u039BV^T$')

# plot the transformation of A
visualize(A@X_circle, A@V_vec, '$A$')

```

## 13.3 再谈行列式值和线性变换

计算本章第一节给出矩阵  $A$  的行列式值  $\det(A)$ :

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

本书前文提到过  $2 \times 2$  矩阵行列式值相当于几何变换前后“面积缩放系数”。

上式中  $A$  的行列式值为 1，因此几何变换后面积没有任何缩放。

这一点也可以通过特征值加以验证：

$$\begin{aligned} \det(A) &= \det(VAV^{-1}) = \det(V)\det(A)\det(V^{-1}) \\ &= \det(A)\det(VV^{-1}) = \det(A) \\ &= \lambda_1\lambda_2 = 1 \end{aligned} \quad (22)$$

图 6 给出一个正方形，内部和边缘整齐排列散点。在  $A$  的作用下，正方形以及完成“旋转→缩放→旋转”等几何变化。

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  $|A|=1$ 。

回过头来看图 4 右图旋转椭圆，它的长轴放大 2 倍，而短轴缩小至原来一半。但是，得到的椭圆面积和原来的单位圆一样。

此外，观察上式可以发现，矩阵  $A$  的行列式值等于所有特征值之积。

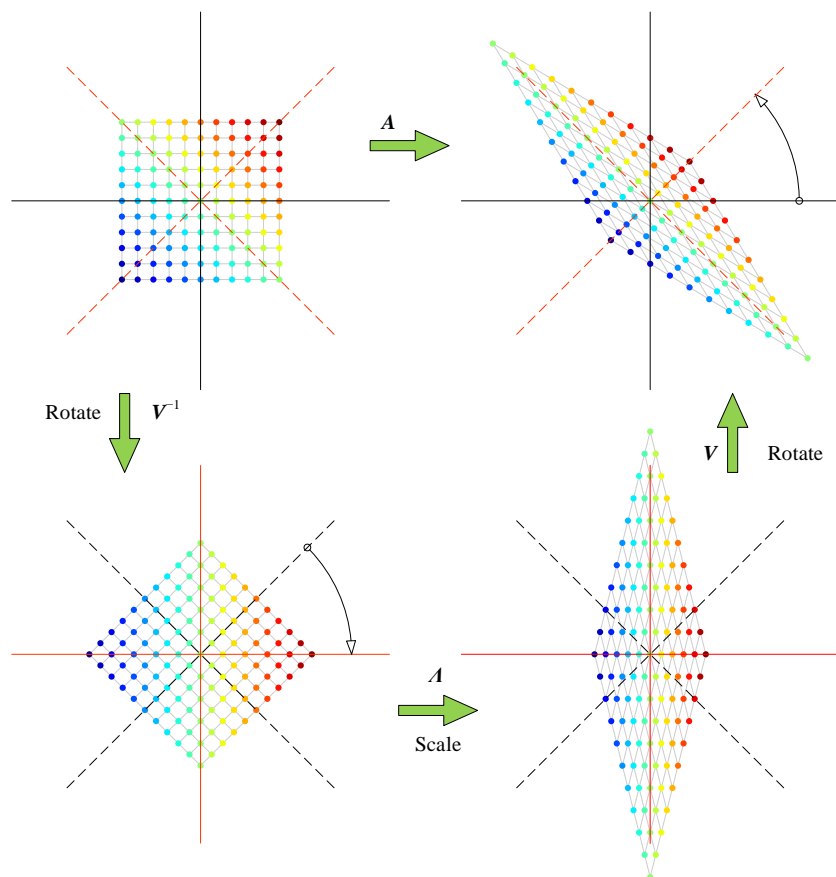


图 6. 正方形经过矩阵  $A$  线性变换

## 常见线性变换矩阵的特征值和行列式值

表 1 总结常见线性变换中特征值、行列式值关系。

观察表 1，可以发现特征值可以为正数、负数、0，甚至是复数。复数特征值都是成对出现，且共轭。下一章会专门讲解特征值分解中出现复数的情况。

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. 常见线性变换中特征值、行列式值关系

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

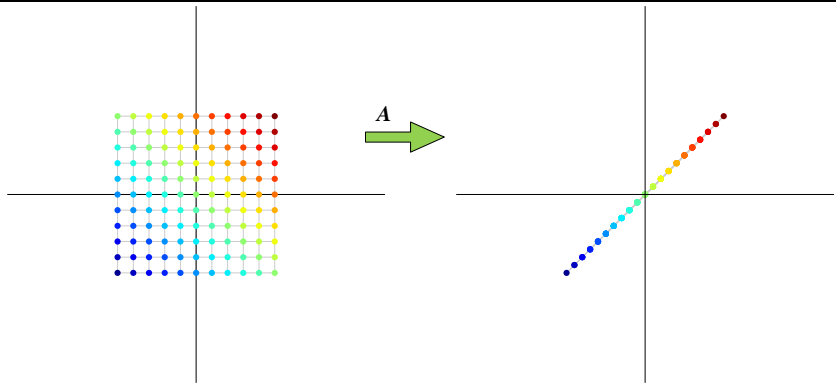
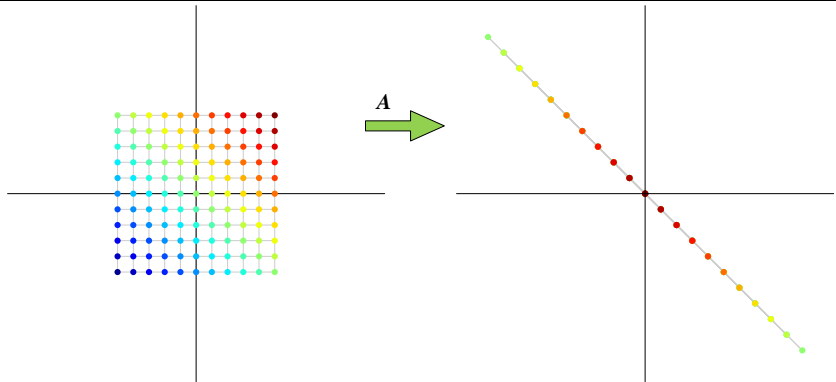
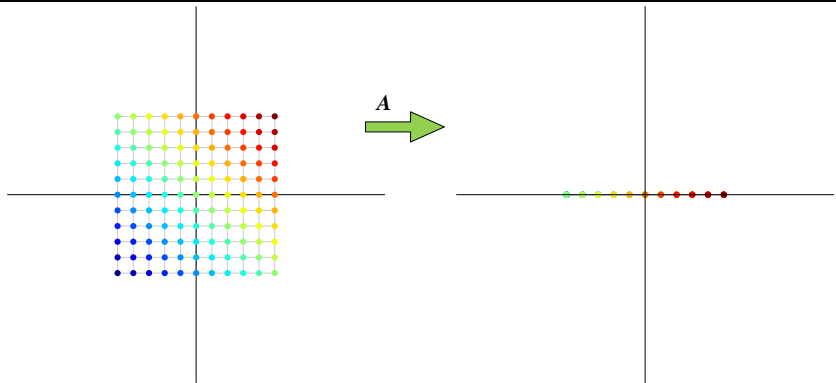
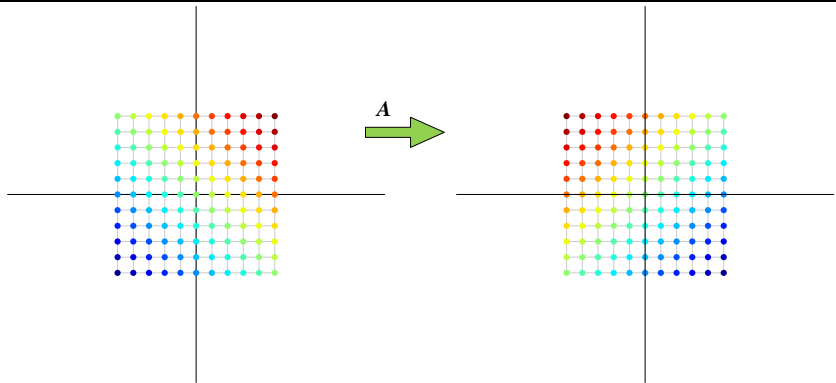
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

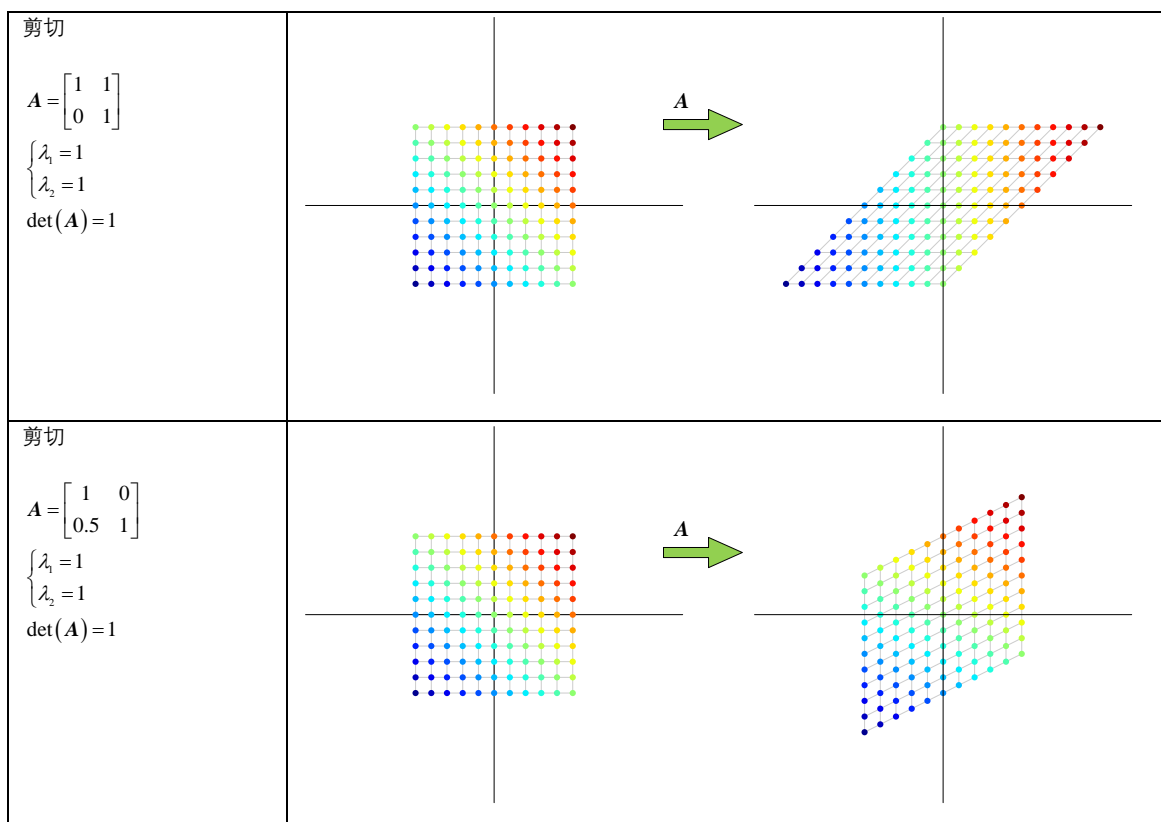
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

<p>投影</p> $A = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 \end{bmatrix}$ $\begin{cases} \lambda_1 = 1 \\ \lambda_2 = 0 \end{cases}$ $\det(A) = 0$	
<p>非正交投影</p> $A = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$ $\begin{cases} \lambda_1 = 2 \\ \lambda_2 = 0 \end{cases}$ $\det(A) = 0$	
<p>投影</p> $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ $\begin{cases} \lambda_1 = 1 \\ \lambda_2 = 0 \end{cases}$ $\det(A) = 0$	
<p>对称</p> $A = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ $\begin{cases} \lambda_1 = 1 \\ \lambda_2 = -1 \end{cases}$ $\det(A) = -1$	



## 13.4 对角化：将方阵转化为对角阵

如果选在一个非奇异矩阵  $V$  和一个对角矩阵  $D$ ，使得方阵  $A$  满足：

$$V^{-1}AV = D \quad (23)$$

则称  $A$  为**可对角化** (diagonalizable)， $V$  将  $A$  对角化。

只有可对角化的矩阵才可以进行特征值分解：

$$A = VDV^{-1} \quad (24)$$

其中，矩阵  $D$  就是特征值矩阵。

如果  $A$  可以对角化，矩阵  $A$  的平方可以写成：

$$A^2 = VDV^{-1}VDV^{-1} = VD^2V^{-1} = V \begin{bmatrix} (\lambda_1)^2 & & & \\ & (\lambda_2)^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & (\lambda_D)^2 \end{bmatrix} V^{-1} \quad (25)$$

类似地， $A$  的  $n$  次幂可以写成：

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

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

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

$$\begin{aligned} \mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{A}\mathbf{V}^T &= [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{v}_D] \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \\ \mathbf{v}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_D^T \end{bmatrix} \\ &= \lambda_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T + \lambda_2 \mathbf{v}_2 \mathbf{v}_2^T + \cdots + \lambda_D \mathbf{v}_D \mathbf{v}_D^T = \sum_{j=1}^D \lambda_j \mathbf{v}_j \mathbf{v}_j^T \\ &= \lambda_1 \mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_1 + \lambda_2 \mathbf{v}_2 \otimes \mathbf{v}_2 + \cdots + \lambda_D \mathbf{v}_D \otimes \mathbf{v}_D = \sum_{j=1}^D \lambda_j \mathbf{v}_j \otimes \mathbf{v}_j \end{aligned} \quad (27)$$

上式告诉我们为什么特征分解又称谱分解 (spectral decomposition)，因为特征值分解将矩阵拆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。

## 13.5 深入聊聊特征值

本节介绍特征值重要性质。

给定矩阵  $\mathbf{A}$ ，特征值  $\lambda$  和特征向量  $\mathbf{v}$  关系为：

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \quad (28)$$

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

$$(k\mathbf{A})\mathbf{v} = (k\lambda)\mathbf{v} \quad (29)$$

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

$$\mathbf{A}^2\mathbf{v} = \mathbf{A}(\mathbf{A}\mathbf{v}) = \mathbf{A}(\lambda\mathbf{v}) = \lambda(\mathbf{A}\mathbf{v}) = \lambda^2\mathbf{v} \quad (30)$$

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

$$\mathbf{A}^n\mathbf{v} = \lambda^n\mathbf{v} \quad (31)$$

(31) 也可以推广得到：

$$\mathbf{A}^n\mathbf{V} = \mathbf{V}\mathbf{A}^n \quad (32)$$

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



$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{v} = \frac{1}{\lambda}\mathbf{v} \quad (33)$$

矩阵  $\mathbf{A}$  的行列式值为其特征值乘积：

$$\det(\mathbf{A}) = \prod_{i=1}^D \lambda_i \quad (34)$$

上式中， $\lambda_i$  可以相等。如果任一特征值为 0，则  $\det(\mathbf{A})$  为零，这种情况相当于降维。这正是前文讲过的多维空间“平行体”和“正立方体”的体积关系。

特征向量  $\mathbf{v}_i$  和特征值  $\lambda_i$  矩阵一一对应；对于多维方阵，多个不同的特征向量可以有相同的特征值，也就是在这些特征向量  $\mathbf{v}_i$  方向上伸缩比例相同。

$\mathbf{A}$  标量积  $k\mathbf{A}$  的行列式值：

$$\det(k\mathbf{A}) = k^D \prod_{i=1}^D \lambda_i \quad (35)$$

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  $\mathbf{A}$  的形状为  $D \times D$ ， $\mathbf{A}$  的秩 (rank) 为  $r$ ，则  $\mathbf{A}$  有  $D - r$  个特征值为 0。

矩阵  $\mathbf{A}$  的迹为其特征值之和：

$$\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^D \lambda_i \quad (36)$$

我们将会在协方差矩阵的分析中用到以上结论。

## 13.6 幂法求特征值

**幂法** (power method) 可以用来求某个矩阵特征向量中模最大的特征值和特征向量。

幂法指的是，对于一个  $D \times D$  方阵  $\mathbf{A}$ ，先取任意  $D$  行一列向量  $\mathbf{x}_0$ ，然后进行如下迭代：

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &= \mathbf{A}\mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_2 &= \mathbf{A}\mathbf{x}_1 = \mathbf{A}^2\mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_3 &= \mathbf{A}\mathbf{x}_2 = \mathbf{A}^3\mathbf{x}_0 \\ &\dots \\ \mathbf{x}_n &= \mathbf{A}\mathbf{x}_{n-1} = \mathbf{A}^n\mathbf{x}_0 \end{aligned} \quad (37)$$

假设矩阵  $\mathbf{A}$  有  $D$  个线性无关的特征向量，按照模的大小排列这些特征值：

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_D| \quad (38)$$

它们对应的特征向量为：

$$\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_D \quad (39)$$

它们作为基底可以张成  $D$  维向量空间，初始向量  $\mathbf{x}_0$  可以由它们线性组合得到：

$$\mathbf{x}_0 = a_1 \mathbf{v}_1 + a_2 \mathbf{v}_2 + \dots + a_D \mathbf{v}_D \quad (40)$$

将 (40) 代入 (37) 最后一个等式，得到：

$$\mathbf{x}_n = a_1 \mathbf{A}^n \mathbf{v}_1 + a_2 \mathbf{A}^n \mathbf{v}_2 + \dots + a_D \mathbf{A}^n \mathbf{v}_D \quad (41)$$

上一节介绍，给定矩阵  $\mathbf{A}$ ，特征值  $\lambda$  对应的特征向量为  $\mathbf{v}$ ；而  $\mathbf{A}^n$  的特征值为  $\lambda^n$ ，即，

$$\mathbf{A}^n \mathbf{v} = \lambda^n \mathbf{v} \quad (42)$$

将 (31) 代入(41)，得到：

$$\mathbf{x}_n = a_1 \lambda_1^n \mathbf{v}_1 + a_2 \lambda_2^n \mathbf{v}_2 + \dots + a_D \lambda_D^n \mathbf{v}_D \quad (43)$$

整理上式，得到：

$$\mathbf{x}_n = \lambda_1^n \left( a_1 \mathbf{v}_1 + a_2 \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^n \mathbf{v}_2 + \dots + a_D \left( \frac{\lambda_D}{\lambda_1} \right)^n \mathbf{v}_D \right) \quad (44)$$

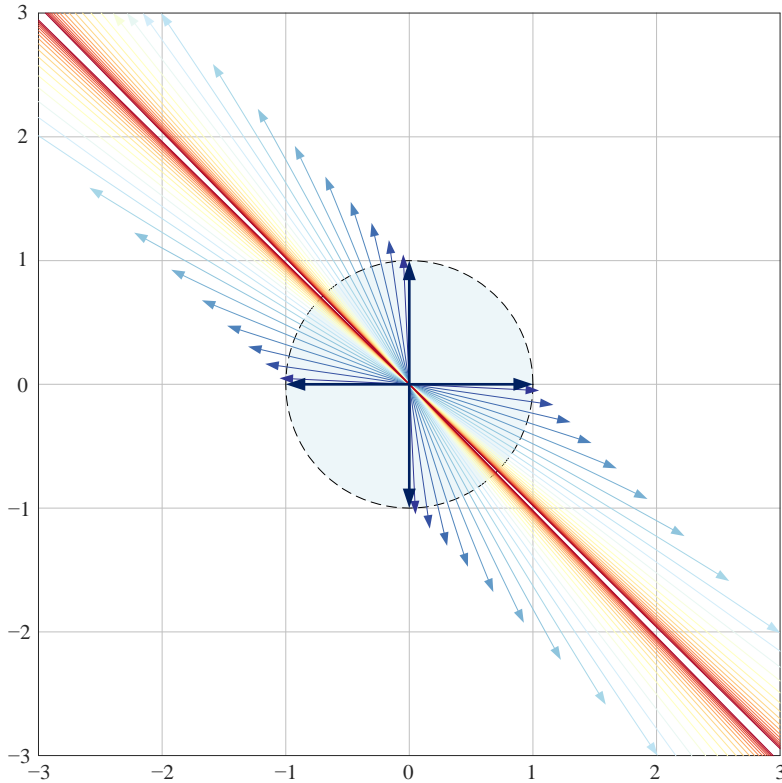


图 7. 四个向量经过幂乘收敛于最大特征值对应方向

因为  $\lambda_1$  为最大实数特征值，因此当  $n$  足够大时，(44) 收敛到：

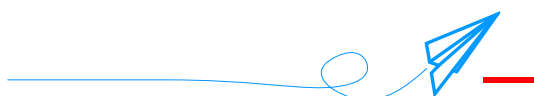
$$\mathbf{x}_n \rightarrow \lambda_1^n \mathbf{a}_1 \mathbf{v}_1 \quad (45)$$

图 7 所示为四个单位向量经过幂乘收敛于最大特征值对应方向。

实际计算时，为了避免计算过程中出现绝对值过大或过小的数参加运算，通常在每步迭代时，将用向量的  $L^\infty$  范数“归一化”处理，即：

$$\mathbf{z}_n = \frac{\mathbf{x}_n}{\|\mathbf{x}_n\|_\infty}, \quad \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{A}\mathbf{z}_n \quad (46)$$

请大家自行编程绘制图 7。



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。

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

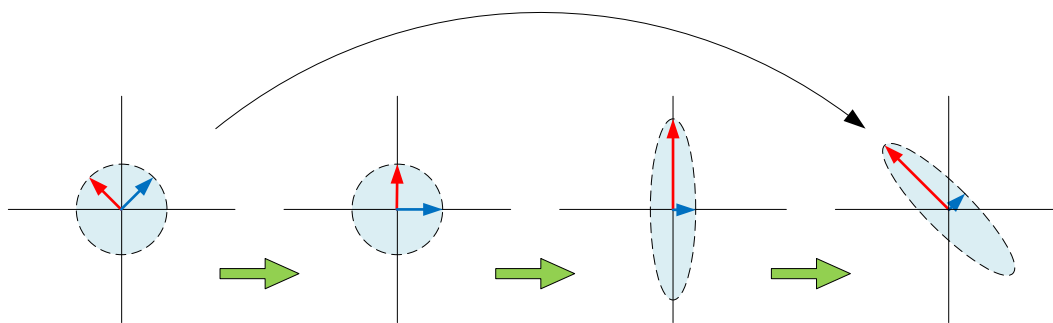


图 8. 总结本章重要内容的四副图