| | |
|---|---|
| 作者 | **生姜 DrGinger** |
| 脚本 | **生姜 DrGinger** |
| 视频 | **崔崔 CuiCui** |
| 开源学习资源 | https://github.com/Visualize-ML |
| 平台 | https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang<br>https://space.bilibili.com/3546865719052873<br>https://space.bilibili.com/513194466 |


# 11 Eigenvalue Decomposition 特征值分解

特征值是方阵“自身值”，特征向量是方阵“自身方向”

## 11.1 特征值分解

**本节你将掌握的核心技能：**

- 特征向量是在方阵线性变换下方向不变的非零向量。
- 特征值表示特征向量在变换中被缩放的倍数。
- 掌握特征多项式手解特征值分解。
- 某一特征值的所有特征向量构成一条过原点的直线。
- 某个方阵可对角化当且仅当它所有特征向量线性无关。
- 实对称矩阵的特征分解称为谱分解。

本节介绍了特征值与特征向量的基本概念，解释了特征值分解的几何意义和计算方法。特别是对于实对称矩阵的特征分解可理解为“旋转 → 缩放 → 旋转”的变换结构。

### 什么是特征值？什么是特征向量？

**特征值分解** (Eigenvalue Decomposition, EVD) 中的“特征”这个词源自的德语“eigen”一词的翻译，而“eigen”在德语中的意思是“自身的”或“固有的”。

所以，特征值分解得到的**特征值** (eigen value, characteristic value) 其实是“固有值”或“自身值”的意思；**特征向量** (eigen vector, characteristic vector) 就是“固有向量”或“自身方向”。

以方阵 $\boldsymbol{A}$ 为例，特征值分解就是找到方阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 $\lambda$、对应特征向量 $\boldsymbol{v}$，满足

$$\boldsymbol{A}@\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v} \tag{1}$$

特征向量向量 $\boldsymbol{v}$ 被 $\boldsymbol{A}$ 作用得到的向量 $\lambda\boldsymbol{v}$。

这意味着，如图 1 所示，在 $\boldsymbol{A}$ 作用下，特征向量 $\boldsymbol{v}$ 方向不变 (或正向或反向)。特征值 $\lambda$ 决定缩放，$\lambda$ 正负决定正反向调整。

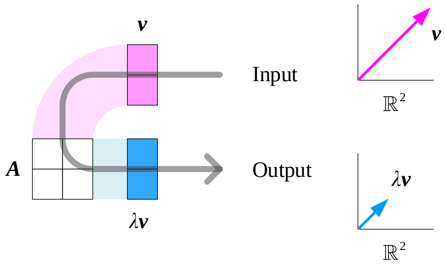


图 1．$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 形状为 $2 \times 2$

注意，特征向量一般默认为为非零向量，因为 $\boldsymbol{A0} = \boldsymbol{0}$ 对于线性映射来说意味着“原点不变“，没有探讨价值；但是，特征值可以为 0。

## 举个例子

给定 $2 \times 2$ 方阵 $\boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} \tag{2}$$

如图 2 所示，让矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对图中单位向量进行线性变换。本书前文提过，平面上的单位向量若起点位于原点，它们的终点落在单位圆的圆周上。请大家特别注意 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$ 这两个单位向量。

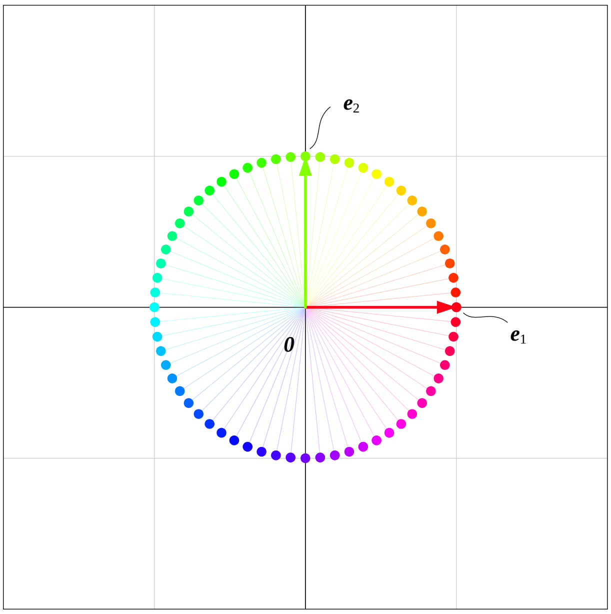


图 2．一组单位向量

如图 3 所示，$\boldsymbol{A}$ 作用于单位向量 $\boldsymbol{e}_1$，结果为 $\boldsymbol{Ae}_1$

$$\boldsymbol{Ae}_1 = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5/4 \\ -3/4 \end{bmatrix} \tag{3}$$

和 $\boldsymbol{e}_1$ 相比，$\boldsymbol{Ae}_1$ 大小、方向都发生变化。

同样，$\boldsymbol{A}$ 作用于单位向量 $\boldsymbol{e}_2$，结果为 $\boldsymbol{Ae}_2$

$$\boldsymbol{Ae}_2 = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3/4 \\ 5/4 \end{bmatrix} \tag{4}$$

和 $\boldsymbol{e}_2$ 相比，$\boldsymbol{Ae}_2$ 大小、方向也同样都发生变化。

⚠ 注意，我们之所以关注标准正交基 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 是想要看到单位正方形网格变成怎样的平行四边形网格，以及变换前后的面积变化，即行列式绝对值变化。

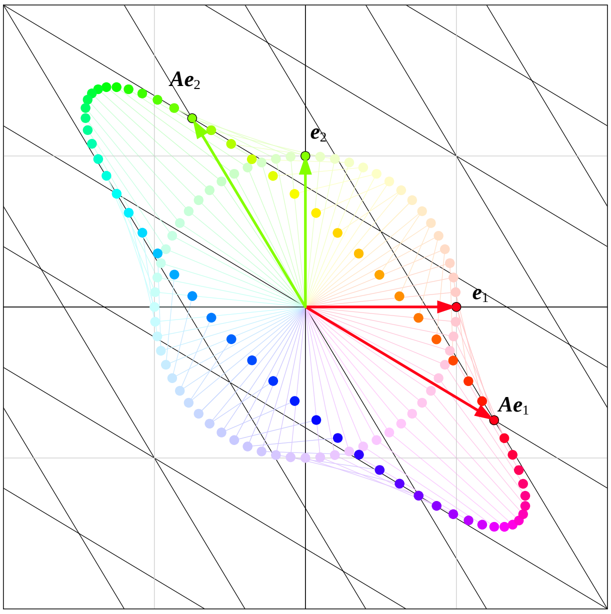


图 3. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对一组单位向量的线性变换

## 特征向量

但是仔细观察图 4，我们发现几个特殊向量，经过方阵 $\boldsymbol{A}$ 的线性变换后，它们的方向不变，仅仅长度发生缩放。

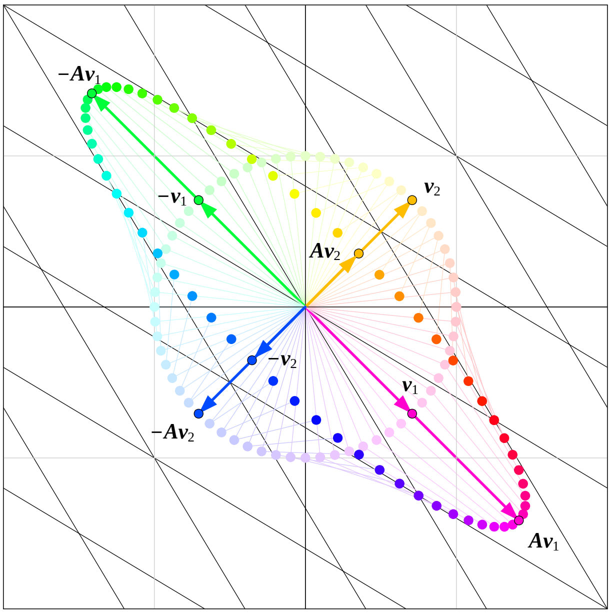


图 4．矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量

比如，单位向量 $\boldsymbol{v}_1$ (品红色)，经过 $\boldsymbol{A}$ 线性变换后为

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} @ \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}_1} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ -\sqrt{2} \end{bmatrix} = \underset{\lambda_1}{2} \times \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}_1} \tag{5}$$

也就是说

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 = \underset{\lambda_1}{2}\boldsymbol{v}_1 \tag{6}$$

这告诉我们，$\boldsymbol{v}_1$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量，对应的特征值 $\lambda_1 = 2$。

⚠ 注意，特征值、特征向量是成对匹配的。

图 4 中我们还看都，$\boldsymbol{v}_1$ (品红色) 的反向量 $-\boldsymbol{v}_1$ (绿色) 也满足

$$\boldsymbol{A} @ (-\boldsymbol{v}_1) = \underset{\lambda_1}{2}(-\boldsymbol{v}_1) \tag{7}$$

进一步给定非零标量 $k$，下式都成立

$$\boldsymbol{A} @ (k\boldsymbol{v}_1) = \underset{\lambda_1}{2}(k\boldsymbol{v}_1) \tag{8}$$

上式告诉我们，给定特征值对应的**特征向量不唯一**。

如图 5 所示，特征向量的任意非零标量 $k$ 缩放结果仍是该特征值对应的特征向量，因此所有特征向量构成一条过原点的直线。

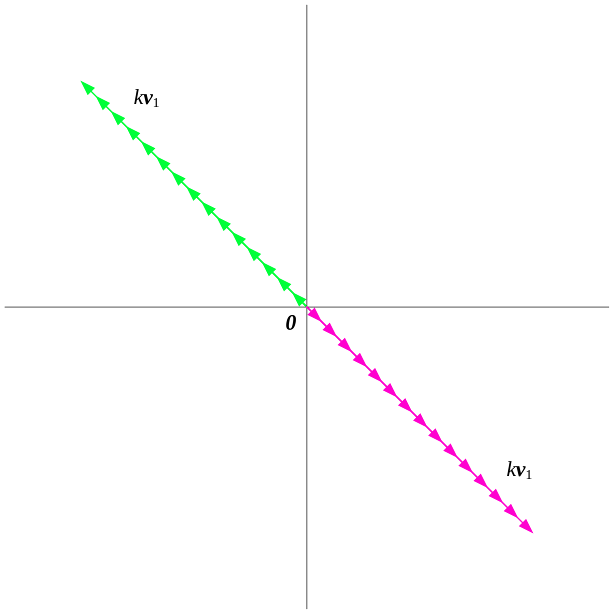


图 5．特征向量不唯一

注意，没有特殊说明的话，本书的特征向量都经过单位化；也就是说本书的特征向量都是方向向量(单位向量)。

图 4 中我们还发现另外一个向量 $\boldsymbol{v}_2$ (橙色)，经过 $\boldsymbol{A}$ 线性变换后为

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} @ \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}_2} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/4 \\ \sqrt{2}/4 \end{bmatrix} = \underset{\lambda_2}{0.5} \times \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{v}_2} \tag{9}$$

也就是说

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 = \underset{\lambda_2}{0.5}\boldsymbol{v}_2 \tag{10}$$

这告诉我们，$\boldsymbol{v}_2$ 也是 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量，对应的特征值 $\lambda_2 = 0.5$。

大家应该发现，图 4 单位圆变成了旋转椭圆！这是为什么？这个几何变换背后又展现怎样的数学原理？这是下一章要讨论的话题。

## 手解特征值分解

下面让我们聊聊如何手解特征值分解。

把 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}$ 整理成

$$(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I})@\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \tag{11}$$

由于 $\boldsymbol{v}$ 为非零单位向量，经过 $\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I}$ 降维后，线性变换得到零向量；因此，$\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I}$ 的行列式为 0，即

$$\det(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I}) = 0 \tag{12}$$

对于 (2) 中方阵 $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}$ 为

$$\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}=\begin{bmatrix}5/4 & -3/4\\ -3/4 & 5/4\end{bmatrix}-\lambda\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5/4-\lambda & -3/4\\ -3/4 & 5/4-\lambda\end{bmatrix} \tag{13}$$

$\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})$ 对应如下多项式

$$\lambda^2-\frac{5}{2}\lambda+1 \tag{14}$$

上式叫做特征多项式 (characteristic polynomial)。

令特征多项式为 0，

$$\lambda^2-\frac{5}{2}\lambda+1=0 \tag{15}$$

我们可以求解得到特征值。

如图 6 所示，如果满足 $b^2-4ac\geq 0$，二次方程 $ax^2+bx+c=0$ 有两个实数根

$$x_{1,2}=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a} \tag{16}$$

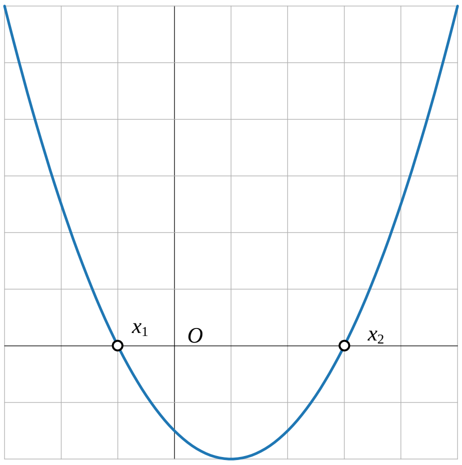


图 6. 二次函数和二次方程的根

据此，(15) 的两个特征值为

$$\lambda_1=2,\quad \lambda_2=1/2 \tag{17}$$

对于 $\lambda_1=2$，令 $\boldsymbol{v}_1=[x_1, x_2]^{\mathrm{T}}$ 带入 (11)，得到

$$\left(\begin{bmatrix}5/4 & -3/4\\ -3/4 & 5/4\end{bmatrix}-2\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\right)@\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\boldsymbol{0} \tag{18}$$

这就是本书前文提到的齐次线性方程组。

简单回顾一下，齐次线性方程组是所有常数项全为零的线性方程组；也就是说，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 中，$\boldsymbol{b}$ 为零向量，即每个方程的右边都是零。这样的方程组永远至少有一个解，就是所有未知数都为零的“零解”，即零向量。除了零解 (零向量)，齐次线性方程组还可能有无穷多个非零解。

整理 (18) 得到

$$\begin{bmatrix} -3/4 & -3/4 \\ -3/4 & -3/4 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{0} \tag{19}$$

然后得到如下等式

$$x_1 + x_2 = 0 \tag{20}$$

如图 7 所示，任何在这条过原点的直线上的 (非零) 向量都是特征值 $\lambda_1 = 2$ 对应的特征向量。

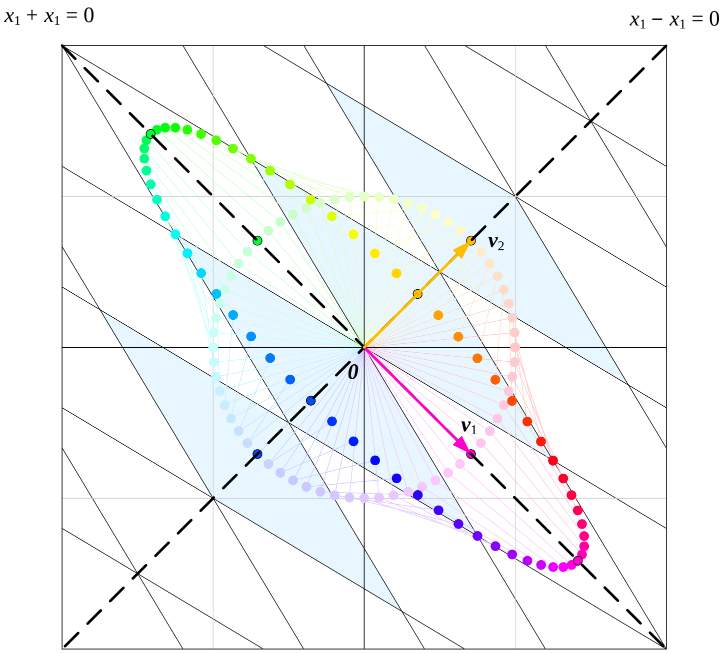


图 7．两条（过原点的）直线

我们选择第四象限的单位向量作为特征值

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{21}$$

⚠ 注意，选择这个 $\boldsymbol{v}_1$ 作为特征向量是为了让 $\boldsymbol{v}_1$ (180 度内) 逆时针领先 $\boldsymbol{v}_2$，这样让 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 的行列式为正。

对于 $\lambda_2 = 0.5$，令 $\boldsymbol{v}_2 = [x_1, x_2]^{\mathrm{T}}$ 带入 (11)，得到

$$\left( \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) @ \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{0} \tag{22}$$

整理 (22) 得到

$$\begin{bmatrix} 3/4 & -3/4 \\ -3/4 & 3/4 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{0} \tag{23}$$

然后得到如下等式

$$x_1 - x_2 = 0 \tag{24}$$

任何在这条过原点的直线上的 (非零) 向量都是特征值 $\lambda_2 = 0.5$ 对应的特征向量。

选择直线在第一象限的单位向量作为 $\boldsymbol{v}_2$

$$\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \tag{25}$$

如图 7 所示，大家是否发现，$x_1 + x_2 = 0$、$x_1 - x_2 = 0$ 这两条线过原点，且恰好在平行四边形网格线的交点。

### 写成矩阵乘法形式

到目前，我们已经得到两个矩阵乘法

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 &= \lambda_1 \boldsymbol{v}_2 \\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 &= \lambda_2 \boldsymbol{v}_2 \end{aligned} \tag{26}$$

特征值分解是一种矩阵分解 (就是把矩阵写成若干矩阵连乘)；大家可能会问，我们怎么没看到特征值分解有这种形式呢？

还是用到矩阵乘法第三视角，把 (26) 这两个矩阵乘法按次序写成

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \boldsymbol{v}_1 & \lambda_2 \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} \tag{27}$$

进一步整理

$$\boldsymbol{A}\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}} \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{28}$$

回忆本书前文介绍过的，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 右侧乘对角方阵，对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 列向量完成缩放。

于是，

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda} \tag{29}$$

**如果方阵 $\boldsymbol{V}$ 满秩** ($\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 线性无关)，$\boldsymbol{V}$ 存在逆矩阵，我们可以把 $\boldsymbol{A}$ 写成

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{-1} \tag{30}$$

到这，我们便得到了大家想要看到的矩阵分解形式。

能写成 (30) 这种分解形式的矩阵叫可对角化矩阵 (diagonalizable matrix)。

⚠ 注意，对于任意实数方阵 $\boldsymbol{A}$，存在特征值、特征向量不代表可以对角化。刚才提到的，特征向量线性无关就是重要的条件 (即 $\boldsymbol{V}$ 可逆)。需要注意的是，方阵 $\boldsymbol{A}$ 列向量线性无关**不代表** $\boldsymbol{A}$ 的特征向量线性无关！

表 1 总结是常见的以方阵为前提的矩阵运算和矩阵分解。

⚠ 注意，大家不需要死记硬背表 1。

表 1．以方阵为前提的矩阵运算

| 运算 | 说明 |
| --- | --- |
| 矩阵行列式 | 行列式仅对方阵定义，用于判断矩阵是否可逆（非奇异）等重要性质 |
| 矩阵的迹 | 矩阵的迹是方阵主对角线元素的总和，反映了矩阵线性变换整体的“缩放效应”或特征值的总和 |
| 矩阵的逆 | 仅当矩阵是方阵且行列式非零时，逆矩阵才存在。非方阵可以求其伪逆 |
| 矩阵的幂 | 矩阵的整数次幂，如 $\boldsymbol{A}^n$，通常要求矩阵是方阵，否则矩阵乘法无法进行 |
| 特征值分解 | 特征值分解仅仅适用于方阵 |
| 谱分解 | 谱分解仅仅适用于实对称方阵 |
| 对角化 | 方阵是对角化的前提，即通过相似变换将矩阵转化为对角矩阵 |
| LU 分解 | 将方阵分解为下三角矩阵和上三角矩阵 |
| Cholesky 分解 | 正定矩阵（对称方阵为前提）可以进行 Cholesky 分解 |

## 旋转 → 缩放 → 旋转

把图 2 对应的特征值、特征向量带入 (30)

$$\boldsymbol{A}=\underbrace{\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}}\underbrace{\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 1/2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}}\underbrace{\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2\\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{-1}} \tag{31}$$

大家是否惊奇地发现，上式中的 $\boldsymbol{V}$ 正是我们本书前文讲解过的旋转矩阵！

而更重要的是 $\boldsymbol{V}$ 是正交矩阵，所以

$$\boldsymbol{V}^{-1}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{32}$$

也就是说，本例中 $\boldsymbol{A}$ 特征值分解结果的几何变换为“旋转 → 缩放 → 旋转”。

产生这种特殊的变换的原因是因为 $\boldsymbol{A}$ 是对称矩阵！

而对称矩阵的特征值分解有自己的名字——谱分解 (spectral decomposition)！

这是我们下一节要讲的话题！

⚠ 注意，非对称矩阵的特征值分解不是“旋转 → 缩放 → 旋转”！

## 编程计算特征值分解

代码 1 完成特征值分解。下面聊聊其中关键语句。

ⓐ 用 NumPy 里的 linalg.eig 这个函数来计算矩阵 A 的“特征值”和“特征向量”。用 numpy.diag() 把前面提取出来的两个特征值变成一个对角方阵。

ⓑ 从特征值列表中取出第一个特征值。

ⓒ 从特征向量矩阵 V 中取出第一列，也就是第一个特征向量，注意这里用了双中括号 [:, [0]] 是为了让它保持二维数组列向量的形式。

ⓓ 和 ⓔ 对第二组特征值、特征向量完成相同的操作。

ⓕ 检验特征值分解结果。注意，本例中 $\boldsymbol{V}$ 可逆，因此 $\boldsymbol{A}$ 可以对角化。

代码 1. 特征值分解 | LA_08_01_01.ipynb

```python
## 初始化
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

## 构造矩阵
A = np.array([[1.25,-0.75],
              [-0.75,1.25]])

## 特征值分解
lambdas, V = np.linalg.eig(A)       # a
Lambda = np.diag(lambdas)

## 第一组特征值、特征向量
# 特征值
lambda_1 = lambdas[0]               # b
# 特征向量
v_1 = V[:,[0]]                      # c
A @ v_1
lambda_1 * v_1

## 第二组特征值、特征向量
# 特征值
lambda_2 = lambdas[1]               # d

# 特征向量
v_2 = V[:,[1]]                      # e
A @ v_2
lambda_2 * v_2

## 特征值分解
V @ Lambda @ np.linalg.inv(V)       # f
```

请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

**Q1** 手算如下矩阵的特征值分解，并用 Python 验证。

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{bmatrix}$

**Q2** 指出 **Q1** 中哪些方阵可以对角化。