Multivariate Verfahren

MSc Psychologie | MSc Klinische Psychologie und Psychotherapie

WiSe 2023/24

Prof. Dr. Dirk Ostwald

(2) Eigenanalyse

Eigenvektoren und Eigenwerte

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Eigenvektoren und Eigenwerte

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Definition (Eigenvektor, Eigenwert)

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

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

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

Bemerkungen

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

Theorem (Multiplikativität von Eigenvektoren)

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

Beweis

Es gilt

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

Also ist cv ein Eigenvektor von A mit Eigenwert λ.

$\square$

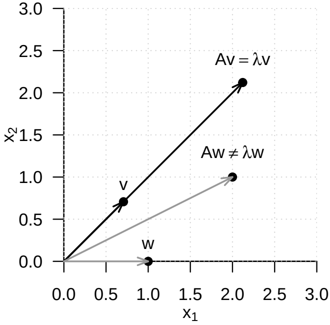
Konvention

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

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)

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

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

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

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

bestimmt werden.

Bemerkungen

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

Beweis

(1) Bestimmen von Eigenwerten

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

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

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

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

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

$$\chi_A(\lambda) = |A - \lambda I_m| = 0 \tag{7}$$

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

(2) Bestimmen von Eigenvektoren

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

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

nach v_i^* einen Eigenvektor zum Eigenwert λ^* ergibt.

□

Eigenvektoren und Eigenwerte

Beispiel

Es sei

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

Wir wollen die Eigenwerte und Eigenvektoren von A bestimmen.

(1) Berechnen von Eigenwerten

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

Das charakteristische Polynom von A ergibt als

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

Nullsetzen und Auflösen nach λ ergibt mit der pq-Formel

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

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

Beispiel (fortgeführt)

(2) Berechnen von Eigenvektoren

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

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

Für $\lambda_1 = 3$ ergibt sich

$$(A - 3I_2)v_1 = 0_2 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{1_1} \\ v_{1_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ ist eine Lösung.} \tag{13}$$

Fpr $\lambda_2 = 1$ ergibt sich

$$(A - 1I_2)v_2 = 0_2 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{2_1} \\ v_{2_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ ist eine Lösung.} \tag{14}$$

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

Theorem (Eigenwerte positiv semidefiniter und positiv definiter Matrizen)

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

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

Beweis

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

$$Cx = \lambda x \Leftrightarrow x^T C x = x^T(\lambda x) = \lambda x^T x. \tag{15}$$

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

$$x^T C x \geq 0 \Leftrightarrow \lambda x^T x \geq 0 \Rightarrow \lambda \geq 0. \tag{16}$$

Also ist jeder Eigenwert von C nichtnegativ.

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

$\square$

Bemerkungen

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

Eigenvektoren und Eigenwerte

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Theorem (Eigenwerte und Eigenvektoren symmetrischer Matrizen)

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

(1) Die Eigenwerte von S sind reell.

(2) Die Eigenvektoren zu je zwei verschiedenen Eigenwerten von S sind orthogonal.

Bemerkung

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

Beweis

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

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

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

$$ac = bc. \tag{18}$$

Um

$$\lambda_i q_i^T q_j = \lambda_j q_i^T q_j. \tag{19}$$

zu zeigen, halten wir zunächst fest, dass

$$Sq_i = \lambda_i q_i \Leftrightarrow (Sq_i)^T = (\lambda_i q_i)^T \Leftrightarrow q_i^T S^T = q_i^T \lambda_i^T \Leftrightarrow q_i^T S = q_i^T \lambda_i \Leftrightarrow q_i^T S q_j = \lambda_i q_i^T q_j \tag{20}$$

und

$$Sq_j = \lambda_j q_j \Leftrightarrow q_i^T S q_j = \lambda_j q_i^T q_j \tag{21}$$

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

$\square$

Orthonormalzerlegung

Theorem (Orthonormale Zerlegung einer symmetrischen Matrix)

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

$$S = Q\Lambda Q^T, \tag{22}$$

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

<u>Beweis</u>

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

$$Q := \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times m} \text{ und } \Lambda := \text{diag}\left(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m\right) \in \mathbb{R}^{m \times m}, \tag{23}$$

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

$$Sq_i = \lambda_i q_i \text{ für } i = 1, \dots, m \Leftrightarrow SQ = Q\Lambda. \tag{24}$$

Rechtseitige Multiplikation mit Q^T ergibt dann mit $QQ^T = I_m$, dass

$$SQQ^T = Q\Lambda Q^T \Leftrightarrow SI_m = Q\Lambda Q^T \Leftrightarrow S = Q\Lambda Q^T. \tag{25}$$

$\square$

Bemerkungen

- $S = Q\Lambda Q^T$ 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.

Orthonormalzerlegung

Beispiel (fortgeführt)

Für die symmetrische Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \tag{26}$$

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

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{27}$$

seien

$$Q := \begin{pmatrix} v_1 & v_2 \end{pmatrix} \text{ und } \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2). \tag{28}$$

Dann ergibt sich

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

Theorem (Spur und Determinante einer symmetrischen Matrix)

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

$$|S| = \prod_{i=1}^{m} \lambda_i \text{ und } \operatorname{tr}(S) = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \tag{29}$$

Beweis

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

$$|S| = |Q\Lambda Q^T| \tag{30}$$

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

$$|S| = |Q\Lambda Q^T| = |Q||\Lambda||Q^T| = |\Lambda| = \prod_{i=1}^{m} \lambda_i. \tag{31}$$

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

$$\operatorname{tr}(S) = \operatorname{tr}\left(Q\Lambda Q^T\right). \tag{32}$$

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

$$\operatorname{tr}(S) = \operatorname{tr}\left(Q\Lambda Q^T\right) = \operatorname{tr}\left(Q^T Q \Lambda\right) = \operatorname{tr}(\Lambda) = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i. \tag{33}$$

$\square$

Eigenvektoren und Eigenwerte

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Singulärwertzerlegung

Definition (Singulärwertzerlegung)

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

$$Y = USV^T, \tag{34}$$

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

Bemerkungen

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

Theorem (Singulärwertzerlegung und Eigenanalyse)

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

$$Y = USV^T \tag{35}$$

sei ihre Singulärwertzerlegung. Dann gilt:

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

Bemerkung

- Singulärwertzerlegung und Eigenanalyse sind eng verwandt.

Beweis

Wir halten zunächst fest, dass mit

$$\left(YY^T\right)^T = YY^T \text{ und } \left(Y^TY\right)^T = Y^TY \tag{36}$$

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

$$YY^T = USV^T\left(USV^T\right)^T = USV^TVS^TU^T = USS^TU^T =: U\Lambda_U U^T, \tag{37}$$

wobei wir $\Lambda_U := SS^T$ definiert haben und

$$Y^TY = \left(USV^T\right)^T USV^T = VS^TU^TUSV^T =: V\Lambda_V V^T, \tag{38}$$

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

$$YY^T = U\Lambda_U U^T \text{ und } Y^TY = V\Lambda_V V^T \tag{39}$$

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. $\square$

Eigenvektoren und Eigenwerte

Orthonormalzerlegung

Singulärwertzerlegung

Selbstkontrollfragen

Selbstkontrollfragen

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

Referenzen

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