什么是特征向量和特征值?

Vincent Spruyt

2014/03

摘要

本文以直观的方式解释了什么是特征向量和特征值。此外，我们以一个简单的 2×2 矩阵为例，手动进行特征分解。

目录

1 序言

特征向量和特征值在计算机视觉和机器学习中有着广泛的应用。众所周知的例子是用于降维的主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 或用于人脸识别的特征脸 (EigenFaces)。特征向量和特征值的一个有趣的用法也在我关于误差椭圆 (error ellipses) 的文章中说明。此外，特征分解形成协方差矩阵的几何解释的基础，在最近的一篇文章中讨论。在本文中，我将温和地介绍这个数学概念，并将展示如何手动获得二维方阵的特征分解。

特征向量是当对其应用线性变换时其方向保持不变的向量。考虑下面的图像，其中显示了三个向量。绿色正方形仅用于说明应用于这三个向量中的每个向量的线性变换。

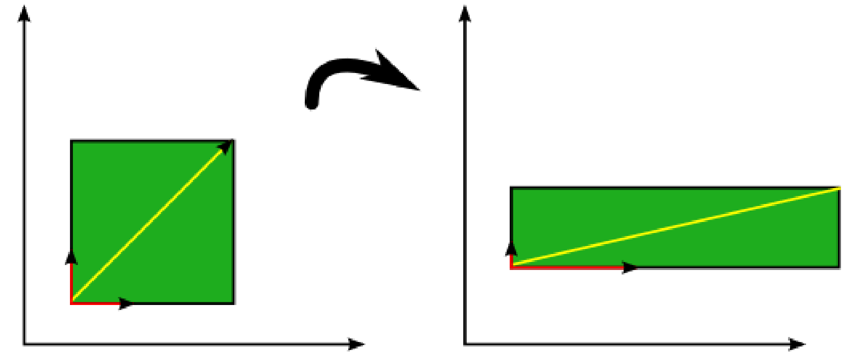

图 1：当对特征向量应用线性变换 (例如缩放) 时，特征向量 (红色) 不会改变方向。其他向量 (黄色) 则会。

这种情况下的变换是一个简单的缩放，在水平方向上因子 2，在垂直方向上因子 0.5，这样变换矩阵 A 被定义为：

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}.$$

然后通过将此变换应用为 $\vec{v}\prime = A\vec{v}$，对向量 $\vec{v} = (x, y)$ 进行缩放。上图显示一些向量的方向 (以红色显示) 不受此线性变换的影响。这些向量被称为变换的特征向量，并且唯一地定义了方阵 A。这种唯一的、确定的关系正是这些向量被称为“特征向量”的原因 (特征 (eigen) 在德语中的意思是“特定 (specific)”)。

一般来说，矩阵 A 的特征向量 $\vec{v}$ 是下列向量：

$$A\vec{v} = \lambda\vec{v} \tag{1}$$

其中 λ 是称为“特征值 (eigenvalue)”的标量值。这意味着向量 $\vec{v}$ 上的线性变换完全由 λ 定义。

我们可以将方程 (1) 改写如下：

$$A\vec{v} - \lambda\vec{v} = 0 \Rightarrow \vec{v}(A - \lambda I) = 0, \tag{2}$$

其中 I 是与 A 相同维度的单位矩阵。

但是，假设 $\vec{v}$ 不是空向量，只有当 $(A - \lambda I)$ 不可逆时，才能定义方程 (2)。如果一个方阵是不可逆的，那就意味着它的行列式 (determinant) 必须等于零。因此，要找到 A 的特征向量，我们只需求解以下方程：

$$\det(A - \lambda I) = 0. \tag{3}$$

在下面的章节中，我们将通过求解方程 (3) 来确定矩阵 A 的特征向量和特征值。在本例中，矩阵 A 的定义如下：

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}. \tag{4}$$

2 计算特征值

为了确定本例的特征值，我们用方程 (4) 代替方程 (3) 中的 A，得到：

$$\det \begin{pmatrix} 2-\lambda & 3 \\ 2 & 1-\lambda \end{pmatrix} = 0. \tag{5}$$

计算行列式得出：

$$(2-\lambda)(1-\lambda) - 6 = 0 \Rightarrow 2 - 2\lambda - \lambda - \lambda^2 - 6 = 0 \Rightarrow \lambda^2 - 3\lambda - 4 = 0. \tag{6}$$

为了在 λ 中求解这个二次方程，我们找到了判别式：

$$D = b^2 - 4ac = (-3)^2 - 4 * 1 * (-4) = 9 + 16 = 25.$$

由于判别式是严格正的，这意味着 λ 存在两个不同的值：

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \tfrac{-b-\sqrt{D}}{2a} = \tfrac{3-5}{2} = -1, \\ \lambda_2 &= \tfrac{-b+\sqrt{D}}{2a} = \tfrac{3+5}{2} = \ \ 4. \end{aligned} \tag{7}$$

现在我们已经确定了两个特征值 λ_1 和 λ_2。请注意，大小为 $N \times N$ 的方阵总是正好有 N 个特征值，每个特征值都有相应的特征向量。特征值指定特征向量的大小。

3 计算第一特征向量

我们现在可以通过将方程 (7) 中的特征值插入最初定义问题的方程 (1) 来确定特征向量。然后通过求解这个方程组找到特征向量。

我们首先对特征值 λ_1 进行此操作，以便找到相应的第一特征向量：

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{11} \\ x_{12} \end{bmatrix} = -1 \begin{bmatrix} x_{11} \\ x_{12} \end{bmatrix}.$$

因为这只是方程组的矩阵表示法，我们可以用它的等价形式来写：

$$\begin{cases} 2x_{11} + 3x_{12} = -x_{11} \\ 2x_{11} + x_{12} = -x_{12} \end{cases} \tag{8}$$

并且作为 x_{12} 的函数求解第一个方程，得到：

$$x_{11} = -x_{12}. \tag{9}$$

由于特征向量只是表示一个方向 (对应的特征值表示幅度)，所以特征向量的所有标量倍数都是与该特征向量平行的向量，因此是等价的 (如果我们将向量归一化，它们都是相等的)。因此，不必进一步求解上述方程组，我们可以自由地为 x_{11} 或 x_{12} 选择一个实值，并使用方程 (9) 确定另一个实值。

对于这个例子，我们任意选择 $x_{12} = 1$，这样 $x_{11} = -1$。因此，对应于特征值 λ_1 的特征向量为

$$\vec{v}_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{10}$$

4 计算第二特征向量

第二特征向量的计算类似于第一特征向量所需的计算；我们现在将特征值 $\lambda_2 = 4$ 代入方程 (1)，得到：

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{21} \\ x_{22} \end{bmatrix} = 4 * \begin{bmatrix} x_{21} \\ x_{22} \end{bmatrix}. \tag{11}$$

写为方程组，相当于：

$$\begin{cases} 2x_{21} + 3x_{22} = 4x_{21} \\ 2x_{21} + x_{22} = 4x_{22} \end{cases} \tag{12}$$

将第一个方程作为 x_{21} 的函数求解，结果如下：

$$x_{22} = \frac{3}{2} x_{21} \tag{13}$$

然后我们任意选择 $x_{21} = 2$，并找到 $x_{22} = 3$。因此，对应于特征值 $\lambda_2 = 4$ 的特征向量为

$$\vec{v}_2 = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}. \tag{14}$$

5 结论

本文综述了特征向量和特征值的理论概念。这些概念在计算机视觉和机器学习中有着重要的应用，如 PCA 降维，特征人脸识别等。

If you’re new to this blog, don’t forget to subscribe, or follow me on twitter!