

BONNER ZENTRUM FÜR LEHRERBILDUNG (BZL)

Singulärwertzerlegung. Theorie und Anwendung

Bachelorarbeit im Fach: Mathematik

vorgelegt von Noah Pferdekamp

Matrikelnummer: 123456

Erstbetreuer: Prof. Dr. Philipp Hieronymi

Zweitgutachter: Prof. Dr. Thoralf Räsch

MATHEMATISCHES INSTITUT

Wintersemester 2024/2025

Bonn, den 6. März 2025

Selbstständigkeitserklärung

Ich versichere hiermit, dass die Bachelorarbeit mit dem Titel „Singulärwertzerlegung. Theorie und Anwendung“ von mir selbst und ohne jede unerlaubte Hilfe selbstständig angefertigt wurde, dass sie noch an keiner anderen Hochschule zur Prüfung vorgelegen hat und dass sie weder ganz noch in Auszügen veröffentlicht worden ist. Die Stellen der Arbeit — einschließlich Tabellen, Karten, Abbildungen usw. —, die anderen Werken dem Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, habe ich in jedem einzelnen Fall kenntlich gemacht.

Bonn, den 6. März 2025

Signatur

INHALTSVERZEICHNIS

1. EINLEITUNG	1
2. MATHEMATISCHE THEORIE	3
2.1. Beweisführung	3
2.2. Beispiel und Visualisierung	12
2.3. Arten der Singulärwertzerlegung	16
3. HAUPTKOMPONENTENANALYSE	19
3.1. Intuition der PCA	19
3.2. Mathematische Herleitung	21
3.3. Verbindung zur SVD	26
4. EMPFEHLUNGSSYSTEME	31
LITERATURVERZEICHNIS	33
A. ABBILDUNGEN	35
B. PROGRAMMCODE	37

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abb. 2.1. Wirkung von A auf die Einheitssphäre	15
Abb. 2.2. Visualisierung der Singulärwertzerlegung	15
Abb. 3.1. Projektionen im zweidimensionalen Raum	20
Abb. A.1. Darstellung von Daten in verschiedenen Dimensionen	35

TABELLENVERZEICHNIS

NOTATION

\bar{z}	Komplexe Konjugation
\Re	Realteil
\Im	Imaginärteil
\mathcal{L}	Lineare Hülle
$\ v\ $	Norm
$\langle v, w \rangle$	Skalarprodukt
$\mathbf{0}$	Nullmatrix
$\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$	Diagonalmatrix
$\text{rg}(X)$	Rang
$\text{df}(X)$	Defekt
I	Einheitsmatrix
$x \ll y$	viel kleiner
$\text{proj}_u(x)$	Projektion von x auf u

ABKÜRZUNGEN

SVD	Singular value decomposition (Singulärwertzerlegung)
PCA	Principal component analysis (Hauptkomponentenanalyse)
u.d.B.	unter der Bedingung

EINLEITUNG

MATHEMATISCHE THEORIE

In diesem Kapitel wird zunächst unter Verwendung vorher eingeführter Sätze und Definitionen die Existenz und eine fundamentale Eigenschaft der Singulärwertzerlegung formal bewiesen. Anschließend wird an einem konkreten Beispiel die Berechnung durchgeführt und die SVD visualisiert. Um das Kapitel abzuschließen, erfolgt eine Beschreibung der wichtigsten beiden Arten der Singulärwertzerlegung.

2.1. BEWEISFÜHRUNG

Es wird davon ausgegangen, dass der Leser¹ mit den Grundlagen der linearen Algebra vertraut ist, insbesondere mit Matrizen und ihren Eigenschaften. Bekannte Definitionen werden nicht erneut aufgeführt, die einzige Ausnahme bildet [Definition 2.1](#), da diese für jegliche Beweisführung und für das Verständnis in diesem Kapitel unerlässlich ist und deswegen eine Auffrischung sinnvoll erscheint.

DEFINITION 2.1.

Sei $n \in \mathbb{N}$ und $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Für

$$Av = \lambda v$$

heißten die Lösungen $\mathbb{R}^n \ni v \neq 0$ *Eigenvektoren* und die zugehörigen λ *Eigenwerte*.

Vorausgesetzte Sätze werden ohne weiteren Beweis verwendet, aber in wichtigen Fällen dennoch vor Verwendung kurz rekapituliert, wie in [Wiederholung 2.2](#) verdeutlicht.

¹Aus Gründen der besseren Lesbarkeit wird das generische Maskulinum verwendet, wobei alle Geschlechter mit eingeschlossen sind.

WIEDERHOLUNG 2.2 (Basisergänzungssatz).

Sei V ein beliebiger Vektorraum, $L \subseteq V$ linear unabhängig und $E \subseteq V$ ein Erzeugendensystem von V . Dann kann L durch Elemente aus E zu einer Basis von V ergänzt werden.

Um die Existenz der Singulärwertzerlegung für beliebige Matrizen zu beweisen, bedarf es der Hilfe eines anderen Satzes, des sogenannten Spektralsatzes. Dieser hat keine eindeutige Ausführung, sondern beschreibt vielmehr mehrere verwandte Aussagen der Mathematik, wobei sich in dieser Arbeit auf seine Folgerungen für symmetrische Matrizen beschränkt wird. Es ist ebenfalls wichtig zu betonen, dass der Spektralsatz zwar hier „nur“ für den Beweis der Singulärwertzerlegung verwendet wird, eine Bezeichnung als Hilfssatz jedoch irreführend wäre, da der Satz für sich genommen bereits eine bedeutende Aussage der linearen Algebra und Funktionalanalysis darstellt. Um den Spektralsatz für symmetrische Matrizen einführen und anschließend beweisen zu können, benötigen wir zunächst [Lemma 2.3](#) und [Wiederholung 2.4](#).

LEMMA 2.3.

Sei $z \in \mathbb{C}$ und $a, b \in \mathbb{R}$ mit $z = a + bi$. $z = \bar{z}$ gilt genau dann, wenn $z \in \mathbb{R}$.

Beweis. „ \Rightarrow “ Durch $z = \bar{z}$ gilt

$$\begin{aligned} a + bi &= a - bi \\ \Leftrightarrow 2bi &= 0. \end{aligned}$$

Da $i \neq 0$ muss $b = 0$, womit $\Im(z) = 0$. Also ist $z = \Re(z) \in \mathbb{R}$.

„ \Leftarrow “ Folgt direkt aus der Definition. □

WIEDERHOLUNG 2.4 (Gram-Schmidtsches Orthonormalisierungsverfahren).

Sei V ein euklidischer Vektorraum und $\{u_1, \dots, u_n\}$ eine Menge von linear unabhängigen Vektoren in V . Dann kann eine Menge $\{v_1, \dots, v_n\}$ aus Vektoren in V konstruiert werden, sodass $\{v_1, \dots, v_n\}$ orthonormal ist und

$$\mathcal{L}\{v_1, \dots, v_n\} = \mathcal{L}\{u_1, \dots, u_n\}.$$

SATZ 2.5 (Spektralsatz).

Sei $n \in \mathbb{N}$ und $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ quadratisch und symmetrisch. Dann gilt:

- (i) A hat reelle Eigenwerte.
- (ii) Es existiert eine orthogonale Matrix $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$, sodass $R^{-1}AR = R^TAR = \Lambda \in \mathbb{R}^{n \times n}$ diagonal ist.

Beweis. Die Behauptungen werden nacheinander bewiesen (vgl. [Cra22]).

Zu (i). Sei $\lambda \in \mathbb{C}$ ein Eigenwert von A mit zugehörigem Eigenvektor $v \in \mathbb{C}^n$. Dann ist mit [Definition 2.1](#)

$$\begin{aligned} Av &= \lambda v \\ \Leftrightarrow A\bar{v} &= \bar{\lambda}\bar{v}, \end{aligned} \tag{2.1}$$

da $A \in \mathbb{R}$ und somit $A = \bar{A}$ nach [Lemma 2.3](#). Nun gilt zum einen

$$(Av)^T \bar{v} = (\lambda v)^T \bar{v} = \lambda v^T \bar{v} \tag{2.2}$$

und zum anderen

$$(Av)^T \bar{v} = v^T A^T \bar{v} \stackrel{A \text{ sym.}}{=} v^T A \bar{v} \stackrel{(2.1)}{=} v^T \bar{\lambda} \bar{v} = \bar{\lambda} v^T \bar{v}. \tag{2.3}$$

Mit (2.2)=(2.3) ergibt sich

$$\lambda v^T \bar{v} = \bar{\lambda} v^T \bar{v}.$$

Da $v \neq 0$ ist erhalten wir

$$\lambda = \bar{\lambda}.$$

Nach [Lemma 2.3](#) ist dann $\lambda \in \mathbb{R}$, wodurch auch $v \in \mathbb{R}^n$ sein muss. □

Zu (ii). Induktion über $n \in \mathbb{N}$:

Induktionsanfang. Für $n = 1$ sind A und R Skalare. Setze $R = 1$. Damit ist R orthogonal, da $R^{-1} = R^T$ und $\mathbb{R} \ni A = R^{-1}AR$ trivialerweise diagonal.

Induktionshypothese. Die Behauptung (ii) gelte für festes, beliebiges $\mathbb{N} \ni n - 1$. Es soll gezeigt werden, dass sie dann auch für n gilt.

Induktionsschritt. Sei λ_1 ein beliebiger Eigenwert von A mit zugehörigem normiertem Eigenvektor v_1 , also $\|v_1\| = 1$. Nach (i) gilt $\lambda_1 \in \mathbb{R}$ und $v_1 \in \mathbb{R}^n$. Mit dem Basisergänzungssatz ([Wiederholung 2.2](#)) kann v_1 durch Vektoren u_2, \dots, u_n zu einer Basis von \mathbb{R}^n ergänzt werden. Nun kann das Gram-Schmidt'sche Orthonormalisierungsverfahren ([Wiederholung 2.4](#)) angewendet

werden, wodurch eine orthonormale Basis $\{v_1, \dots, v_n\}$ von \mathbb{R}^n konstruiert wird. Der Leser wird daran erinnert, dass orthonormale Vektoren normiert und orthogonal sind. Sei

$$P = \begin{bmatrix} | & | & | & | \\ v_1 & v_2 & \cdots & v_n \\ | & | & | & | \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

mit v_1, \dots, v_n als Spaltenvektoren und setze $\mathbb{R}^{n \times n} \ni B = P^{-1}AP = P^TAP$.

Das Ziel ist, die Induktionshypothese auf eine symmetrische Untermatrix $C \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$ von B anzuwenden. Dafür wird zunächst die Symmetrie von B gezeigt:

$$B^T = (P^TAP)^T = (AP)^T P = P^T A^T P \stackrel{A \text{ sym.}}{=} P^T AP = B.$$

Betrachte jetzt die erste Spalte von B . Die erste Spalte einer beliebigen Matrix erhält man durch Multiplikation mit dem kanonischen Einheitsvektor e_1 :

$$\begin{aligned} B e_1 &= P^T A P e_1 \\ &= P^T A v_1 && (v_1 \text{ ist die erste Spalte von } P) \\ &= P^T \lambda_1 v_1 && (\lambda_1 \text{ ist der Eigenwert zu } v_1) \\ &= P^T v_1 \lambda_1 \\ &= \begin{bmatrix} -v_1 - \\ -v_2 - \\ \vdots \\ -v_n - \end{bmatrix} v_1 \lambda_1 \\ &= \begin{bmatrix} \langle v_1, v_1 \rangle \\ \langle v_2, v_1 \rangle \\ \dots \\ \langle v_n, v_1 \rangle \end{bmatrix} \lambda_1 \\ &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \lambda_1. && (\|v_1\| = 1 \text{ und bel. } v_i, v_j \in \{v_1, \dots, v_n\} \text{ orthogonal}) \end{aligned}$$

Mit der Darstellung als Blockmatrix und durch Symmetrie von B gilt somit

$$B = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & C \end{bmatrix} \text{ mit } C \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)} \text{ symmetrisch.}$$

Nach Induktionshypothese gibt es ein orthogonales $Q \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$ mit $Q^T C Q = D$ diagonal. Damit gilt

$$\begin{aligned} P^T A P &= B \\ &= \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & C \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & Q D Q^T \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & Q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & Q^T \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Also ist

$$\begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & Q^T \end{bmatrix} P^T A P \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & Q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & D \end{bmatrix}.$$

Definiere

$$R = P \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & Q \end{bmatrix}.$$

Es gilt

$$R^T = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & Q^T \end{bmatrix} P^T = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & Q^{-1} \end{bmatrix} P^{-1} = R^{-1}.$$

Dementsprechend ist R orthogonal und $R^{-1} A R = R^T A R = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & D \end{bmatrix} = \Lambda$ diagonal, da D diagonal ist. \square

KOROLLAR 2.6.

Sei $n \in \mathbb{N}$ und $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ quadratisch und symmetrisch. Dann gilt:
Es existiert eine orthogonale Matrix $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$, sodass $R^{-1} A R = \Lambda$ diagonal ist, wobei die Diagonalwerte von $\Lambda \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die Eigenwerte von A und die Spalten von R die normierten Eigenvektoren von A sind.

Beweis. Nach dem Spektralsatz ([Satz 2.5](#)) gibt es ein orthogonales $R = [r_1 \dots r_n]$ mit $r_1, \dots, r_n \in \mathbb{R}^n$ und $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, sodass

$$R^{-1} A R = \Lambda.$$

Dann ist

$$A R = R \Lambda,$$

oder spaltenweise

$$Ar_i = \lambda_i r_i, \quad \text{für } i = 1, \dots, n.$$

Da R orthogonal ist, sind nach Definition die Spaltenvektoren von R , also r_1, \dots, r_n , orthonormal. Für beliebiges r_i gilt somit $\|r_i\| = 1$, wodurch $r_i \neq \mathbf{0}$ sein muss. Mit [Definition 2.1](#) sind also r_1, \dots, r_n die (normierten) Eigenvektoren von A mit zugehörigen Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_n$.

Hinweis. Mithilfe von Zeilen- und Spaltenvertauschungen innerhalb von R und Λ kann Λ so geordnet werden, dass $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Diese Sortierung wird für den Rest der Arbeit angenommen. \square

BEMERKUNG 2.7.

Durch [Korollar 2.6](#) lässt sich direkt die nützliche Aussage treffen, dass bei einer symmetrischen Matrix Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal zueinander sind.

Nun kann mithilfe der vorangegangenen Sätze die Existenz der Singulärwertzerlegung für beliebige reelle Matrizen bewiesen werden. Der Beweis orientiert sich dabei an [[Che20](#)].

SATZ 2.8 (Singulärwertzerlegung).

Seien $m, n \in \mathbb{N}$ und $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Dann existieren orthogonale Matrizen $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und eine Matrix $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$, sodass

$$X = U\Sigma V^T.$$

Beweis. Sei $C = X^T X \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $r = \text{rg}(X) \leq \min(m, n)$. Dann ist C symmetrisch und positiv semidefinit, da zum einen

$$C^T = (X^T X)^T = X^T X = C$$

und zum anderen für beliebiges $\mathbb{R}^n \ni w \neq 0$ gilt:

$$w^T C w = w^T (X^T X) w = (X w)^T (X w) = \langle X w, X w \rangle = \|X w\|^2 \geq 0.$$

Damit sind alle Eigenwerte von C positiv oder gleich null. Nach [Korollar 2.6](#) gibt es dann ein orthogonales

$$V = [v_1 \dots v_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

und diagonales $\mathbb{R}^{n \times n} \ni \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ mit $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_r > 0 = \lambda_{r+1} =$

$\dots = \lambda_n$, sodass $C = V\Lambda V^T$.

Definiere $\sigma_i := \sqrt{\lambda_i}$ für $i = 1, \dots, r$ und

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij} &= \begin{cases} \sigma_i, & i = j. \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \\ \Leftrightarrow \Sigma &= \begin{bmatrix} \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n} \end{aligned}$$

als Blockmatrix. Definiere außerdem

$$u_i = \frac{1}{\sigma_i} X v_i \in \mathbb{R}^m, \quad \text{für } 1 \leq i \leq r.$$

Dann sind u_1, \dots, u_r orthonormal:

$$\begin{aligned} u_i^T u_j &= \left(\frac{1}{\sigma_i} X v_i \right)^T \left(\frac{1}{\sigma_j} X v_j \right) \\ &= \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} v_i^T \underbrace{X^T X}_=C v_j \\ &= \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} v_i^T (\lambda_j v_j) && (\lambda_j \text{ ist Eigenwert zu } v_j) \\ &= \frac{\sigma_j}{\sigma_i} v_i^T v_j && (\lambda_j = \sigma_j^2) \\ &= \begin{cases} 1, & i = j. \\ 0, & i \neq j. \end{cases} && (v_i, v_j \text{ orthonormal}) \end{aligned}$$

Wie bereits im Beweis des Spektralsatzes können u_1, \dots, u_r mithilfe des Basisergänzungssatzes ([Wiederholung 2.2](#)) und des Gram-Schmidt-Verfahrens ([Wiederholung 2.4](#)) durch Vektoren $u_{r+1}, \dots, u_m \in \mathbb{R}^m$ zu einer orthonormalen Basis von \mathbb{R}^m ergänzt werden. Damit ist

$$\mathbf{U} = [u_1 \dots u_r u_{r+1} \dots u_m] \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

orthogonal. Es bleibt zu zeigen, dass $XV = U\Sigma$ ist, also:

$$X[v_1 \dots v_r v_{r+1} \dots v_n] = [u_1 \dots u_r u_{r+1} \dots u_m] \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_r \\ & 0 & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Für $1 \leq i \leq r$ gilt $Xv_i = u_i\sigma_i$ nach Konstruktion.

Für $i > r$ soll gezeigt werden, dass $Xv_i = 0u_i = \mathbf{0}$ ist. Betrachte dafür

$$X^T X v_i = C v_i \stackrel{(*)}{=} 0 v_i = \mathbf{0}$$

(*) Der zugehörige Eigenwert zum Eigenvektor v_i ist 0 für $i > r$.

Damit muss wie erwünscht $Xv_i = \mathbf{0}$ gelten, oder $X^T = \mathbf{0}$, wodurch ebenfalls $Xv_i = \mathbf{0}$ folgt. Dementsprechend ist $X = U\Sigma V^T$ und die Aussage ist bewiesen. \square

BEMERKUNG 2.9.

- Die Diagonalwerte von Σ heißen Singulärwerte von X und werden meist absteigend sortiert.
- Die Spalten von U heißen linke Singulärvektoren von X .
- Die Spalten von V heißen rechte Singulärvektoren von X .

Nachdem der zentrale Beweis dieses Kapitels geführt und die Existenz der Singulärwertzerlegung für beliebige reelle Matrizen gezeigt wurde, wird nun auf eine wichtige Eigenschaft der SVD eingegangen.

Dafür werden zunächst die vier fundamentalen Unterräume zu einer Matrix nach [Str03, S. 185] definiert:

DEFINITION 2.10.

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Definiere folgende Unterräume zu A :

- **Spaltenraum:** $\text{Bild}(A) = \{b \in \mathbb{R}^m \mid \exists x \in \mathbb{R}^n, Ax = b\}.$
- **Zeilenraum:** $\text{Bild}(A^T) = \{z \in \mathbb{R}^n \mid \exists y \in \mathbb{R}^m, A^T y = z\}.$

- *Kern/Nullraum:* $\text{Kern}(A) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = \mathbf{0}\}.$
- *Linkskern:* $\text{Kern}(A^T) = \{y \in \mathbb{R}^m \mid A^T y = \mathbf{0}\}.$

Die vier Unterräume geben umfangreichen Aufschluss über die Wirkung einer Matrix auf verschiedene Vektoren und stehen dabei in Verbindung mit zahlreichen Themen der linearen Algebra, wie beispielsweise dem Lösen von Gleichungssystemen.

Die Art der Beziehung zwischen der Singulärwertzerlegung und den vier fundamentalen Unterräumen wird in [Korollar 2.12](#) zusammengefasst. Der Beweis wird nach [[Joh21](#), S. 214 f.] geführt, vor der Beweisführung wird allerdings [Wiederholung 2.11](#) benötigt.

WIEDERHOLUNG 2.11 (Dimensionssatz).

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Dann gilt:

$$\text{df}(A) + \text{rg}(A) = n.$$

KOROLLAR 2.12.

Seien $m, n \in \mathbb{N}$, $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $r = \text{rg}(X)$.

Dann existieren orthogonale Matrizen $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und eine Diagonalmatrix $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$, sodass

$$X = U\Sigma V^T$$

und es gilt:

- Die ersten r Spalten von U sind eine Basis des Spaltenraums von X .
- Die letzten $m - r$ Spalten von U sind eine Basis des Linkskerns von X .
- Die ersten r Spalten von V sind eine Basis des Zeilenraums von X .
- Die letzten $n - r$ Spalten von V sind eine Basis des Kerns von X .

Beweis. Mit der Singulärwertzerlegung ([Satz 2.8](#)) erhalten wir orthogonales

$$U = [u_1 \dots u_r u_{r+1} \dots u_m] \in \mathbb{R}^{m \times m},$$

$$V = [v_1 \dots v_r v_{r+1} \dots v_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

und diagonales

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n},$$

sodass $X = U\Sigma V^T$. Sei nun $i \in \{1, \dots, n\}$ und betrachte

$$Xv_i = U\Sigma V^T v_i \stackrel{(**)}{=} U\Sigma e_i = U\sigma_i e_i = \sigma_i Ue_i = \sigma_i u_i.$$

(**) Für $i, j \in \{1, \dots, n\}$ sind v_i, v_j orthonormal.

Fall 1: $1 \leq i \leq r$.

Damit ist $\sigma_i > 0$ und

$$X \frac{v_i}{\sigma_i} = u_i.$$

Nach [Definition 2.10](#) sind dann $u_1, \dots, u_r \in \text{Bild}(X)$. Nun ist $\dim(\text{Bild}(X)) = \text{rg}(X) = r$ und da $\mathcal{B}_S = \{u_1, \dots, u_r\}$ genau r orthonormale Vektoren enthält, bildet \mathcal{B}_S eine Basis vom $\text{Bild}(X)$, also vom Spaltenraum.

Fall 2: $i \geq r + 1$.

Damit ist $\sigma_i = 0$ und

$$Xv_i = \mathbf{0}.$$

Nach [Definition 2.10](#) sind dann $v_{r+1}, \dots, v_n \in \text{Kern}(X)$. Durch [Wiederholung 2.11](#) wissen wir, dass $\dim(\text{Kern}(X)) = \text{df}(X) = n - r$. Mit $\mathcal{B}_K = \{v_{r+1}, \dots, v_n\}$ haben wir $n - r$ orthonormale Vektoren gegeben, also bildet \mathcal{B}_K eine Basis vom $\text{Kern}(X)$.

Die Beweise für die Basen des Linkskerns und des Zeilenraums werden analog gezeigt, indem

$$X^T u_i = V\Sigma U^T u_i$$

betrachtet wird. □

Damit ist die Beweisführung dieser Arbeit abgeschlossen und die Berechnung der Singulärwertzerlegung kann an einem Beispiel veranschaulicht und visualisiert werden.

2.2. BEISPIEL UND VISUALISIERUNG

BEISPIEL 2.13. Sei

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 \\ 3 & 1 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 3}.$$

Wir wollen nun die SVD dieser Matrix finden. Dafür muss der Beweis der Singulärwertzerlegung ([Satz 2.8](#)) mithilfe unserer konkreten Werte schrittweise nachvollzogen werden. Zuerst wird also

$$A^T A = \begin{bmatrix} 10 & 2 & 6 \\ 2 & 2 & -2 \\ 6 & -2 & 10 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$$

bestimmt. Davon sollen die Eigenwerte mit zugehörigen normierten Eigenvektoren berechnet werden. Für die Eigenwerte muss zunächst das charakteristische Polynom

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

gesetzt und die Lösungen λ_i für $i = 1, 2, 3$ gefunden werden. Auf die genaue Berechnung wird an dieser Stelle verzichtet, das Ergebnis lautet:

$$\lambda_1 = 16, \quad \lambda_2 = 6, \quad \lambda_3 = 0.$$

Mit $\sigma_j = \sqrt{\lambda_j}$ für $j = 1, 2$ (da $\text{rg}(A) = 2$) erhalten wir

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 3}.$$

Durch die Lösungen $\mathbb{R}^3 \ni v_i \neq 0$ von

$$(A - \lambda I)v = 0$$

ergeben sich die normierten Eigenvektoren

$$v_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \quad v_2 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix}, \quad v_3 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix}$$

und damit

$$V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}.$$

Es muss also nur noch $U \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ bestimmt werden, welches spaltenweise durch

$$u_j = \frac{1}{\sigma_j} X v_j$$

ausgedrückt wird. Wir erhalten also

$$u_1 = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 \\ 3 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

und

$$u_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 \\ 3 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}.$$

Dadurch ist

$$U = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

und die Berechnung ist abgeschlossen mit

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 \\ 3 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} = U \Sigma V^T.$$

Damit genauer verstanden wird, was genau durch die Singulärwertzerlegung geschieht, betrachten wir die Wirkung der Matrix A aus [Beispiel 2.13](#) auf einen Vektor $v \in \mathbb{R}^3$, indem wir v und Av grafisch darstellen. Da dies an einem einzelnen Vektor schwer visualisiert werden kann, multiplizieren wir A mit allen Punkten auf der Einheitssphäre, also allen

$$v \in \left\{ \begin{bmatrix} \cos(x) \sin(y) \\ \sin(x) \sin(y) \\ \cos(y) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^3 \mid x \in [0, 2\pi], y \in [0, \pi] \right\}.$$

Das Ergebnis ist in [Abbildung 2.1](#) dargestellt. Um nachzuvollziehen, wie dieses Ergebnis zustande gekommen ist, verwenden wir die Singulärwertzerlegung

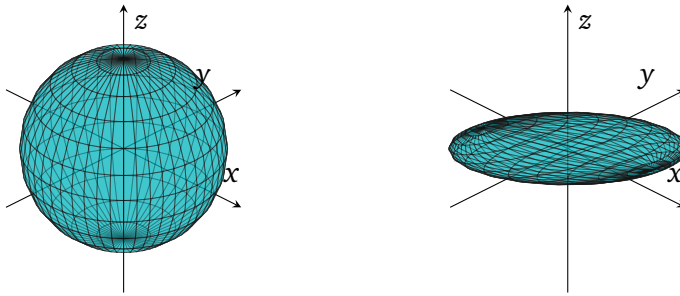


Abb. 2.1. Wirkung von A auf die Einheitssphäre

und veranschaulichen die Zwischenschritte von $A\mathbf{v} = U\Sigma V^T\mathbf{v}$ anhand von einzelner Plots (siehe [Abbildung 2.2](#)).

Grundlage für diese Visualisierung ist das Wissen, dass im euklidischen Raum orthogonale Matrizen Drehungen und Diagonalmatrizen Skalierungen (entlang der Hauptachsen) darstellen. An dieser Stelle ist auch wichtig zu erwähnen, dass in [Abbildung 2.2c](#) und [Abbildung 2.2d](#) der zu beobachtende

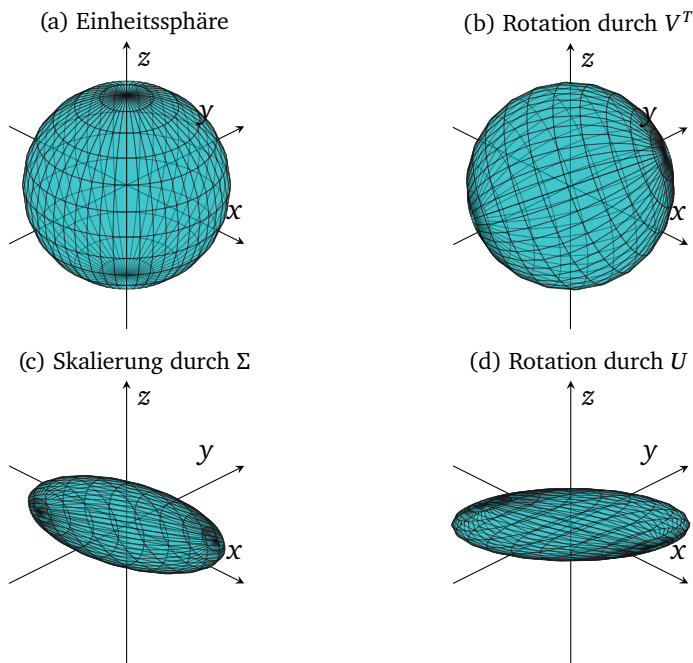


Abb. 2.2. Visualisierung der Singulärwertzerlegung

Wertebereich vergrößert wurde, also eine größere Streckung durch Σ erfolgt ist, als auf dem Plot zu sehen ist. Außerdem sei angemerkt, dass ab [Abbildung 2.2c](#) die Darstellung der z -Achse überflüssig und eigentlich nicht zu empfehlen ist, da sich dort durch die Dimensionsreduktion mittels Σ im zweidimensionalen Raum bewegt wird. Um eine Vergleichbarkeit der Plots zu verbessern, wird die Darstellung dennoch beibehalten.

Zusammenfassend zerlegt also die Singulärwertzerlegung eine Matrix in grundlegende geometrische Transformationen: Drehung, Skalierung und gegebenenfalls Dimensionsreduktion oder -erhöhung.

Mit dieser Erkenntnis wird sich dem letzten Abschnitt des theoretischen Teils zugewandt, in dem die wichtigsten beiden Arten der SVD definiert werden.

2.3. ARTEN DER SINGULÄRWERTZERLEGUNG

Die Singulärwertzerlegung, die im vorherigen Teil der Arbeit beschrieben wurde, ist die klassische und vollständige Zerlegung. In den tatsächlichen Anwendungsgebieten, welche im nächsten Kapitel ausgeführt werden, finden häufig Variationen Verwendung.

DEFINITION 2.14.

Seien $m, n \in \mathbb{N}$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\text{rg}(A) = r$ und $A = U\Sigma V^T$ die vollständige SVD von A mit $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Definiere die *reduzierte SVD* von A :

$$A = U_r \Sigma_r V_r^T$$

mit

$$U_r = [u_1 \dots u_r] \in \mathbb{R}^{m \times r},$$

$$\Sigma_r = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r) \in \mathbb{R}^{r \times r},$$

$$V_r = [v_1 \dots v_r] \in \mathbb{R}^{n \times r}.$$

Die in [Definition 2.14](#) beschriebene Art der Singulärwertzerlegung besitzt den Vorteil, dass eine exakte Berechnung mit deutlich weniger Speicherbedarf möglich ist, insbesondere bei großen Matrizen $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $\text{rg}(X) \ll \min(m, n)$.

Nachteilig ist, dass die Basen für den Kern und Linkskern „verloren gehen“ (siehe [Definition 2.10](#)), dies spielt für die meisten Anwendungen allerdings

eine untergeordnete Rolle.

Bevor zur nächsten Variation übergegangen werden kann, betrachten wir eine weitere Darstellungsform von [Definition 2.14](#).

BEMERKUNG 2.15.

Sei

$$A = [u_1 \dots u_r] \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_r^T \end{bmatrix}$$

wie in [Definition 2.14](#).

Dann ist $A_{11} = u_{1,1}\sigma_1v_{1,1}^T + u_{2,1}\sigma_2v_{2,1}^T + \dots + u_{r,1}\sigma_rv_{r,1}^T$.

Für die andere Komponenten von A kann die Summe analog gebildet werden. Wir erhalten also

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^r \sigma_k u_{k,i} v_{k,j}^T$$

$$\Leftrightarrow A = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T.$$

Damit kann A als *Summe von Rang-1-Matrizen* dargestellt werden, da für $i \in \{1, \dots, r\}$ die Zeilen von $(\sigma_i u_i v_i^T) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ein Vielfaches von v_i^T und die Spalten ein Vielfaches von u_i sind.

Beachte, dass $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r$ und $\|u_i\| = 1 = \|v_i\|$, also gilt komponentenweise: $\sigma_1 u_1 v_1^T \geq \sigma_2 u_2 v_2^T \geq \dots \geq \sigma_r u_r v_r^T$.

Nun wird die womöglich interessanteste Art der Singulärwertzerlegung für diverse Anwendungsfälle definiert.

DEFINITION 2.16.

Seien $m, n \in \mathbb{N}$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\text{rg}(A) = r$ und $A = U_r \Sigma_r V_r^T = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T$ die reduzierte SVD von A mit $U_r \in \mathbb{R}^{m \times r}$, $\Sigma_r \in \mathbb{R}^{r \times r}$ und $V_r \in \mathbb{R}^{n \times r}$.

Für $k < r$ sei die *trunkierte SVD* definiert mit:

$$A \approx \sum_{i=1}^k \sigma_i u_i v_i^T = A_k.$$

Zur [Definition 2.16](#) sei angemerkt, dass sich A_k für größere Werte von k zunehmend A annähert, aber da komponentenweise $\sigma_1 u_1 v_1^T \geq \dots \geq \sigma_r u_r v_r^T$ gilt (siehe [Bemerkung 2.15](#)), kann bereits mit $k \ll r$ eine gute Approximation

erzielt werden. Außerdem sollte betont werden, dass $\text{rg}(A_k) = k < r$ ist, aufgrund dessen spricht man auch von einer *Niedrigrang-Approximation*.

Mit den beiden, in diesem Abschnitt eingeführten, Variationen der Singulärwertzerlegung sind alle wesentlichen Grundlagen für die Vertiefung verschiedener Anwendungsmöglichkeiten der SVD gelegt. Damit wird der theoretische Teil dieser Arbeit beendet und zur ersten praktischen Anwendung übergegangen.

HAUPTKOMPONENTENANALYSE

Die Hauptkomponentenanalyse (engl. *Principal Component Analysis*, PCA) ist ein Verfahren zur Dimensionsreduktion von Daten. Genauer: Es handelt sich um eine Methode, um komplexe Daten auf ihr Wesentliches zu reduzieren, was eine Weiterverarbeitung und Visualisierung erleichtert.

In diesem Kapitel wird zunächst die Intuition hinter der PCA erläutert, bevor der mathematische Hintergrund und insbesondere die Verbindung zur Singulärwertzerlegung beschrieben wird. Abschließend betrachten wir ein konkretes Anwendungsbeispiel und veranschaulichen dieses mithilfe der Programmiersprache Python.

3.1. INTUITION DER PCA

Angenommen, beim Familienessen käme die Frage auf, welche der mitgebrachten Weine sich am ähnlichsten sind. Um diese Frage zu beantworten, überlegt sich die Familie verschiedene Merkmale und ordnet jedem Wein für jedes Merkmal Zahlen zwischen -3 und 3 zu. Dadurch können die Weine als Punkte im Raum bezüglich der verschiedenen Werte dargestellt und anschließend analysiert werden, welche Weine sich gruppieren, also sich ähneln.

In [Abbildung A.1](#), zu finden im [Anhang A](#), wird dies für verschiedene $n := \text{Anzahl der Merkmale}$ verdeutlicht.

Das Problem wird schnell ersichtlich: Eine visuelle Interpretation ist zwar möglich, allerdings nur im niedrig-dimensionalen Raum, für eine größere Anzahl an Merkmalen (Dimensionen) besteht die Notwendigkeit, die Anzahl zu reduzieren. Diese Dimensionsreduktion stellt in vielen Fällen auch unabhängig von der visuellen Interpretation eine sinnvolle Maßnahme dar. In Bezug auf unser Beispiel bestehe die Möglichkeit, dass „Alkoholgehalt“ und „Schwere“ stark korrelieren und somit redundant für eine Rekonstruktion der Weine sind. Eine andere Möglichkeit zur Reduzierung der Merkmale ist dadurch gegeben, dass gewisse Merkmale wenig Informationen über die Charakteristiken der Weine

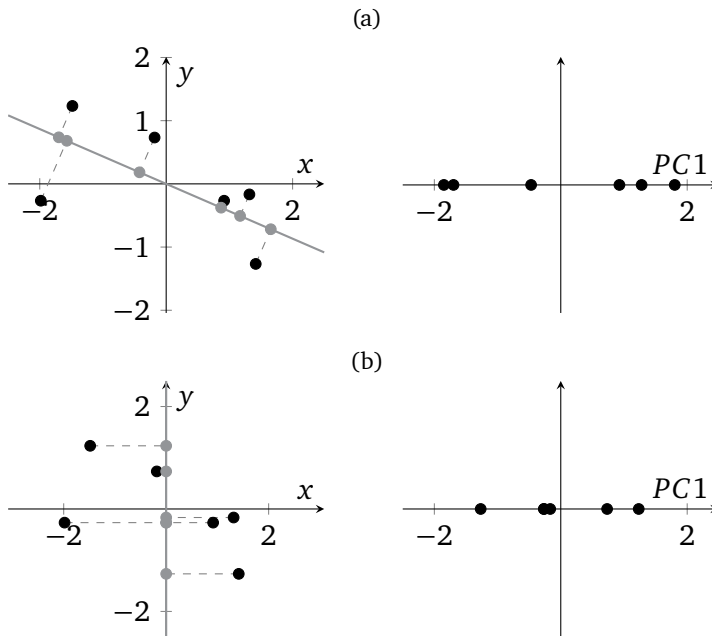


Abb. 3.1. Projektionen im zweidimensionalen Raum

enthalten, wie beispielsweise die Flaschenform oder die Fließgeschwindigkeit.

Die Hauptkomponentenanalyse konstruiert neue, unkorrelierte Richtungen, die sich als Linearkombinationen aus den bestehenden Merkmalen zusammensetzen. Dadurch könnten beispielsweise „Alkoholgehalt“ und „Schwere“ zu einer neuen *Hauptrichtung* zusammengefasst werden. Anschließend werden die Weine auf den durch diese Richtung definierten Unterraum projiziert. Die projizierten Koordinaten entlang dieser neuen Achse ergeben die erste *Hauptkomponente* (PC1). Der Unterschied zwischen Hauptrichtung und Hauptkomponente wird am Ende der Intuition präzisiert.

Die Projektion wird in [Abbildung 3.1](#) veranschaulicht. Der Unterschied zwischen [Abbildung 3.1a](#) und [Abbildung 3.1b](#) zeigt folgendes Problem auf: Wie kann die neue Richtung optimal gewählt werden, sodass unsere Daten trotz der Dimensionsreduktion so originalgetreu wie möglich rekonstruiert werden können? Dafür gibt es zwei alternative, aber äquivalente, Formulierungen:

1. Die Richtung wird so konstruiert, dass ein Minimum an Informationen verloren wird.
2. Die Richtung wird so konstruiert, dass eine maximale Varianz erhalten bleibt.

Eine Äquivalenz dieser beiden Aussagen kann durch den Satz des Pythagoras hergeleitet werden, indem das rechtwinklige Dreieck zwischen einem Punkt, dessen Projektion und dem Ursprung betrachtet wird. Wird der Informationsverlust (Distanz zwischen der Projektion und dem Original) minimiert, maximiert sich die Varianz (Abstand zum Ursprung). Es sei angemerkt, dass dafür von einer Zentrierung der Daten ausgegangen wird, also von einem Mittelwert gleich null.

Mit diesem Hintergrund wird intuitiv ersichtlich, dass [Abbildung 3.1a](#) im Vergleich zu [Abbildung 3.1b](#) vorzuziehen ist, was sich im Ergebnis widerspiegelt, in dem die räumliche Verteilung im Wesentlichen erhalten bleibt.

In vielen mathematischen Texten erfolgt keine klare Differenzierung zwischen den Begriffen Hauptrichtung und Hauptkomponente. Stattdessen wird der Begriff Hauptkomponente häufig synonym für beide verwendet. In dieser Arbeit definieren wir die erste Hauptrichtung als den Einheitsvektor, der den eindimensionalen Unterraum aufspannt, auf den die Daten mit maximaler Varianz projiziert werden. Die erste Hauptkomponente bezeichnet die projizierten Koordinaten der Datenpunkte entlang dieser Hauptrichtung. In höheren Dimensionen wird die zweite Hauptrichtung so gewählt, dass sie orthogonal zur ersten Hauptrichtung liegt und die verbleibende Varianz maximiert. Dies kann beliebig fortgesetzt werden, die PCA besitzt allerdings die nützliche Eigenschaft, dass die Hauptrichtungen nach „Wichtigkeit“ sortiert sind, also die ersten Richtungen bereits den Großteil der Varianz erklären. Eine genauere Erläuterung dieser Aussage wird dabei in der folgenden mathematischen Herleitung gegeben.

3.2. MATHEMATISCHE HERLEITUNG

Bevor die vorangegangenen Überlegungen formalisiert werden können, rekapitulieren wir durch [Wiederholung 3.1](#) die Formel der orthogonalen Projektion.

WIEDERHOLUNG 3.1.

Sei $n \in \mathbb{N}$ und $u, x \in \mathbb{R}^n$ mit $\|u\| = 1$.

Dann ist der orthogonal projizierte Vektor $\text{proj}_u(x)$ von x auf u gegeben durch

$$\text{proj}_u(x) = \langle x, u \rangle u = (x^T u) u.$$

Das Ziel der Herleitung in diesem Abschnitt wird durch [Anwendung 3.2](#) zusammengefasst.

ANWENDUNG 3.2 (PCA).

Seien $n, d \in \mathbb{N}$ und

$$X = [x_1 \dots x_d] \in \mathbb{R}^{n \times d}$$

eine standardisierte^a Datenmatrix, die d Merkmale über n Objekte hinweg speichert und

$$\mathbb{R}^d \ni x^{(i)} := X_{i,:} \quad \text{für } i \in \{1, \dots, n\},$$

die i -te (transponierte) Zeile von X , also ein Datenpunkt.

Bei der Projektion der Daten auf \mathbb{R}^k für $\mathbb{N} \ni k < d$ mit dem Ziel, dass die maximale Varianz der $x^{(i)}$ erhalten bleiben soll, wird die Basis von \mathbb{R}^k durch die ersten k Hauptrichtungen $u_j \in \mathbb{R}^d$ für $j \in \{1, \dots, k\}$ gegeben. Diese entsprechen den Eigenvektoren der Matrix $\frac{1}{n} X^T X \in \mathbb{R}^{d \times d}$, sortiert in absteigender Reihenfolge der zugehörigen Eigenwerte.

^aSiehe [Schritt 1](#) im Beweis

Beweis. Der Beweis orientiert sich zum Großteil an [NM23, S. 166-169] und [Hsu16, S. 32 f.].

Schritt 1. Vorbereitung der Daten:

Wir standardisieren zunächst X , indem

$$x_j^{(i)} \leftarrow \frac{x_j^{(i)} - \mu_j}{\sigma_j} \quad \text{für alle } j \in \{1, \dots, d\},$$

wobei

$$\mu_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_j^{(i)}, \quad \sigma_j^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_j^{(i)} - \mu_j)^2$$

jeweils die Mittelwerte, bzw. die Varianzen der einzelnen Merkmale, also der Spalten sind. Durch die Subtraktion des Mittelwerts werden die Daten um den Ursprung zentriert. Die Division durch die Standardabweichung verhindert Ungenauigkeiten, die aufgrund unterschiedlicher Skalen der Merkmale entstehen könnten. Falls Merkmal A beispielsweise das Bruttoinlandsprodukt und Merkmal B die Geburtenrate verschiedener Länder darstellt, wird dadurch eine Vergleichbarkeit gewährleistet.

Schritt 2. Herleitung für $k = 1$:

Es sei daran erinnert, dass die erste Hauptrichtung der Richtung entspricht,

die die Varianz der Projektion maximiert. Dafür wird zunächst der Mittelwert μ_{proj} der projizierten Vektoren berechnet:

$$\mu_{\text{proj}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x^{(i)T} u) u = \left(\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x^{(i)} \right)^T u \right) u = \mathbf{0},$$

da durch die Standardisierung der Spaltenmittelwert für jede Spalte von X null beträgt, wodurch

$$\sum_{i=1}^n x^{(i)} = \mathbf{0}.$$

Die Entfernung (Abweichung) vom Mittelwert, also hier vom Ursprung, für einen beliebigen Vektor $x^{(i)}$ beträgt

$$\|\text{proj}_u(x^{(i)})\| = \|(x^{(i)T} u) u\| = |(x^{(i)T} u)| \|u\| = |x^{(i)T} u|.$$

Damit ist die Varianz der projizierten Punkte gegeben durch

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x^{(i)T} u)^2 &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x^{(i)T} u x^{(i)T} u \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n u^T x^{(i)} x^{(i)T} u \quad (\text{Skalarprodukt kommutativ}) \\ &= u^T \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x^{(i)} x^{(i)T} \right) u \end{aligned}$$

Definiere

$$\Sigma := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x^{(i)} x^{(i)T} = \frac{1}{n} X^T X \in \mathbb{R}^{d \times d}.$$

Bei standardisierten Daten ist diese Matrix als *Kovarianzmatrix* bekannt, in unserem Fall ist sie die Kovarianzmatrix der verschiedenen Merkmale. Damit haben wir das Ziel der Herleitung auf folgendes Optimierungsproblem reduziert:

$$\begin{aligned} \max \quad & u^T \Sigma u, \\ \text{u.d.B.} \quad & \|u\| = 1. \end{aligned}$$

Dieses Optimierungsproblem wird in der Literatur meist mithilfe von Lagrange-Multiplikatoren gelöst. In dieser Arbeit werden wir einen anderen Ansatz verfolgen und mit dem, im vorherigen Kapitel bewiesenen, Spektralsatz ([Satz 2.5](#))

vorgehen. Beachte dafür zunächst, dass Σ symmetrisch ist:

$$\Sigma^T = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x^{(i)} x^{(i)T} \right)^T = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(x^{(i)} x^{(i)T} \right)^T = \Sigma.$$

Damit sind die Voraussetzungen für den Spektralsatz erfüllt, womit

$$\Sigma = R \Lambda R^T$$

für orthogonales $R = [r_1 \dots r_d] \in \mathbb{R}^{d \times d}$ und diagonales $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_d)$ mit $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_d$. Für $w := R^T u$ gilt dann

$$u^T \Sigma u = u^T R \Lambda R^T u = w^T \Lambda w = w^T \begin{bmatrix} \lambda_1 w_1 \\ \vdots \\ \lambda_d w_d \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^d \lambda_i w_i^2.$$

Nach Bedingung ist $\|u\| = 1$, wodurch:

$$\|w\| = \|R^T u\| = \sqrt{\langle R^T u, R^T u \rangle} = \sqrt{u^T R R^T u} = \|u\| = 1.$$

Da

$$\sum_{i=1}^d \lambda_i w_i^2 = \lambda_1 w_1^2 + \lambda_2 w_2^2 + \dots + \lambda_d w_d^2$$

und $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_d$ wird der Ausdruck maximiert für $w = \mathbf{e}_1$. Es folgt

$$u = R w = R \mathbf{e}_1 = r_1,$$

womit u nach [Korollar 2.6](#) gleich dem zugehörigen Eigenvektor zum größten Eigenwert von Σ ist.

Schritt 3. Herleitung für beliebiges k mit vollständiger Induktion über k :
Induktionsanfang. Gegeben durch [Schritt 2](#).

Induktionshypothese. Angenommen die ersten $k - 1$ Eigenvektoren r_1, \dots, r_{k-1} von Σ maximieren die Varianz der Projektion.

Induktionsschritt. Wir wollen zeigen, dass

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n (x^{(i)T} u_j)^2$$

maximiert wird für $u_k = r_k$. Betrachte dafür

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n (x^{(i)T} u_j)^2 = \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^{k-1} \sum_{i=1}^n (x^{(i)T} u_j)^2}_A + \underbrace{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x^{(i)T} u_k)^2}_B.$$

Nach Induktionshypothese ist A maximal für $u_1 = r_1, u_2 = r_2, \dots, u_{k-1} = r_{k-1}$. Um B zu maximieren, wird analog zu [Schritt 2](#) vorgegangen. Es wird zunächst das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \max \quad & u_k^T \Sigma u_k, \\ \text{u.d.B.} \quad & \|u_k\| = 1, \\ & \langle u_k, u_i \rangle = 0 \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, k-1\}, \end{aligned}$$

aufgestellt mit zusätzlicher Orthogonalitätsbedingung. Anschließend kann, mithilfe der zusätzlichen Eigenschaft, dass Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten bei symmetrischen Matrizen orthogonal sind ([Bemerkung 2.7](#)), das Optimierungsproblem durch $u_k = r_k$ gelöst werden, womit der Beweis abgeschlossen ist.

Hinweis. Die i -te Hauptkomponente ist dann durch Xu_i gegeben, wodurch die Projektionen der Datenpunkte auf u_i im durch u_i aufgespannten Unterraum zusammengefasst werden. \square

KOROLLAR 3.3.

Seien die Voraussetzungen aus [Anwendung 3.2](#) gegeben.

Die Varianz der Datenpunkte entlang einer beliebigen Hauptrichtung $u_j \in \mathbb{R}^d$ für $j \in \{1, \dots, k\}$ entspricht genau dem zugehörigen Eigenwert λ_j zu u_j .

Beweis. Wie bereits im vorherigen Beweis gezeigt, ist die Varianz der Datenpunkte entlang von u_j gegeben durch

$$u_j^T \Sigma u_j.$$

Mit dem Wissen, dass u_j ein Eigenvektor von Σ mit zugehörigem Eigenwert λ_j ist, kann dies umgeformt werden zu

$$u_j^T (\lambda_j u_j) = \lambda_j u_j^T u_j = \lambda_j,$$

da $\|u_j\| = 1$. \square

BEMERKUNG 3.4.

Daraus ergibt sich die bereits in der [Intuition](#) erwähnte Eigenschaft der Hauptkomponentenanalyse: Ein Großteil der Varianz kann bereits durch die ersten Hauptkomponenten erklärt werden, da die Eigenwerte der Kovarianzmatrix Σ in absteigender Reihenfolge die jeweilige Varianz angeben.

3.3. VERBINDUNG ZUR SVD

Das Ziel dieses Abschnitts ist, die Hauptrichtungen, -komponenten und die Varianzen mithilfe der Singulärwertzerlegung der Datenmatrix auszudrücken, statt mit der Spektralzerlegung der Kovarianzmatrix. Diese Art der Berechnung wird in der Praxis häufig verwendet, da sie einen entscheidenden Vorteil besitzt, auf den am Ende des Abschnitts genauer eingegangen wird.

Sei also erneut $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$ eine standardisierte Datenmatrix mit zugehöriger Kovarianzmatrix

$$\Sigma = \frac{1}{n} X^T X = V \Lambda V^T \quad (3.1)$$

nach dem [Spektralsatz](#) für orthogonales $V \in \mathbb{R}^{d \times d}$, welches die Eigenvektoren von Σ als Spaltenvektoren enthält und diagonales Λ mit den zugehörigen Eigenwerten auf der Diagonalen.

Sei außerdem

$$X = U S V^T$$

die [Singulärwertzerlegung](#) von X mit „diagonalem“ $S \in \mathbb{R}^{n \times d}$ und orthogonalem $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Da die Eigenvektoren von $\Sigma = \frac{1}{n} X^T X$ und $X^T X$ identisch sind (folgt direkt aus [Definition 2.1](#); nur die Eigenwerte unterscheiden sich um einen Faktor n), ist V die gleiche Matrix wie in (3.1). Folglich sind die Hauptrichtungen durch die Spalten von V gegeben.

Um die Varianzen zu ermitteln, betrachten wir

$$\frac{1}{n} X^T X = \frac{1}{n} V S^T U^T U S V^T = V \frac{S^T S}{n} V^T = V \Lambda V^T.$$

Für $\text{rg}(X) = r$ und $i \in \{1, \dots, r\}$ kann damit ein beliebiger Eigenwert λ_i von Σ , also die Varianz zur i -ten Hauptrichtung, durch den Singulärwert σ_i von X ausgedrückt werden mit

$$\lambda_i = \frac{\sigma_i^2}{n},$$

wobei $\lambda_i = 0$ für $i > r$.

Die Hauptkomponente zu einer beliebigen Hauptrichtung v wird, wie bereits in der Herleitung angemerkt, durch Xv beschrieben. Es lassen sich also alle Hauptkomponenten zusammenfassen durch

$$XV = USV^TV = US.$$

Damit lässt sich die Hauptkomponentenanalyse vollständig durch die Singulärwertzerlegung ausdrücken:

- Die Hauptrichtungen durch die Spaltenvektoren von V .
- Die Hauptkomponenten durch US .
- Die Varianzen durch $\frac{\sigma_i^2}{n}$ mit $n := \text{Anzahl der Objekte}$.

Der Vorteil, die PCA mit der SVD von X zu berechnen, statt mit der Spektralzerlegung von Σ , zeichnet sich durch die numerische Stabilität der Berechnung aus. Um dies zu zeigen, wird ein Exkurs in die algorithmische Mathematik vorgenommen, wobei die für uns wichtigen Konzepte in [Wiederholung 3.5](#) rekapituliert werden.

WIEDERHOLUNG 3.5.

- Die *Kondition* eines Problems gibt an, wie sich kleine Eingabefehler auf den Ausgabefehler auswirken. Bei einem gut konditionierten Problem führen kleine Eingabefehler zu kleinen Ausgabefehlern.
- Ein Algorithmus ist dann *numerisch stabil*, falls der nicht vermeidbare Fehler, bedingt durch die Kondition, nicht weiter verstärkt wird.
- Für eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $\text{rg}(A) = r$ ist die *Konditionszahl* κ gegeben durch

$$\kappa(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_r},$$

wobei σ_1 den größten und σ_r den kleinsten Singulärwert von A darstellt.

- Desto kleiner die Konditionszahl ist, desto besser konditioniert ist das Problem.

Wir zeigen nun, dass Σ schlechter konditioniert ist als X und somit anfälliger für Ungenauigkeiten bei numerischen Berechnungen, wie dem Bestimmen

von Eigenwerten. Nach [Wiederholung 3.5](#) kann die Konditionszahl mithilfe der Singulärwerte von Σ bestimmt werden, die als die Wurzeln der positiven Eigenwerte von $\Sigma^T \Sigma = \Sigma^2$ gegeben sind.

Sei v ein beliebiger Eigenvektor von Σ zum Eigenwert λ , dann gilt

$$\Sigma^2 v = \Sigma \Sigma v = \Sigma \lambda v = \Sigma v \lambda = \lambda^2 v.$$

Daraus folgt, dass die Eigenvektoren von Σ und Σ^2 identisch sind, während die Eigenwerte quadriert werden. Die Singulärwerte von Σ entsprechen damit den Eigenwerten von Σ und

$$\kappa(\Sigma) = \frac{\sigma_1^2/n}{\sigma_r^2/n} = \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_r} \right)^2 = \kappa(X)^2.$$

Die Konditionszahl von Σ ist somit das Quadrat der Konditionszahl von X , was insbesondere bei schlecht konditionierten Matrizen zu erheblichen Ungenauigkeiten führen kann.

Diese Folgerung veranschaulichen wir an einem Beispiel. Sei

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{bmatrix},$$

die sogenannte *Läuchli-Matrix*. Die quadrierten Singulärwerte von X sind bekannt und gegeben durch

$$\sigma_1^2 = 3 + \varepsilon^2, \quad \sigma_2^2 = \varepsilon^2, \quad \sigma_3^2 = \varepsilon^2.$$

Um diese Werte zu berechnen, verwenden wir zum einen die Singulärwertzerlegung von X und zum anderen die direkte Berechnung der Eigenwerte von $X^T X$. Mithilfe von Python erreichen wir dies durch:

```
1 # Quadrate der Singulärwerte von X
2 singular_values = np.linalg.svd(X, compute_uv=False)
3 singular_values_squared = singular_values**2
4 # Eigenwerte von X^T X
5 eigvals = np.linalg.eigvalsh(X.T @ X)[:,-1]
```

Die Funktionen `np.linalg.eigvalsh` und `np.linalg.svd` berechnen dabei jeweils die Eigenwerte einer reell symmetrischen Matrix, bzw. die Singulärwertzerlegung einer Matrix, wobei in diesem Beispiel durch `compute_uv=False`

ausschließlich die Singulärwerte berechnet werden. Der vollständige Code ist zu finden unter [Code B.1](#) in [Anhang B](#).

Für $\varepsilon = 10^{-3}$, 10^{10} und 10^{-20} erhalten wir damit folgenden Output:

```
Epsilon: 0.001
Eigenwerte vs. Quadrate der Singulärwerte:
3.000e+00      3.000e+00
1.000e-06      1.000e-06
1.000e-06      1.000e-06
-
Epsilon: 1e-10
Eigenwerte vs. Quadrate der Singulärwerte:
3.000e+00      3.000e+00
-1.770e-17      1.000e-20
-5.849e-16      1.000e-20
-
Epsilon: 1e-20
Eigenwerte vs. Quadrate der Singulärwerte:
3.000e+00      3.000e+00
-1.770e-17      1.000e-40
-5.849e-16      1.000e-40
-
```

Es lässt sich beobachten, dass für $\varepsilon = 10^{-3}$ beide Berechnungsmethoden übereinstimmen und exakt arbeiten. Für $\varepsilon = 10^{-10}$ und $\varepsilon = 10^{-20}$ treten jedoch Ungenauigkeiten in der direkten Eigenwertberechnung von $X^T X$ auf, während die SVD weiterhin zu stabilen Ergebnissen führt.

EMPFEHLUNGSSYSTEME

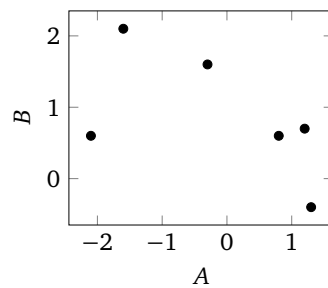
Empfehlungssysteme sind eine Anwendungsart der Singulärwertzerlegung, mit der bereits die meisten Menschen in Kontakt gekommen sind. Seien es die Empfehlungen von Filmen bei Netflix oder Produktempfehlungen bei Amazon, die Wahrscheinlichkeit ist groß, dass dies mithilfe einer Abwandlung der SVD erfolgt. In diesem Kapitel wird die mathematische Erklärung hinter diesen Empfehlungen erläutert und mithilfe von Python ein eigenes Empfehlungssystem für Filme, basierend auf tatsächlichen Bewertungen, programmiert.

LITERATURVERZEICHNIS

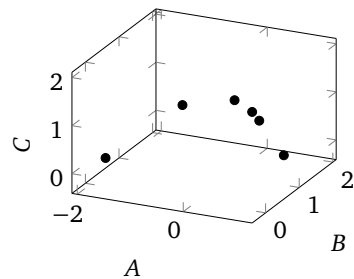
- [Che20] G. Chen. *Lecture 5: Singular Value Decomposition (SVD)*. San José State University, 2020.
URL: <https://www.sjsu.edu/faculty/guangliang.chen/Math253S20/lec5svd.pdf> (Stand: 20. 01. 2025).
- [Cra22] T. Crawford. *Oxford Linear Algebra: Spectral Theorem Proof*. 2022.
URL: <https://tomrocksmaths.com/2022/11/18/oxford-linear-algebra-spectral-theorem-proof/> (Stand: 02. 01. 2025).
- [Hsu16] D. Hsu. *Machine Learning Theory. COMS 4772. Topic 5: Principal Component Analysis*. Columbia University, 2016. URL: <https://www.cs.columbia.edu/~djhsu/AML/lectures/notes-pca.pdf> (Stand: 25. 02. 2025).
- [Joh21] N. Johnston. *Advanced Linear and Matrix Algebra*. Cham: Springer, 2021.
- [NM23] A. Ng und T. Ma. *Machine Learning. CS229 Lecture Notes*. Stanford University, 2023.
URL: https://cs229.stanford.edu/main_notes.pdf (Stand: 23. 02. 2025).
- [Str03] G. Strang. *Lineare Algebra*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2003.

ABBILDUNGEN

Weine	Merkmale	
	A	B
Wein 1	1,3	-0,4
Wein 2	-1,6	2,1
Wein 3	1,2	0,7
Wein 4	-2,1	0,6
Wein 5	0,8	0,6
Wein 6	-0,3	1,6

(a) $n = 2$ 

Weine	Merkmale		
	A	B	C
Wein 1	1,3	-0,4	1,9
Wein 2	-1,6	2,1	0,2
Wein 3	1,2	0,7	0,4
Wein 4	-2,1	0,6	-0,2
Wein 5	0,8	0,6	1,1
Wein 6	-0,3	1,6	0,8

(b) $n = 3$ 

Wein	Merkmale			
	A	B	C	D
Wein 1	1,3	-0,4	1,9	0,7
Wein 2	-1,6	2,1	0,2	0,9
Wein 3	1,2	0,7	0,4	1,3
Wein 4	-2,1	0,6	-0,2	0,5
Wein 5	0,8	0,6	1,1	-0,8
Wein 6	-0,3	1,6	0,8	-1,3

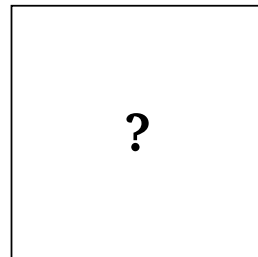
(c) $n = 4$ 

Abb. A.1. Darstellung von Daten in verschiedenen Dimensionen

PROGRAMMCODE

```
1 import numpy as np
2
3 # Funktion zur Erstellung der Lächli-Matrix für gegebenes epsilon
4 def laeuchli_matrix(epsilon):
5     L = np.zeros((4, 3))
6     L[0, :] = 1
7     np.fill_diagonal(L[1:, :], epsilon)
8     return L
9
10 # Verschiedene Werte für epsilon
11 epsilons = [1e-3, 1e-10, 1e-20]
12
13 for epsilon in epsilons:
14     L = laeuchli_matrix(epsilon)
15
16     # Eigenwerte von  $L^T L$ 
17     eigvals = np.linalg.eigvalsh(L.T @ L)[::-1]
18
19     # Quadrate der Singulärwerte von L
20     singular_values = np.linalg.svd(L, compute_uv=False)
21     singular_values_squared = singular_values**2
22
23     print(f"Epsilon: {epsilon}")
24     print("Eigenwerte vs. Quadrate der Singulärwerte:")
25     for ev, sv in zip(eigvals, singular_values_squared):
26         print(f"{{ev:.3e}}          {{sv:.3e}}")
27     print("-")
```

Code B.1. Berechnungsunterschiede Lächli-Matrix