特徵值與特徵向量

定義：

某向量 $\mathbf{k}$，
$\mathbf{A}$ 為變異數—共變數矩陣，
若向量 $\mathbf{k}$ 被限制為單位長度，亦即在 $\mathbf{k'k} = 1$ 的條件下，則

使 $\lambda = \max(\mathbf{k'Ak})$ 代表變異數的極大，

則求函數 $F = \mathbf{k'Ak} - \lambda(\mathbf{k'k} - 1)$ 的極大化，必須取 F 的第一階導數，則

得 $\mathbf{Ak} = \lambda\mathbf{k}$ 或 $(\mathbf{A} - \lambda\,\mathbf{I})\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ；

因此，為了解上述函數的解，必須使λ符合下列條件：

$$|\,\mathbf{A} - \lambda\,\mathbf{I}\,| = \mathbf{0}$$ ，則稱

λ 為**特徵值**（eigenvalue），$\mathbf{k}$ 為**特徵向量**(eigenvector)；

$|\,\mathbf{A} - \lambda\,\mathbf{I}\,| = \mathbf{0}$ 為 $\mathbf{A}$ 矩陣的**特徵方程式**（eigen equation 或 characteristic equation)。

若上述 $\mathbf{A}$ 矩陣為 m x m 的滿秩（full rank）矩陣，則解此一方程式後會獲得 m 個特徵值（又稱作「**潛在根**」(latent root)）以及 m 個相對應的特徵向量；若 $\mathbf{A}$ 矩陣為缺秩（deficient rank）的方陣，即 R（$\mathbf{A}$）< m，則其中會有（m – r）個值為 0 的特徵值，及其相對應的 r 個特徵向量。

特性：

1.方陣 $\mathbf{A}$ 的 m 個特徵值的「積和」(sum of products)，等於方陣 $\mathbf{A}$ 的行列式值；亦即

$$\prod_{i=1}^{m} \lambda_i = |\,\mathbf{A}\,|$$

2.方陣 $\mathbf{A}$ 的 m 個特徵值之和，等於方陣 $\mathbf{A}$ 的跡 (trace)；亦即

$$\mathrm{tr}\,[\,\mathbf{A}\,] = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i$$

3.求特徵向量正規化（normalized）為 1，亦即是求「將特徵向量的各元素值除以各元素值平方和的平方根」之謂。例如：

$$\mathbf{k_1'k_1} = [1\ 2\ 1]\begin{bmatrix}1\\2\\1\end{bmatrix} = 6 \qquad |\,\mathbf{k_1}\,| = \sqrt{\mathbf{k_1'k_1}} = \sqrt{6}$$

$$\mathbf{k_1}^* = \mathbf{k_1} / |\mathbf{k_1}| = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \end{bmatrix} \quad \text{，故} \quad \mathbf{K}^* = [\, \mathbf{k_1}^* \;\; \mathbf{k_2}^* \;\; \mathbf{k_3}^* \,]$$

$$(\mathbf{k_i}^*)'\,\mathbf{k_i}^* = 1 \qquad (\mathbf{k_i}^*)'\,\mathbf{k_j}^* = 0 \quad \text{且} \quad (\mathbf{K}^*)'\,\mathbf{K}^* = \mathbf{K}^*(\mathbf{K}^*)' = \mathbf{I}$$

$(\mathbf{K}^*)'\,\mathbf{A}\,\mathbf{K}^* = \mathbf{\Lambda}$ ，$\mathbf{\Lambda}$稱作由λ_i特徵值所構成的對角線矩陣，亦稱作矩陣 $\mathbf{A}$ 的「典式」（canonical form）。

4.求特徵向量正規化（normalized）為λ，亦即是將特徵向量「正規化為特徵值」；也就是求「把正規化為 1 的特徵向量之各元素值乘以與此特徵向量相對應之特徵值的平方根」之謂。例如：

$$\mathbf{f_i} = \mathbf{k_i}^* \sqrt{\lambda_i} \qquad \text{或} \qquad \mathbf{F} = \mathbf{K}^*\,\Lambda^{1/2} \qquad \text{，故} \quad \mathbf{F'F} = \Lambda$$

如果矩陣 $\mathbf{A}$ 是相關係數矩陣，則矩陣 $\mathbf{F}$ 內的每一行向量 $\mathbf{f_i}$，便是所謂的「因素負荷量」（factor loadings）向量，亦即是指變項與因素之間的相關係數。

5.特徵值與特徵向量的其他特性：

◎任何一個對稱的方陣 $\mathbf{A}$，都可以分解成三個矩陣的連乘積：

$$\mathbf{A} = \mathbf{K}^*\,\mathbf{\Lambda}\,(\mathbf{K}^*)'$$

◎上述矩陣 $\mathbf{A}$ 亦可以表示如下：

$$\mathbf{A} = \mathbf{F}\,\mathbf{F'}$$

◎若矩陣 $\mathbf{A}$ 為對稱方陣，則其平方根為：

$$\mathbf{A}^{1/2} = \mathbf{K}^*\,\mathbf{\Lambda}^{1/2}\,(\mathbf{K}^*)'$$

◎若矩陣 $\mathbf{A}$ 為對稱方陣，則其平方根的倒數為：

$$\mathbf{A}^{-1/2} = \mathbf{K}^*\,\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\,(\mathbf{K}^*)'$$