

Multivariate Datenanalyse

MSc Psychologie WiSe 2022/23

Prof. Dr. Dirk Ostwald

(4) Eigenanalyse

Or thonormal zer legung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontroll fragen

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontroll fragen

Definition (Eigenvektor, Eigenwert)

 $A\in\mathbb{R}^{m imes m}$ sei eine quadratische Matrix. Dann heißt jeder Vektor $v\in\mathbb{R}^m,v
eq 0_m$, für den gilt, dass

$$Av = \lambda v \tag{1}$$

mit $\lambda \in \mathbb{R}$ ein *Eigenvektor* von A. λ heißt zugehöriger *Eigenwert* von A.

Bemerkungen

- Ein Eigenvektor v von A wird durch A mit einem Faktor λ verlängert.
- Jeder Eigenvektor hat einen zugehörigen Eigenwert.
- Die Eigenwerte verschiedener Eigenvektor können identisch sein.

Theorem (Multiplikativität von Eigenvektoren)

 $A\in\mathbb{R}^{m imes m}$ sei eine quadratische Matrix. Wenn $v\in\mathbb{R}^m$ Eigenvektor von A mit Eigenwert $\lambda\in\mathbb{R}$ ist, dann ist für $c\in\mathbb{R}$ auch $cv\in\mathbb{R}^m$ Eigenvektor von A und zwar wiederum mit Eigenwert $\lambda\in\mathbb{R}$.

Beweis

Es gilt

$$Av = \lambda v \Leftrightarrow cAv = c\lambda v \Leftrightarrow A(cv) = \lambda(cv)$$
 (2)

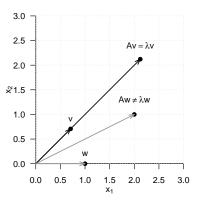
Also ist cv ein Eigenvektor von A mit Eigenwert λ .

Konvention

Wir betrachten im Folgenden nur Eigenvektoren mit ||v|| = 1.

Visualisierung eines Eigenvektors

$$\text{F\"{u}r } A := \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \text{ ist } v := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ Eigenvektor zum Eigenwert } \lambda = 3, w := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ ist kein Eigenvektor.}$$



Theorem (Bestimmung von Eigenwerten und Eigenvektoren)

 $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ sei eine quadratische Matrix. Dann ergeben sich die Eigenwerte von A als die Nullstellen des *charakteristischen Polynoms*

$$\chi_A(\lambda) := \det(A - \lambda I_m) \tag{3}$$

von A. Weiterhin seien λ_i^* , i=1,2,... die auf diese Weise bestimmten Eigenwerte von A. Die entsprechenden Eigenvektoren $v_i, i=1,2,...$ von A können dann durch Lösen der linearen Gleichungssysteme

$$(A - \lambda_i^* I_m) v_i = 0_m \text{ für } i = 1, 2, \dots$$
 (4)

bestimmt werden.

Bemerkungen

- Für kleine Matrizen mit m < 3 können Eigenwerte und Eigenvektoren manuell bestimmt werden.
- Bei großen Matrizen werden Eigenwerte und Eigenvektor im Allgemeinen numerisch bestimmt.
- R's eigen(), Scipy's linalg.eig(), Matlab's eig().

Beweis

(1) Bestimmen von Eigenwerten

Wir halten zunächst fest, dass mit der Definition von Eigenvektoren und Eigenwerten gilt, dass

$$Av = \lambda v \Leftrightarrow Av - \lambda v = 0_m \Leftrightarrow (A - \lambda I_m)v = 0_m. \tag{5}$$

Für den Eigenwert λ wird der Eigenvektor v also durch $(A-\lambda I_m)$ auf den Nullvektor 0_m abgebildet. Weil aber per Definition $v\neq 0_m$ gilt, ist die Matrix $(A-\lambda I_m)$ somit nicht invertierbar: sowohl der Nullvektor als auch v werden durch A auf 0_m abgebildet, die Abbildung

$$f: \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m, x \mapsto (A - \lambda I_m)x$$
 (6)

ist also nicht bijektiv, und $(A-\lambda I_m)^{-1}$ kann nicht existieren. Die Tatsache, dass $(A-\lambda I_m)$ nicht invertierbar ist, ist aber äquivalent dazu, dass die Determinante von $(A-\lambda I_m)$ Null ist. Also ist

$$\chi_A(\lambda) = \det(A - \lambda I_m) = 0$$
 (7)

notwendige und hinreichende Bedingung dafür, dass λ ein Eigenwert von A ist.

(2) Bestimmen von Eigenvektoren

Es sei λ_i^* ein Eigenwert von A. Dann gilt mit den obigen Überlegungen, dass Auflösen von

$$(A - \lambda_i^* I_m) v_i^* = 0_m \tag{8}$$

nach \boldsymbol{v}_i^* einen Eigenvektor zum Eigenwert $\boldsymbol{\lambda}^*$ ergibt.

Multivariate Datenanalyse | © 2023 Dirk Ostwald CC BY-SA 4.0 | Folie 9

Beispiel

Es sei

$$A := \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \tag{9}$$

Wir wollen die Eigenwerte und Eigenvektoren von A bestimmen.

(1) Berechnen von Eigenwerten

Die Eigenwerte von A sind die Nullstellen des charakteristischen Polynoms von A.

Das charakteristische Polynom von A ergibt als

$$\chi_A(\lambda) = \det \left(\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \right) = \det \begin{pmatrix} 2 - \lambda & 1 \\ 1 & 2 - \lambda \end{pmatrix} = (2 - \lambda)^2 - 1.$$
(10)

Nullsetzen und Auflösen nach λ ergibt mit der pq-Formel

$$(2-\lambda)^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 3, \lambda_2 = 1.$$
 (11)

Die Eigenwerte von A sind also $\lambda_1=3$ und $\lambda_2=1$.

Beispiel (fortgeführt)

(2) Berechnen von Eigenvektoren

Die Eigenvektoren zu den Eigenwerten $\lambda_1=3$ und $\lambda_2=1$ ergeben sich durch Lösen der linearen Gleichungssysteme

$$(A - \lambda_i I_2)v_i = 0_2 \text{ für } i = 1, 2.$$
 (12)

Für $\lambda_1 = 3$ ergibt sich

$$(A - 3I_2)v_1 = 0_2 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11} \\ v_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ ist eine L\"osung.}$$
 (13)

Fpr $\lambda_2 = 1$ ergibt sich

$$(A - 1I_2)v_2 = 0_2 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{21} \\ v_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ ist eine L\"osung.} \tag{14}$$

Weiterhin gilt $v_1^T v_2 = 0$ und $||v_1|| = ||v_2|| = 1$.

Beispiel (fortgeführt)

```
# Matrixdefinition
A = matrix(c(2,1,
            1,2),
           nrow = 2,
           byrow = TRUE)
# Eigenanalyse
eigen(A)
> eigen() decomposition
> $values
> [1] 3 1
> $vectors
        [,1] [,2]
> [1,] 0.707 -0.707
> [2,] 0.707 0.707
```

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Theorem (Eigenwerte und Eigenvektoren symmetrischer Matrizen)

 $S \in \mathbb{R}^{m \times m}$ sei eine symmetrische Matrix. Dann gelten

- (1) Die Eigenwerte von S sind reell.
- (2) Die Eigenvektoren zu je zwei verschiedenen Eigenwerten von S sind orthogonal.

Bemerkung

- In nachfolgendem Beweis setzen wir die Tatsache dass eine symmetrische m reelle Eigenwerte hat als gegeben voraus und zeigen lediglich, dass die Eigenvektoren zu je zwei verschiedenen Eigenwerten einer symmetrischen Matrix orthogonal sind. Ein vollständiger Beweis des Theorems findet sich in Strang (2009), Kapitel 6.4.
- Da wir als Eigenvektoren nur Eigenvektoren der Länge 1 betrachten, sind die hier angesprochenen orthogonalen Eigenvektoren insbesondere auch orthonormal.

Beweis

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit seien λ_i und λ_j mit $1 \leq i,j \leq m$ und $\lambda_i \neq \lambda_j$ zwei verschiedenen Eigenwerte von S mit zugehörigen Eigenvektoren q_i und q_j , respektive. Dann ergibt sich wie unten gezeigt, dass

$$\lambda_i q_i^T q_j = \lambda_j q_i^T q_j. \tag{15}$$

Mit $q_i \neq 0_m, q_j \neq 0_m$ und $\lambda_i \neq \lambda_j$ folgt damit $q_i^T q_j = 0$, weil weil es keine andere Zahl c als die Null gibt, für die bei $a,b \in \mathbb{R}$ und $a \neq b$ gilt, dass

$$ac = bc.$$
 (16)

Um

$$\lambda_i q_i^T q_j = \lambda_j q_i^T q_j. \tag{17}$$

zu zeigen, halten wir zunächst fest, dass

$$Sq_i = \lambda_i q_i \Leftrightarrow (Sq_i)^T = (\lambda_i q_i)^T \Leftrightarrow q_i^T S^T = q_i^T \lambda_i^T \Leftrightarrow q_i^T S = q_i^T \lambda_i \Leftrightarrow q_i^T S q_j = \lambda_i q_i^T q_j \quad (18)$$

und

$$Sq_j = \lambda_j q_j \Leftrightarrow q_i^T Sq_j = \lambda_j q_i^T q_j \tag{19}$$

gelten. Sowohl $\lambda_i q_i^T q_j$ als auch $\lambda_j q_i^T q_j$ sind also mit $q_i^T S q_j$ und damit auch miteinander identisch.

Theorem (Orthonormale Zerlegung einer symmetrischen Matrix)

 $S \in \mathbb{R}^{m \times m}$ sei eine symmetrische Matrix mit m verschiedenen Eigenwerten. Dann kannn S geschrieben werden als

$$S = Q\Lambda Q^T, (20)$$

wobei $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ eine orthogonale Matrix ist und $\Lambda \in \mathbb{R}^{m \times m}$ eine Diagonalmatrix ist.

Bemerkungen

- $S = Q\Lambda Q^T$ heißt auch Diagonalisierung von S.
- ullet Wie im Beweis gezeigt wählt man als Spalten von Q die orthonormalen Eigenvektoren von S.
- ullet Wie im Beweis gezeigt wählt man als Diagonalelemente von Λ die zugehörigen Eigenwerte von S.

Beweis

Es seien $\lambda_1,...,\lambda_m$ die Eigenwerte von S und $q_1,...,q_m$ die zugehörigen orthonormalen Eigenvektoren. Mit

$$Q := \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times m} \text{ und } \Lambda := \operatorname{diag} \left(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_m\right) \in \mathbb{R}^{m \times m}, \tag{21}$$

folgt dann mit den Definitionen von Eigenwerten und Eigenvektoren, dass

$$Sq_i = \lambda_i q_i \text{ für } i=1,...,m \Leftrightarrow Sq_i = q_i \lambda_i \text{ für } i=1,...,m \Leftrightarrow SQ = Q\Lambda. \tag{22}$$

Rechtseitige Multiplikation mit ${\cal Q}^T$ ergibt dann mit ${\cal Q}{\cal Q}^T={\cal I}_m$, dass

$$SQQ^{T} = Q\Lambda Q^{T} \Leftrightarrow SI_{m} = Q\Lambda Q^{T} \Leftrightarrow S = Q\Lambda Q^{T}.$$
 (23)

 \neg

Beispiel (fortgeführt)

Für die symmetrische Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \tag{24}$$

mit den oben bestimmten Eigenwerten $\lambda_1=3, \lambda_2=1$ und zugehörigen orthonormalen Eigenvektoren

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\1 \end{pmatrix}, v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1\\1 \end{pmatrix}$$
 (25)

seien

$$Q := \begin{pmatrix} v_1 & v_2 \end{pmatrix} \text{ und } \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2).$$
 (26)

Dann ergibt sich

$$\begin{split} Q\Lambda Q^T &= \begin{pmatrix} v_1 & v_2 \end{pmatrix} \operatorname{diag}(\lambda_1,\lambda_2) \begin{pmatrix} v_1 & v_2 \end{pmatrix}^T \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 3 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \\ &= A. \end{split}$$

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontroll fragen

Singulärwertzerlegung

Definition (Singulärwertzerlegung)

 $Y \in \mathbb{R}^{m \times n}$ sei eine Matrix. Dann heißt die Zerlegung

$$Y = USV^T, (27)$$

wobei $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ eine orthogonale Matrix ist, $S \in \mathbb{R}^{m \times n}$ eine Diagonalmatrix ist und $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine orthogonale Matrix ist, *Singulärwertzerlegung (Singular Value Decomposition (SVD))* von Y. Die Diagonalelemente von S heißen die *Singulärwerte* von Y.

Bemerkungen

- Für eine ausführliche Diskussion der Singulärwertzerlegung siehe z.B. Strang (2009), Kapitel 7.
- Singulärwertzerlegungen können in R mit svd() berechnet werden.

Singulärwertzerlegung

Theorem (Singulärwertzerlegung und Eigenanalyse)

 $Y \in \mathbb{R}^{m \times n}$ sei eine Matrix und

$$Y = USV^{T} (28)$$

sei ihre Singulärwertzerlegung. Dann gilt:

- Die Spalten von U sind die Eigenvektoren von YY^T ,
- die Spalten von V sind die Eigenvektoren von Y^TY und
- die entsprechenden Singulärwerte sind die Quadratwurzeln der zugehörigen Eigenwerte.

Bemerkung

• Singulärwertzerlegung und Eigenanalyse sind eng verwandt.

Singulärwertzerlegung

Beweis

Wir halten zunächst fest, dass mit

$$\left(YY^T \right)^T = YY^T \text{ und } \left(Y^TY \right)^T = Y^TY, \tag{29}$$

 YY^T und Y^TY symmetrische Matrizen sind und somit Orthornomalzerlegungen haben. Wir halten weiterhin fest, dass mit $V^TV=I_n$, $U^TU=I_m$ und $S^T=S$ gilt, dass

$$YY^{T} = USV^{T} \left(USV^{T} \right)^{T} = USV^{T}VS^{T}U^{T} = USSU^{T} =: U\Lambda U^{T}$$
(30)

und

$$Y^{T}Y = \left(USV^{T}\right)^{T}USV^{T} = VS^{T}U^{T}US^{T}V^{T} =: V\Lambda V^{T}$$
(31)

ist, wobei wir $\Lambda:=SS$ definiert haben. Weil das Produkt von Diagonalmatrizen wieder eine Diagonalmatrix ist, ist Λ eine Diagonalmatrix und per Definition sind U und V orthogonale Matrizen. Wir haben also YY^T und Y^TY in Form der Orthonormalzerlegungen

$$YY^{T} = U\Lambda U^{T} \text{ und } Y^{T}Y = V\Lambda V^{T}$$
(32)

geschrieben, wobei für die Diagonalelemente von Λ gilt, dass sie die quadrierten Werte der Diagonalemente von S sind.

П

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Selbstkontrollfragen

- 1. Geben Sie die Definition eines Eigenvektors und eines Eigenwertes einer quadratischen Matrix wieder.
- 2. Geben Sie das Theorem zur Bestimmung von Eigenwerten und Eigenvektoren wieder.
- 3. Geben Sie das Theorem zu den Eigenwerten und Eigenvektoren symmetrischer Matrizen wieder.
- 4. Geben Sie das Theorem zur orthonormalen Zerlegung einer symmetrischen Matrix wieder.
- 5. Geben Sie die Definition einer Singulärwertzerlegung wieder.
- 6. Geben Sie das Theorem zum Zusammenhang von Singulärwertzerlegung und Eigenanalyse wieder.

