

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 https://space.bilibili.com/3546865719052873 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”

特征值分解帮我们找到方阵的特征向量和特征值；而特征向量可以理解为方阵的“自身方向”，特征值可以立即为“自身值”。我们很快就会在下一章看到特征值分解将在主成分分析算法的用途。

请特别注意，实对称矩阵的特征值分解有一个专门的名字，叫做“谱分解”；这是因为像格拉姆矩阵、协方差矩阵、线性相关性系数矩阵、无向图的邻接矩阵和拉普拉斯矩阵等，都是常见的实对称矩阵。

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 A 为例，特征值分解就是找到方阵 A 的特征值 λ 、对应特征向量 v ，满足

$$A \cdot v = \lambda v \quad (1)$$

特征向量 v 被 A 作用得到的向量 λv 。

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

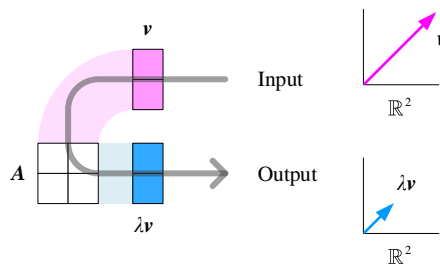


图 1. $Ax = y$ ，矩阵 A 形状为 2×2

⚠ 注意，特征向量一般默认为非零向量，因为 $A0 = 0$ 对于线性映射来说意味着“原点不变”，没有探讨价值；但是，请大家特别注意，特征值可以为 0。

举个例子

给定 2×2 方阵 A

$$A = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} \quad (2)$$

如图 2 所示，让矩阵 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。让我们聊聊矩阵 A 对 e_1 、 e_2 这两个单位向量的线性变换。

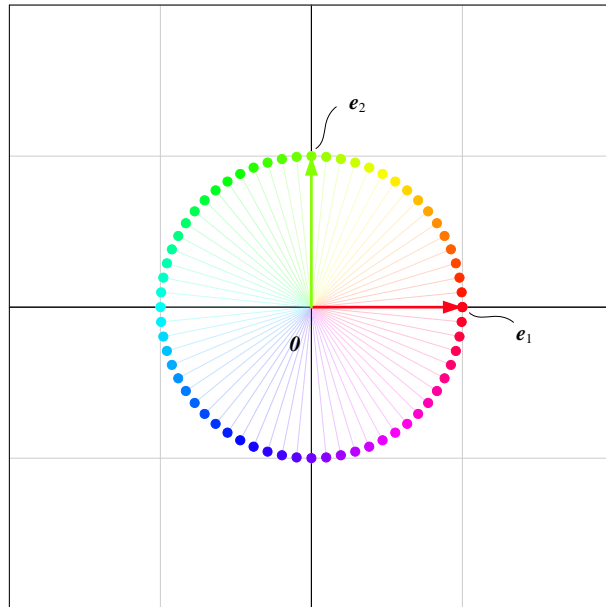


图 2. 一组单位向量

如图 3 所示, A 作用于单位向量 e_1 , 结果为 Ae_1

$$Ae_1 = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5/4 \\ -3/4 \end{bmatrix} \quad (3)$$

和 e_1 相比, Ae_1 大小、方向都发生变化。

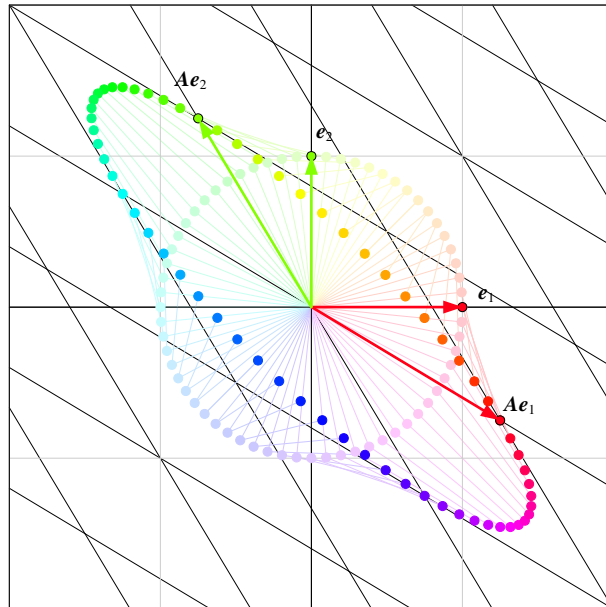
同样, A 作用于单位向量 e_2 , 结果为 Ae_2

$$Ae_2 = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3/4 \\ 5/4 \end{bmatrix} \quad (4)$$

和 e_2 相比, Ae_2 大小、方向也同样都发生变化。

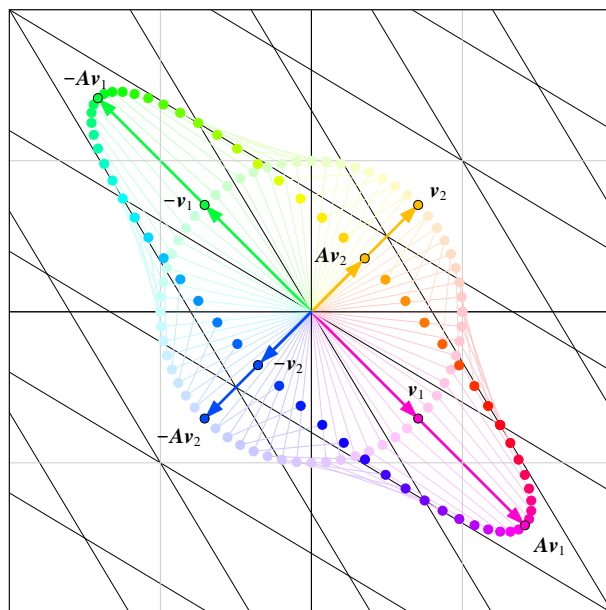
⚠ 注意, 我们之所以关注标准正交基 $[e_1, e_2]$ 是想要看到单位正方形网格变成怎样的平行四边形网格, 以及变换前后的面积变化, 即行列式绝对值变化。

? 请大家计算 A 的行列式。

图 3. 矩阵 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 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 A 的特征向量

比如，单位向量 v_1 (品红色)，经过 A 线性变换后为

$$Av_1 = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} @ \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{v_1} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ -\sqrt{2} \end{bmatrix} = \underbrace{2}_{\lambda_1} \times \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{v_1} \quad (5)$$

也就是说

$$A \underset{\lambda_1}{v_1} = 2 \underset{\lambda_1}{v_1} \quad (6)$$

这告诉我们， v_1 是 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 中我们还看到， v_1 (品红色) 的反向量 $-v_1$ (绿色) 也满足

$$A @ (-v_1) = 2(-v_1) \quad (7)$$

进一步给定非零标量 k ，下式都成立

$$A @ (kv_1) = 2(kv_1) \quad (8)$$

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 $\lambda_1 = 2$ 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。

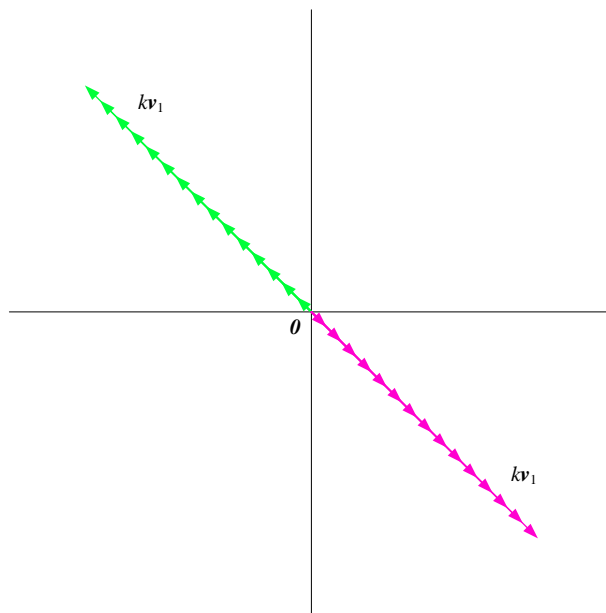


图 5. 特征向量不唯一

⚠ 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 v_2 (橙色)，经过 A 线性变换后为


$$A v_2 = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix} @ \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{v_2} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/4 \\ \sqrt{2}/4 \end{bmatrix}}_{\lambda_2} = 0.5 \times \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{v_2} \quad (9)$$

也就是说

$$A \underset{\lambda_2}{v_2} = 0.5 v_2 \quad (10)$$

这告诉我们， v_2 也是 A 的特征向量，对应的特征值 $\lambda_2 = 0.5$ 。

 请大家在图 5 上画出 $\lambda_2 = 0.5$ 这个特征值对应的特征向量所在直线。

 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？这是本书第 13 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 $Av = \lambda v$ 整理成

$$(A - \lambda I) @ v = 0 \quad (11)$$

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

$$\det(A - \lambda I) = 0 \quad (12)$$

对于 (2) 中方阵 A ， $A - \lambda I$ 为

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

$\det(A - \lambda I)$ 对应如下多项式

$$\lambda^2 - \frac{5}{2}\lambda + 1 \quad (14)$$

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

令特征多项式为 0，

$$\lambda^2 - \frac{5}{2}\lambda + 1 = 0 \quad (15)$$

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

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

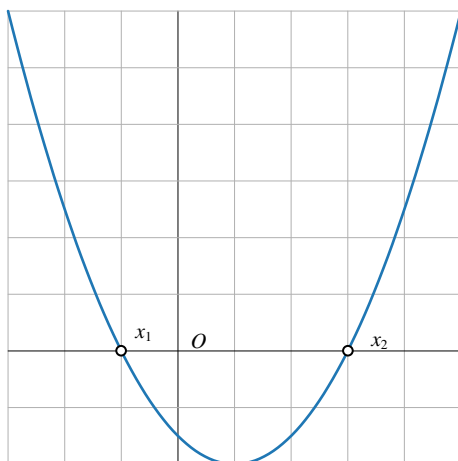


图 6. 二次函数和二次方程的根

据此，(15) 的两个特征值为

$$\lambda_1 = 2, \quad \lambda_2 = 1/2 \quad (17)$$

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

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

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， $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 中， \mathbf{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

$$\begin{bmatrix} -3/4 & -3/4 \\ -3/4 & -3/4 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (19)$$

然后得到如下等式

$$x_1 + x_2 = 0 \quad (20)$$

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。

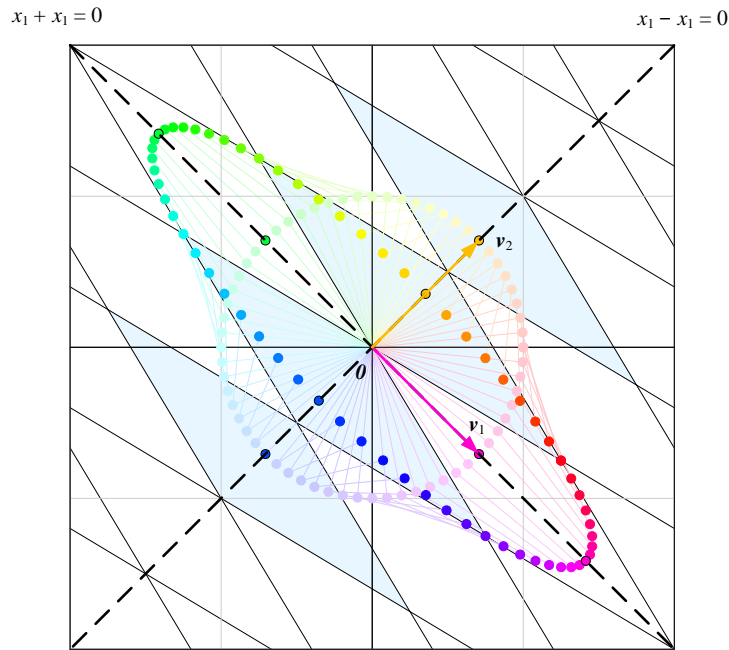


图 7. 两条（过原点的）直线

我们选择第四象限的单位向量作为特征值

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \quad (21)$$

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

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

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

整理 (22) 得到

$$\begin{bmatrix} 3/4 & -3/4 \\ -3/4 & 3/4 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (23)$$

然后得到如下等式

$$x_1 - x_2 = 0 \quad (24)$$

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 \mathbf{v}_2

$$\mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \quad (25)$$

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

$$\begin{aligned} A\mathbf{v}_1 &= \lambda_1\mathbf{v}_1 \\ A\mathbf{v}_2 &= \lambda_2\mathbf{v}_2 \end{aligned} \quad (26)$$

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, 我们怎么没看到矩阵分解有这种形式呢?

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

$$[A\mathbf{v}_1 \quad A\mathbf{v}_2] = [\lambda_1\mathbf{v}_1 \quad \lambda_2\mathbf{v}_2] \quad (27)$$

进一步整理

$$A[\underbrace{\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2}_{\mathbf{V}}] = [\underbrace{\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2}_{\mathbf{V}}] \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \quad (28)$$

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

于是,

$$A\mathbf{V} = \mathbf{V}\mathbf{A} \quad (29)$$

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

$$A = \mathbf{V}\mathbf{A}\mathbf{V}^{-1} \quad (30)$$

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 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 \mathbf{V} 可逆)。需要注意的是, 方阵 A 列向量线性无关 **不代表** A 的特征向量线性无关!

旋转 → 缩放 → 旋转

把图 2 对应的特征值、特征向量带入 (30)

$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{V}} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{V}^{-1}} \quad (31)$$

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

而更重要的是 \mathbf{V} 是正交矩阵, 所以

$$\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{V}^T \quad (32)$$

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

产生这种特殊的变换的原因是因为 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 \rightarrow 缩放 \rightarrow 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。

- a 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。
- b 从特征值列表中取出第一个特征值。
- c 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。
- d 和 e 对第二组特征值、特征向量完成相同的操作。
- f 检验特征值分解结果。注意，本例中 V 可逆，因此 A 可以对角化。

代码 1. 特征值分解 |  LA_08_01_01.ipynb

```

## 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
a lambda, V = np.linalg.eig(A)
  Lambda = np.diag(lambda)

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

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

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

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

```



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 变成验证。

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

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

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

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

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

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

Q2 指出 **Q1** 中哪些方阵可以对角化。