

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 26. Februar 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 26. Februar 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	15
3. HAUPTKOMPONENTENANALYSE	19
3.1. Intuition der PCA	19
3.2. Mathematische Herleitung	21
LITERATURVERZEICHNIS	25
A. ABBILDUNGEN	27

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abb. 2.1. Wirkung von A auf die Einheitssphäre	15
Abb. 2.2. Visualisierung der Singulärwertzerlegung	16
Abb. 3.1. Projektionen im zweidimensionalen Raum	20
Abb. A.1. Darstellung von Daten in verschiedenen Dimensionen	27

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 (Basiserganzungssatz).

Sei V ein beliebiger Vektorraum, $L \subseteq V$ linear unabhangig und $E \subseteq V$ ein Erzeugendensystem von V . Dann kann L durch Elemente aus E zu einer Basis von V erganzt werden.

Um die Existenz der Singularwertzerlegung fur beliebige Matrizen zu beweisen, bedarf es der Hilfe eines anderen Satzes, des sogenannten Spektralsatzes. Dieser hat keine eindeutige Ausfuhrung, sondern beschreibt vielmehr mehrere verwandte Aussagen der Mathematik, wobei sich in dieser Arbeit auf seine Folgerungen fur symmetrische Matrizen beschrankt wird. Es ist ebenfalls wichtig zu betonen, dass der Spektralsatz zwar hier „nur“ fur den Beweis der Singularwertzerlegung verwendet wird, eine Bezeichnung als Hilfssatz jedoch irrefuhrend ware, da der Satz fur sich genommen bereits eine bedeutende Aussage der linearen Algebra und Funktionalanalysis darstellt. Um den Spektralsatz fur symmetrische Matrizen einfuhren und anschlieend beweisen zu konnen, benotigen wir zunachst [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 unabhangigen 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 $R^{-1}AR = \Lambda$ 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.

Schritt 1. Dafür wird zunächst die Symmetrie von B gezeigt:

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

Schritt 2. 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

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

$$AR = R\Lambda,$$

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 $r_i \neq 0$ 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 Diagonalmatrix $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 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

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

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

den wir die Singulärwertzerlegung und veranschaulichen die Zwischenschritte von $Av = U\Sigma V^T v$ anhand von einzelnen 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 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.

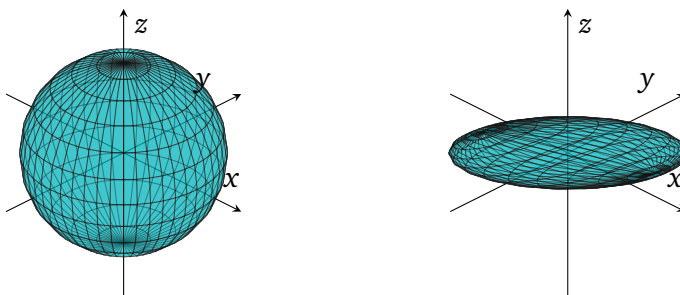


Abb. 2.1. Wirkung von A auf die Einheitskugel

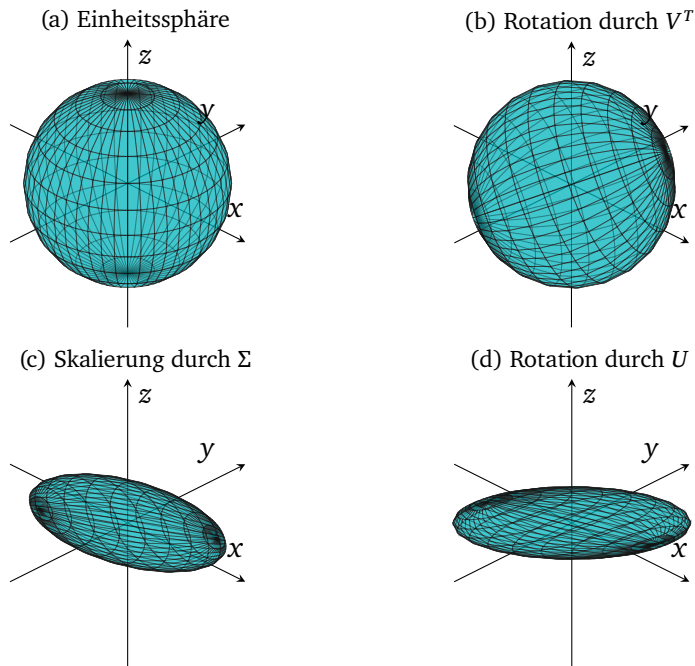


Abb. 2.2. Visualisierung der Singulärwertzerlegung

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 $A_{11} = u_{1,1}\sigma_1 v_{1,1}^T + u_{2,1}\sigma_2 v_{2,1}^T + \dots + u_{r,1}\sigma_r v_{r,1}^T$.

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

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \sum_{k=1}^r \sigma_k u_{k,i} v_{k,j}^T \\ \Leftrightarrow A &= \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T. \end{aligned}$$

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. Die Intuition und Mathematik orientiert sich dabei zum Großteil an [NM23, S. 165-169].

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 häufig auch unabhängig von der visuellen Interpretation eine sinnvolle Maßnahme dar, falls beispielsweise verschiedene Merkmale stark korrelieren und somit redundant für eine Rekonstruktion der Objekte sind.

Die Hauptkomponentenanalyse bietet dafür die Möglichkeit, indem neue,

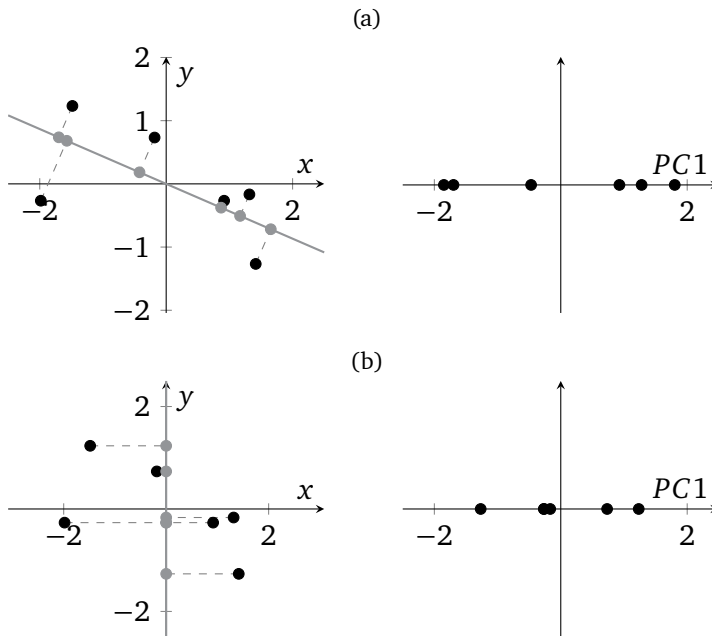


Abb. 3.1. Projektionen im zweidimensionalen Raum

unkorrelierte Komponenten konstruiert werden, die sich als Linearkombination aus den bestehenden Merkmalen zusammensetzen. An unserem konkreten Beispiel könnten beispielsweise Merkmale wie „Vollmundigkeit“ und „Farbintensität“ zu einer neuen Komponente (PC1) zusammengefasst werden. Anschließend werden die Weine auf den durch PC1 vorgegebenen Unterraum projiziert, was in [Abbildung 3.1](#) veranschaulicht wird.

Der Unterschied zwischen [Abbildung 3.1a](#) und [Abbildung 3.1b](#) zeigt folgendes Problem auf: Wie kann die neue Komponente 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 Komponente wird so konstruiert, dass ein Minimum an Informationen verloren wird.
2. Die Komponente 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,

dem projizierten Punkt 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 geblieben ist.

Die erste Hauptkomponente (PC1) stellt dann den Einheitsvektor dar, der als Basis den Unterraum aufspannt, auf den die Daten projiziert werden. In höheren Dimensionen wird die zweite Hauptkomponente unabhängig, also orthogonal zur ersten, gewählt, damit die verbleibende Varianz erneut maximiert wird. Dies kann beliebig fortgesetzt werden, die PCA besitzt allerdings die nützliche Eigenschaft, dass die Hauptkomponenten nach „Wichtigkeit“ sortiert sind, also die ersten Komponenten bereits den Großteil der Varianz erklären. Eine Präzision dieser Aussage wird dabei in der folgenden mathematischen Herleitung gegeben.

3.2. MATHEMATISCHE HERLEITUNG

Um die vorangegangenen Überlegungen zu formalisieren, wird zunächst die Datenmatrix

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

standardisiert, indem wir eine neue Matrix

$$\bar{X} = [\bar{x}_1 \dots \bar{x}_d] \in \mathbb{R}^{n \times d}$$

definieren mit

$$\bar{x}_{i,j} = \frac{x_{i,j} - \mu_i}{\sigma_i} \quad \text{für } i \in \{1, \dots, d\} \text{ und } j \in \{1, \dots, n\},$$

wobei

$$\mu_i = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_{i,j}, \quad \sigma_i^2 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_{i,j} - \mu_i)^2$$

jeweils die Mittelwerte, bzw. die Varianzen der einzelnen Merkmale, also der Spalten sind. Die Zentrierung um den Ursprung durch die Subtraktion des Mittelwerts vereinfacht dabei spätere Rechnungen erheblich, ist rein formal

allerdings nicht zwingend erforderlich. Durch die Division der Standardabweichung wird Ungenauigkeiten aufgrund verschiedener Skalen der Merkmale vorgebeugt. Falls Merkmal A beispielsweise das Bruttoinlandsprodukt und Merkmal B die Geburtenrate verschiedener Länder darstellt, wird dadurch eine Vergleichbarkeit gewährleistet. In den folgenden Berechnungen wird eine Standardisierung angenommen und weiterhin mit X gearbeitet. Wir definieren

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

also die i -te (transponierte) Zeile von X , wobei jede Zeile je einen Punkt im Raum darstellt.

Das Ziel ist, einen Einheitsvektor $u \in \mathbb{R}^d$ zu finden, sodass nach Projektion der Vektoren $x^{(i)}$ auf u eine maximale Varianz, also eine maximale quadratische Abweichung vom Mittelwert, erhalten bleibt. Die Projektion eines Vektors ist gegeben durch [Wiederholung 3.1](#).

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

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

Um die Varianz zu ermitteln 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 dem 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

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

Diese Matrix ist als *Kovarianzmatrix* bekannt, in unserem Fall ist sie die Kovarianzmatrix der verschiedenen Merkmale. Es sei angemerkt, dass Σ symmetrisch ist, beachte dafür:

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

Damit haben wir unser Ziel 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, wobei sich an [[Hsu16](#)] orientiert wird.

Da Σ symmetrisch ist, kann der Spektralsatz angewendet werden, 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 gilt $\|u\| = 1$, womit:

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

Da

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

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

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

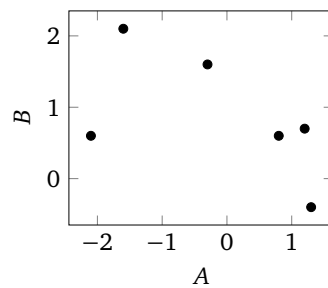
womit u nach [Korollar 2.6](#) gleich dem zugehörigen Eigenvektor zum größten Eigenwert von Σ ist.

LITERATURVERZEICHNIS

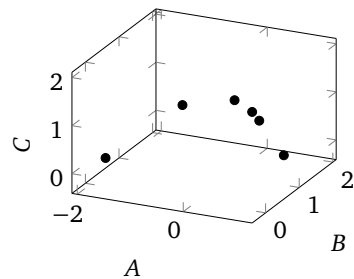
- [Che20] G. Chen. *Lecture 5: Singular Value Decomposition (SVD)*. San José State University, 2020.
URL: <https://www.sjsu.edu/faculty/guangliang.chen/Math253S20/lec5svd.pdf> (Stand: 20. 01. 2025).
- [Cra22] T. Crawford. *Oxford Linear Algebra: Spectral Theorem Proof*. 2022.
URL: <https://tomrocksmaths.com/2022/11/18/oxford-linear-algebra-spectral-theorem-proof/> (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

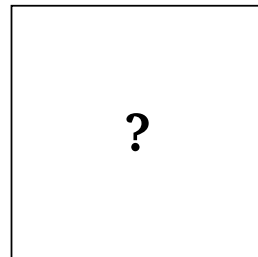
(c) $n = 4$ 

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