

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 $\mathbf{k}'\mathbf{k} = 1$ 的條件下，則

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

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

得 $\mathbf{A}\mathbf{k} = \lambda\mathbf{k}$ 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：

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

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

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

若上述 \mathbf{A} 矩陣為 $m \times m$ 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

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

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：

$$\mathbf{k}_1' \mathbf{k}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & & \\ 1 & & \end{bmatrix} = 6 \quad |\mathbf{k}_1| = \sqrt{\mathbf{k}_1' \mathbf{k}_1} = \sqrt{6}$$

$$\mathbf{k}_1^* = \mathbf{k}_1 / |\mathbf{k}_1| = \begin{pmatrix} 1/6 \\ 2/6 \\ 1/6 \end{pmatrix}, \text{ 故 } \mathbf{K}^* = [\mathbf{k}_1^* \ \mathbf{k}_2^* \ \mathbf{k}_3^*]$$

$$(\mathbf{k}_i^*)' \mathbf{k}_i^* = 1 \quad (\mathbf{k}_i^*)' \mathbf{k}_j^* = 0 \quad \text{且} \quad (\mathbf{K}^*)' \mathbf{K}^* = \mathbf{K}^* (\mathbf{K}^*)' = \mathbf{I}$$

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

$$\mathbf{f}_i = \mathbf{k}_i^* \lambda_i \quad \text{或} \quad \mathbf{F} = \mathbf{K}^* \mathbf{\Lambda}^{1/2}, \text{ 故 } \mathbf{F}' \mathbf{F} = \mathbf{\Lambda}$$

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:

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