Multivariate Verfahren

MSc Psychologie & MSc Klinische Psychologie und Psychotherapie
Wintersemester 2024/2025

Joram Soch

(3) Eigenanalyse

© 2024 Dirk Ostwald & Joram Soch, CC BY 4.0

Spezielle Matrizen

Eigenvektoren und Eigenwerte

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Definition (Nullmatrizen und Einsmatrizen)

- Wir bezeichnen *Nullmatrizen* (und *Nullvektoren*) mit

$$0_{nm} := (0)_{1\le i\le n, 1\le j\le m} \in \mathbb{R}^{n\times m} \text{ und } 0_n := (0)_{1\le i\le n} \in \mathbb{R}^n \quad (1)$$

- Wir bezeichnen *Einsmatrizen* (und *Einsvektoren*) mit

$$1_{nm} := (1)_{1\le i\le n, 1\le j\le m} \in \mathbb{R}^{n\times m} \text{ und } 1_n := (1)_{1\le i\le n} \in \mathbb{R}^n \quad (2)$$

Bemerkungen

- 0_{nm} und 0_n bestehen nur aus Nullen.
- 1_{nm} und 1_n bestehen nur aus Einsen.
- Es gelten zum Beispiel

$$0_n 0_m^{\mathrm{T}} = 0_{nm} \quad (3)$$

und

$$1_n 1_m^{\mathrm{T}} = 1_{nm}. \quad (4)$$

© 2024 Dirk Ostwald & Joram Soch, CC BY 4.0

Definition (Einheitsmatrizen und Einheitsvektoren)

- Wir bezeichnen die *Einheitsmatrix* als

$$I_n := (i_{jk})_{1\le j\le n, 1\le k\le n} \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ mit } i_{jk} = 1 \text{ für } j = k \text{ und } i_{jk} = 0 \text{ für } j \ne k. \tag{5}$$

- Wir bezeichnen die *Einheitsvektoren* $e_i, i = 1, ..., n$ als

$$e_i := (e_{i_j})_{1\le j\le n} \in \mathbb{R}^n \text{ mit } e_{i_j} = 1 \text{ für } i = j \text{ und } e_{i_j} = 0 \text{ für } i \ne j. \tag{6}$$

Bemerkungen

- I_n besteht nur aus Nullen und Diagonalelementen gleich Eins.
- $e_i, i = 1, ..., n$ besteht nur aus Nullen und einer Eins in der $i$ten Komponente.
- Es gilt

$$I_n = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & ... & e_n \end{pmatrix} \tag{7}$$

- Es gilt auch

$$I_n = \left(e_i^{\mathrm{T}} e_j\right)_{1\le j\le n, 1\le k\le n} \tag{8}$$

- Es gelten weiterhin für $1 \le i, j \le n$

$$e_i^{\mathrm{T}} e_j = 0 \text{ für } i \ne j \text{ sowie } e_i^{\mathrm{T}} e_i = 1 \quad \text{und} \quad e_i^{\mathrm{T}} v = v^{\mathrm{T}} e_i = v_i \text{ für } v \in \mathbb{R}^n. \tag{9}$$

Definition (Diagonalmatrix)

Eine Matrix $D \in \mathbb{R}^{n \times m}$ heißt *Diagonalmatrix*, wenn $d_{ij} = 0$ für $1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m$ mit $i \neq j$.

Bemerkungen

- Eine Diagonalmatrix $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit Diagonalelementen $d_1, ..., d_n$ schreibt man auch als

$$D = \mathsf{diag}(d_1, ..., d_n). \tag{10}$$

- Diagonalmatrizen haben viele "gute" Eigenschaften.
- Zum Beispiel überzeugt man sich leicht davon, dass Multiplikation einer Matrix A von links mit einer Diagonalmatrix D der Multiplikation der Zeilen der Matrix A mit den entsprechenden Diagonaleinträgen von D entspricht. Die Multiplikation von rechts entspricht der Multiplikation der Spalten von A mit den entsprechenden Diagonaleinträgen von D.
- Eine weitere wichtige Eigenschaft ist

$$D := \mathsf{diag}(d_1, ..., d_n) \Rightarrow |D| = \prod_{i=1}^{n} d_i \tag{11}$$

- Für Beweise dieser Eigenschaften wird auf die einschlägige Literatur, z.B. Searle (1982), verwiesen.

Definition (Symmetrische Matrix)

Eine Matrix $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt *symmetrisch*, wenn gilt dass $S^{\mathrm{T}} = S$.

Bemerkungen

- Symmetrische Matrizen sind spezielle quadratische Matrizen.
- Eine symmetrische Matrix ist eine Matrix, deren Transponiertes gleich ihr selbst ist.
- Symmetrische Matrizen haben viele "gute" Eigenschaften.
- Beispielweise gilt für die Summe zweier symmetrischer Matrizen, dass auch diese wieder symmetrisch ist

$$A = A^{\mathrm{T}} \text{ und } B = B^{\mathrm{T}} \Rightarrow A + B = (A + B)^{\mathrm{T}} \tag{12}$$

  und dass die Inverse einer symmetrischen Matrix, sofern sie existiert, auch symmetrisch ist,

$$S^{\mathrm{T}} = S \Rightarrow \left(S^{-1}\right)^{\mathrm{T}} = S^{-1}. \tag{13}$$

- Für Beweise dieser Eigenschaften wird auf die einschlägige Literatur, z.B. Searle (1982), verwiesen.

Definition (Positiv-definite Matrizen und positiv-semidefinite Matrizen)

Eine quadratische Matrix $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt *positiv-definit*, wenn C symmetrisch ist und gilt, dass

$$x^{\mathrm{T}} C x > 0 \text{ für alle } x \in \mathbb{R}^n \text{ mit } x \neq 0_n. \tag{14}$$

Wenn $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ positiv-definit ist, so schreiben wir $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pd.

Eine quadratische Matrix $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt *positiv-semidefinit*, wenn C symmetrisch ist und gilt, dass

$$x^{\mathrm{T}} C x \geq 0 \text{ für alle } x \in \mathbb{R}^n \text{ mit } x \neq 0_n. \tag{15}$$

Wenn $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ positiv-semidefinit ist, so schreiben wir $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ psd.

Bemerkungen

- Positive-definite und positiv-semidefinite Matrizen sind spezielle symmetrische Matrizen.
- Kovarianzmatrixparameter von multivariaten Normalverteilungen sind positiv-definite Matrizen.
- Kovarianzmatrizen von Zufallsvektoren sind positiv-semidefinite Matrizen.
- Positiv-definite Matrizen haben viele "gute" Eigenschaften.
- Beispielsweise existiert die Inverse C^{-1} einer positiv-definiten Matrix C und ist selbst positiv-definit. Für einen Beweis dieser Eigenschaft verweisen wir auf die weiterführende Literatur, z.B. Searle (1982).

Definition (Orthogonale Matrix)

Eine Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt *orthogonal*, wenn

$$Q^{\mathrm{T}} Q = I_n. \tag{16}$$

Bemerkung

- Orthogonale Matrizen sind spezielle quadratische Matrizen.
- Die Spalten einer orthogonalen Matrix sind also paarweise orthogonal. Es gilt für

$$Q = \begin{pmatrix} q_1 & \cdots & q_n \end{pmatrix} \text{ mit } q_i \in \mathbb{R}^n \text{ für } 1 \le i \le n, \tag{17}$$

dass

$$q_i^{\mathrm{T}} q_j = 0 \text{ für } i \neq j \text{ und } q_i^{\mathrm{T}} q_j = 1 \text{ für } i = j \text{ mit } 1 \le i, j \le n. \tag{18}$$

Theorem (Eigenschaften orthogonaler Matrizen)

$Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sei eine orthogonale Matrix. Dann gelten:

(1) (*Inverse*) Die Inverse von Q ist Q^{T}, es gilt

$$Q^{-1} = Q^{\mathrm{T}}. \tag{19}$$

(2) (*Transposition*) Multiplikation mit der Transponierten ergibt die Einheitsmatrix, es gilt

$$QQ^{\mathrm{T}} = I_n. \tag{20}$$

(3) (*Determinante*) Es gilt

$$|Q| = 1 \text{ oder } |Q| = -1. \tag{21}$$

Spezielle Matrizen

Beweis

(1) Unter der Annahme, dass Q^{-1} existiert, gilt

$$Q^{\mathrm{T}}Q = I_n \Leftrightarrow Q^{\mathrm{T}}QQ^{-1} = I_nQ^{-1} \Leftrightarrow Q^{-1} = Q^{\mathrm{T}}. \tag{22}$$

(2) Mit Eigenschaft (1) gilt

$$QQ^{\mathrm{T}} = QQ^{-1} = I_n. \tag{23}$$

(3) Mit dem Multiplikationssatz und der Transpositionseigenschaft von Determinanten gilt

$$|Q|^2 = |Q||Q| = |Q||Q^{\mathrm{T}}| = |QQ^{\mathrm{T}}| = |I_n| = 1. \tag{24}$$

Aus $|Q|^2 = 1$ folgt dann aber, dass $|Q| = 1$ oder $|Q| = -1$ sein muss. $\square$

Spezielle Matrizen

Eigenvektoren und Eigenwerte

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Eigenvektoren und Eigenwerte

Definition (Eigenvektor und Eigenwert)

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sei eine quadratische Matrix. Dann heißt jeder Vektor $v \in \mathbb{R}^n, v \neq 0_n$, für den mit einem passenden $\lambda \in \mathbb{R}$ gilt, dass

$$Av = \lambda v \, , \tag{25}$$

ein *Eigenvektor* von A. λ heißt zugehöriger *Eigenwert* von A.

Bemerkungen

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

Theorem (Multiplikativität von Eigenvektoren)

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

Beweis

Es gilt

$$Av = \lambda v \Leftrightarrow cAv = c\lambda v \Leftrightarrow A(cv) = \lambda(cv) \tag{26}$$

Also ist cv ein Eigenvektor von A mit Eigenwert λ. $\square$

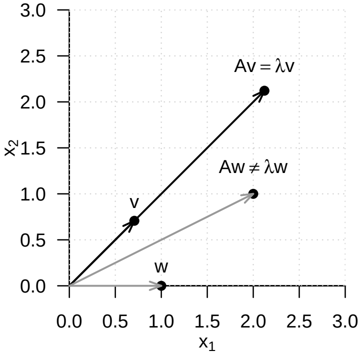
Konvention

Wir betrachten im Folgenden nur Eigenvektoren mit der Länge bzw. Norm 1, d.h. $||v|| = 1$.

Eigenvektoren und Eigenwerte

Visualisierung eines Eigenvektors

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



Theorem (Bestimmung von Eigenwerten und Eigenvektoren)

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

$$\chi_A(\lambda) := |A - \lambda I_n| \tag{27}$$

von A. Weiterhin seien $\lambda_i^*, i = 1, 2, ...$ 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

$$(A - \lambda_i^* I_n)v_i = 0_n \text{ für } i = 1, 2, ... \tag{28}$$

bestimmt werden.

Bemerkungen

- Für kleine Matrizen mit $n \leq 3$ können Eigenwerte und Eigenvektoren manuell bestimmt werden.
- Bei großen Matrizen werden Eigenwerte und Eigenvektor im Allgemeinen numerisch bestimmt.
- Beispiele sind R's `eigen()`, SciPy's `linalg.eig()` und MATLAB's `eig()`.

© 2024 Dirk Ostwald & Joram Soch, CC BY 4.0

Eigenvektoren und Eigenwerte

Beweis

(1) Bestimmen von Eigenwerten

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

$$Av = \lambda v \Leftrightarrow Av - \lambda v = 0_n \Leftrightarrow (A - \lambda I_n)v = 0_n. \tag{29}$$

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

$$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, x \mapsto (A - \lambda I_n)x \tag{30}$$

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

$$\chi_A(\lambda) = |A - \lambda I_n| = 0 \tag{31}$$

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

$$(A - \lambda_i^* I_n)v_i^* = 0_n \tag{32}$$

nach v_i^* einen Eigenvektor zum Eigenwert λ^* ergibt. $\square$

Beispiel

Es sei

$$A := \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \tag{33}$$

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 sich als

$$\chi_A(\lambda) = \left| \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \right| = \left| \begin{pmatrix} 2-\lambda & 1 \\ 1 & 2-\lambda \end{pmatrix} \right| = (2-\lambda)^2 - 1. \tag{34}$$

Nullsetzen und Auflösen nach λ ergibt mit der p-q-Formel

$$(2-\lambda)^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 3, \lambda_2 = 1. \tag{35}$$

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

$$(A - \lambda_i I_2)v_i = 0_2 \text{ für } i = 1, 2. \tag{36}$$

Für $\lambda_1 = 3$ ergibt sich

$$(A - 3I_2)v_1 = 0_2 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{1_1} \\ v_{1_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ ist eine Lösung.} \tag{37}$$

Für $\lambda_2 = 1$ ergibt sich

$$(A - 1I_2)v_2 = 0_2 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{2_1} \\ v_{2_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ ist eine Lösung.} \tag{38}$$

Weiterhin gilt $v_1^{\mathrm{T}} v_2 = 0$ sowie $||v_1|| = ||v_2|| = 1$.

Theorem (Eigenwerte positiv-semidefiniter und positiv-definiter Matrizen)

(1) $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sei eine positiv-semidefinite Matrix. Dann sind alle Eigenwerte von C nicht-negativ.

(2) $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sei eine positiv-definite Matrix. Dann sind alle Eigenwerte von C positiv.

Bemerkungen

- Die Eigenwertnichtnegativität wird manchmal auch zur Definition der Positiv-Semidefinitheit genutzt.
- Die Eigenwertpositivität wird manchmal auch zur Definition der Positiv-Definitheit genutzt.

Beweis

(1) Mit der Definition von Eigenvektor und Eigenwert einer quadratischen Matrix gilt für jeden Eigenwert λ und zugehörigen Eigenvektor $x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0_n$

$$Cx = \lambda x \Leftrightarrow x^{\mathrm{T}} C x = x^{\mathrm{T}} (\lambda x) = \lambda x^{\mathrm{T}} x. \tag{39}$$

Mit der positiven Semidefinitheit von C und $x^{\mathrm{T}} x \geq 0$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$ mit $x \neq 0_n$ gilt dann aber

$$x^{\mathrm{T}} C x \geq 0 \Leftrightarrow \lambda x^{\mathrm{T}} x \geq 0 \Rightarrow \lambda \geq 0. \tag{40}$$

Also ist jeder Eigenwert von C nicht-negativ.

(2) Der Beweis erfolgt analog zu (1) unter Ersetzung von $\geq$ durch $>$. $\square$

Spezielle Matrizen

Eigenvektoren und Eigenwerte

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Theorem (Eigenwerte und Eigenvektoren symmetrischer Matrizen)

$S \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 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 $n \times n$ Matrix n 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 $1 \leq i, j \leq n$ 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

$$\lambda_i q_i^{\mathrm{T}} q_j = \lambda_j q_i^{\mathrm{T}} q_j. \tag{41}$$

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

$$ac = bc. \tag{42}$$

Um

$$\lambda_i q_i^{\mathrm{T}} q_j = \lambda_j q_i^{\mathrm{T}} q_j \tag{43}$$

zu zeigen, halten wir zunächst fest, dass

$$Sq_i = \lambda_i q_i \Leftrightarrow (Sq_i)^{\mathrm{T}} = (\lambda_i q_i)^{\mathrm{T}} \Leftrightarrow q_i^{\mathrm{T}} S^{\mathrm{T}} = q_i^{\mathrm{T}} \lambda_i^{\mathrm{T}} \Leftrightarrow q_i^{\mathrm{T}} S = q_i^{\mathrm{T}} \lambda_i \Leftrightarrow q_i^{\mathrm{T}} S q_j = \lambda_i q_i^{\mathrm{T}} q_j \tag{44}$$

und

$$Sq_j = \lambda_j q_j \Leftrightarrow q_i^{\mathrm{T}} S q_j = \lambda_j q_i^{\mathrm{T}} q_j \tag{45}$$

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

© 2024 Dirk Ostwald & Joram Soch, CC BY 4.0

Theorem (Orthonormale Zerlegung einer symmetrischen Matrix)

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

$$S = Q\Lambda Q^{\mathrm{T}}, \tag{46}$$

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

Bemerkungen

- $S = Q\Lambda Q^{\mathrm{T}}$ heißt auch *Diagonalisierung* von S.
- Man wählt man als Diagonalelemente von Λ die der Größe nach geordneten Eigenwerte von S.
- Man wählt man als Spalten von Q die zugehörigen orthonormalen Eigenvektoren von S.

© 2024 Dirk Ostwald & Joram Soch, CC BY 4.0

Orthonormalzerlegung

Beweis

Es seien $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_n$ die der Größe nach geordneten Eigenwerte von S und $q_1, q_2, ..., q_n$ seien die jeweils zugehörigen orthonormalen Eigenvektoren. Mit

$$Q := \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ und } \Lambda := \operatorname{diag}\left(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n\right) \in \mathbb{R}^{n \times n}, \tag{47}$$

folgt dann mit den Definitionen von Eigenwerten und Eigenvektoren zunächst, dass

$$Sq_i = \lambda_i q_i \text{ für } i = 1, ..., n \Leftrightarrow SQ = Q\Lambda. \tag{48}$$

Rechtseitige Multiplikation mit Q^{T} ergibt dann mit $QQ^{\mathrm{T}} = I_n$, dass

$$SQQ^{\mathrm{T}} = Q\Lambda Q^{\mathrm{T}} \Leftrightarrow SI_n = Q\Lambda Q^{\mathrm{T}} \Leftrightarrow S = Q\Lambda Q^{\mathrm{T}}. \tag{49}$$

□

Orthonormalzerlegung

Beispiel (fortgeführt)

Für die symmetrische Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \tag{50}$$

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

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{51}$$

seien

$$Q := \begin{pmatrix} v_1 & v_2 \end{pmatrix} \text{ und } \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2). \tag{52}$$

Dann ergibt sich

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

Theorem (Determinante und Spur einer symmetrischen Matrix)

$S \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sei eine symmetrische Matrix mit verschiedenden Eigenwerten $\lambda_1, ..., \lambda_n$. Dann gelten

$$|S| = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i \quad \text{und} \quad \text{tr}(S) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \,. \tag{53}$$

Bemerkungen

- Die Determinante einer symmetrischen Matrix ist das Produkt ihrer Eigenwerte.
- Die Spur einer symmetrischen Matrix ist die Summe ihrer Eigenwerte.

Orthonormalzerlegung

<u>Beweis</u>

Mit dem Theorem zur Zerlegung einer symmetrischen Matrix mit verschiedenen Eigenwerten gilt, dass

$$|S| = |Q\Lambda Q^{\mathrm{T}}|, \tag{54}$$

wobei $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine orthogonale Matrix und $\Lambda \in \mathbb{R}^{n\times n}$ die Diagonalmatrix der n verschiedenen Eigenwerte von S ist. Mit dem Determinantenmultiplikationssatz, der Determinante von orthogonalen Matrizen und der Tatsache, dass die Determinante einer Diagonalmatrix dem Produkt ihrer Diagonalelemente entspricht, gilt dann weiterhin

$$|S| = |Q\Lambda Q^{\mathrm{T}}| = |Q||\Lambda||Q^{\mathrm{T}}| = |\Lambda| = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i. \tag{55}$$

Wiederrum mit dem Theorem zur Zerlegung einer symmetrischen Matrix mit verschiedenen Eigenwerten gilt, dass

$$\mathrm{tr}(S) = \mathrm{tr}\left(Q\Lambda Q^{\mathrm{T}}\right). \tag{56}$$

Mit der zyklischen Permutationsinvarianz der Spur, dem Inversen orthogonaler Matrizen und der Definition der Spur gilt dann weiterhin

$$\mathrm{tr}(S) = \mathrm{tr}\left(Q\Lambda Q^{\mathrm{T}}\right) = \mathrm{tr}\left(Q^{\mathrm{T}}Q\Lambda\right) = \mathrm{tr}(\Lambda) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i. \tag{57}$$

$\square$

Spezielle Matrizen

Eigenvektoren und Eigenwerte

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Definition (Singulärwertzerlegung)

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

$$Y = USV^{\mathrm{T}}, \tag{58}$$

wobei $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $V \in \mathbb{R}^{m \times m}$ orthogonale Matrizen und $S \in \mathbb{R}^{n \times m}$ eine Diagonalmatrix ist, *Singulärwertzerlegung (singular value decomposition, SVD)* von Y. Die Diagonalelemente von S heißen die *Singulärwerte (singular values)* von Y.

Bemerkungen

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

Theorem (Singulärwertzerlegung und Eigenanalyse)

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

$$Y = USV^{\mathrm{T}} \tag{59}$$

sei ihre Singulärwertzerlegung. Dann gilt:

- Die Spalten von U sind die Eigenvektoren von YY^{T},
- die Spalten von V sind die Eigenvektoren von $Y^{\mathrm{T}}Y$ und
- die entsprechenden Singulärwerte sind die Quadratwurzeln der zugehörigen Eigenwerte.

Bemerkung

- Singulärwertzerlegung und Eigenanalyse sind eng verwandt.

Singulärwertzerlegung

Beweis

Wir halten zunächst fest, dass YY^{T} und $Y^{\mathrm{T}}Y$ symmetrische Matrizen sind,

$$\left(YY^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} = YY^{\mathrm{T}} \text{ und } \left(Y^{\mathrm{T}}Y\right)^{\mathrm{T}} = Y^{\mathrm{T}}Y\,, \tag{60}$$

und somit Orthornomalzerlegungen haben.

Wir halten weiterhin fest, dass mit $U^{\mathrm{T}}U = I_n$ und $V^{\mathrm{T}}V = I_m$ gilt, dass

$$YY^{\mathrm{T}} = USV^{\mathrm{T}}\left(USV^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} = USV^{\mathrm{T}}VS^{\mathrm{T}}U^{\mathrm{T}} = USS^{\mathrm{T}}U^{\mathrm{T}} = U\Lambda_U U^{\mathrm{T}}, \tag{61}$$

wobei wir $\Lambda_U := SS^{\mathrm{T}}$ definiert haben, und

$$Y^{\mathrm{T}}Y = \left(USV^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}USV^{\mathrm{T}} = VS^{\mathrm{T}}U^{\mathrm{T}}USV^{\mathrm{T}} = V\Lambda_V V^{\mathrm{T}}, \tag{62}$$

wobei wir $\Lambda_V := S^{\mathrm{T}}S$ definiert haben.

Weil das Produkt von Diagonalmatrizen wieder eine Diagonalmatrix ist, sind Λ_U und Λ_V Diagonalmatrizen, und U und V sind per Definition orthogonale Matrizen. Wir haben also YY^{T} und $Y^{\mathrm{T}}Y$ in Form der Orthonormalzerlegungen

$$YY^{\mathrm{T}} = U\Lambda_U U^{\mathrm{T}} \text{ und } Y^{\mathrm{T}}Y = V\Lambda_V V^{\mathrm{T}} \tag{63}$$

geschrieben, wobei für die Diagonalelemente von Λ_U und Λ_V gilt, dass sie die quadrierten Werte der Diagonalemente von S sind. Damit folgen die Aussagen des Theorems direkt. $\square$

Spezielle Matrizen

Eigenvektoren und Eigenwerte

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Selbstkontrollfragen

1. Geben Sie die Definition von Eigenvektor und Eigenwert 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.

Referenzen

Searle, Shayle. 1982. *Matrix Algebra Useful for Statistics*. Wiley-Interscience.

Strang, Gilbert. 2009. *Introduction to Linear Algebra*. Cambridge University Press.