. 20. 02. 2020

Die Bestimmung latenter Variablen: Hauptachsentransformation (PCA)

U. Mortensen

Inhaltsverzeichnis

1 Ziel und Ansatz

Das Ziel der Analyse ist, Messungen von n korrelierenden Variablen bei m Fällen (Personen oder Objekten) durch maximal $\min(m, n)$ latente, d.h. nicht direkt gemessene Variablen zu interpretieren. Die Messungen werden in einer (m, n)-Datenmatrix X zusammengefasst; die Spalten repräsentieren die Variablen, die Zeilen die Fälle (Personen oder Objekte, an denen die jeweils n Messungen vorgenommen wurden). Die Elemente x_{ij} von X werden als spaltenzentriert vorausgesetzt, d.h. von den Messwerten für die j-te Variable wurde der Mittelwert $\bar{x}_j$ dieser Messwerte subtrahiert. Werden die Messwerte auch noch standardisiert, so gehen sie über in $z_{ij} = x_{ij}/s_j$, s_j die Standardabweichung der Messwerte für die j-te Variable, und X geht über in $Z = (z_{ij})$. Obwohl bei vielen Untersuchungen die Punktekonfiguration der Variablen in einem latenten Raum von Interesse ist, wird zunächst die Darstellung der Konfiguration der Fälle in einem $\mathbb{R}^n$ betrachtet; die Repräsentation der Variablen ebenfalls im $\mathbb{R}^n$ ergibt sich dann daraus.

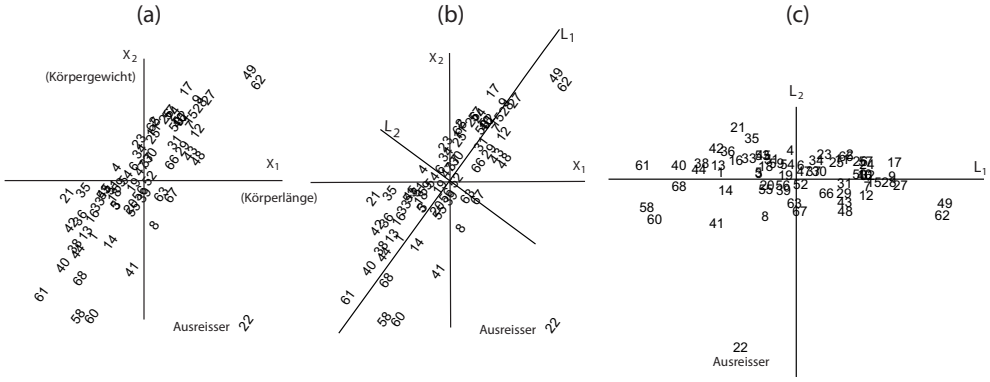
Die Variablen definieren ein n-dimensionales Koordinatensystem $X_1, \ldots, X_n$ im $\mathbb{R}^n$; die Koordinatenachsen verlaufen wegen der Spaltenzentriertheit von X durch den Schwerpunkt der Konfiguration der Fälle (vergl. Abbildung 1 (a)). Der i-te Fall wird durch einen n-dimensionalen Vektor $\tilde{\mathbf{x}}_i = (x_{i1}, \ldots, x_{in})'$ repräsentiert, dessen Anfangspunkt im Schwerpunkt (Nullpunkt) des Koordinatensystems liegt. Die $\tilde{\mathbf{x}}_i$ bilden die Konfiguration der Fälle (auch Punktekonfiguration genannt, wobei die Punkte die Endpunkte der $\tilde{\mathbf{x}}_i$ sind).

Die grundlegenden Annahmen der PCA sind, dass
(i) die latenten Variablen durch Geraden L_k, $k = 1, \ldots, n$, im $\mathbb{R}^n$ der Variablen repräsentiert werden, die ebenso wie die ursprünglichen Koordinatenachsen durch den Schwer- oder Mittelpunkt der Punktekonfiguration verlaufen, dass
(ii) die Koordinaten der Fälle auf der latenten Achse L_k durch die orthogonalen Projektionen der $\tilde{\mathbf{z}}_i$ auf die Gerade L_k gegeben sind, und schließlich dass
(iii) die latenten Variablen unkorreliert sind, so dass die Geraden die Konfiguration wie in Abbildung 1 (b) und (c) durchlaufen: während die Konfiguration der Fälle in (a) wegen der Korrelation der ursprünglichen Variablen orientiert ist – eine Regressionsgerade hätte eine von Null verschiedene Steigung –, hätte sie in (c) eine Steigung von Null.

Die Annahmen implizieren, dass die so spezifizierten latenten Achsen (Dimmensionen) eine Rotation der Punktekonfiguration bedeuten, bei der die Relationen zwischen den Punkten invariant bleiben; insbesondere entspricht die Orientierung von L_1 der Orientierung der größten Ausdehung der Konfiguration, wie von der Abbildung 1 nahegelegt und weiter unten noch bewiesen werden wird.

Die Aufgabe ist nun, die Koordinaten der Punkte auf den latenten Achsen explizit zu bestimmen. Die Koordinaten der Fälle auf der k-ten latenten Achse L_k werden als Komponenten eines m-dimensionalen Vektors $\mathbf{L}_k$ aufgefasst, Die $\mathbf{L}_k$ werden wiederum zu einer (m, n)-dimensionalen Matrix $L = [\mathbf{L}_1, \ldots, \mathbf{L}_n]$ zusam-

Abbildung 1: Konfiguration von Fällen im ursprünglichen Koordinatensystem: Gewicht versus Körpergröße (a). In (b) sind mögliche latente Variable eingezeichnet worden: L_1 hat die Orientierung der maximalen Ausdehnung der Konfiguration, L_2 ist orthogonal zu L_1 und repräsentiert die Orientierung mit im allgemeinen zweitgrößter Ausdehnung der Konfiguration. (c) zeigt die Konfiguration im Koordinatensystem (L_1, L_2); die Koordinaten in diesem System sind die Projektionen der Punkte im ursprünglichen System auf die Achsen L_1 und L_2. Die Punkte werden durch Zahlen repräsentiert, um die Identifikation der Punkte im rotierten System zu erleichtern. Der Ausreisser 22 wurde bei der Bestimmung von L_1 und L_2 *nicht* berücksichtigt, weil er wegen seiner *Hebelwirkung* (leverage) die optimale Bestimmung dieser Achsen verhindert hätte.



mengefasst. Die i-te Zeile von Z enthält die Koordinaten $z_{i1}, \ldots, z_{in}$ des i-ten Falls auf den Koordinatenachsen, die die gemessenen Variablen repräsentieren; diese Koordinaten sind die Komponenten von $\tilde{\mathbf{z}}_i$, dem i-ten Spaltenvektor von Z'. Korrepondierend dazu enthält die i-te Zeile von L die Koordinaten des i-ten Falls auf den latenten Achsen $L_1, L_2, \ldots, L_n$, sie sind die Komponenten des i-ten Spaltenvektors $\tilde{\mathbf{L}}_i$ von L'. Man kann nun sagen, dass $\tilde{\mathbf{L}}_i$ eine Transformation von $\tilde{\mathbf{z}}_i$ ist, und umgekehrt, dass $\tilde{\mathbf{z}}_i$ eine Transformation von $\tilde{\mathbf{L}}_i$ ist. Dieser Sachverhalt bedeutet, dass eine Transformationsmatrix $T = [\mathbf{t}_1, \ldots, \mathbf{t}_n]$ existiert derart, dass[1]

$$\tilde{\mathbf{z}}_i = T\tilde{\mathbf{L}}_i, \quad i = 1, \ldots, m \tag{1.1}$$

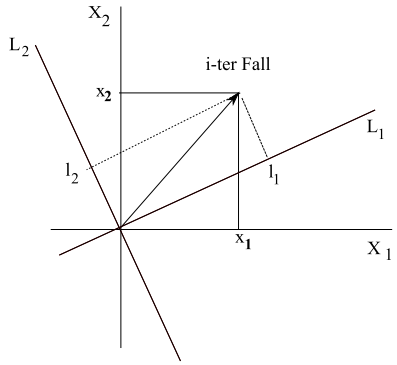
gilt[2]. T gilt für alle i gleichermaßen, so dass (1.1) in die Gleichung

$$Z' = TL' \tag{1.2}$$

[1]Man könnte T ebensogut für die Beziehung $\tilde{\mathbf{L}}_i = T\tilde{\mathbf{z}}_i$ definieren. Aber der Ansatz (1.1) hat Vorteile bei der späteren Interpretation von T.

[2]Es sei daran erinnert, dass der Ausdruck $\mathbf{x} = T\mathbf{y}$ für irgendzwei Vektoren $\mathbf{x}$ und $\mathbf{y}$ stets die Linearkombination $\mathbf{x} = y_1\mathbf{t}_1 + y_2\mathbf{t}_2 + \cdots + y_n\mathbf{t}_n$ meint, wobei die $\mathbf{t}_k$ die Spaltenvektoren von T und die y_k die Komponenten von $\mathbf{y}$ sind.

Abbildung 2: Vektor des i-ten Fall im (X_1, X_2)- und im (L_1, L_2)-System



übergeht; transponiert ergibt sich

$$Z = LT'. \tag{1.3}$$

Nach dieser Gleichung sind die Spaltenvektoren $\mathbf{z}_j$ von Z Linearkombinationen der Spaltenvektoren $\mathbf{L}_k$ von L. Nach Annahme (ii) soll T die orthogonale Projektion von $\tilde{\mathbf{z}}_i$ auf die Achsen L_k bewirken; dies bedeutet, dass T die Länge der $\tilde{\mathbf{L}}_i$ unverändert ("invariant") läßt, vergl. Abbildung 2. Demnach soll die Aussage

$$\|\tilde{\mathbf{z}}_i\|^2 = \|\tilde{\mathbf{L}}_i\|^2 = \tilde{\mathbf{z}}_i' T T' \tilde{\mathbf{z}}_i. \tag{1.4}$$

gelten. Diese Gleichung ist sicherlich erfüllt, wenn $TT' = I$ gilt, wobei I die (n, n)-Einheitsmatrix ist, und es kann gezeigt werden, dass die Bedingung $TT' = I$ auch notwendig ist[3]. Dies wiederum heißt, dass T eine orthonormale Matrix sein muß, für die auch $T'T = I$ gilt. Die Transformation T bzw. T' ist einfach eine Rotation[4]. Aus (1.3) folgt dann sofort (Multiplikation von rechts mit T), dass

$$ZT = L, \quad \text{d.h. } Z\mathbf{t}_k = \mathbf{L}_k, \quad k = 1, \ldots, n \tag{1.5}$$

gelten muß: die $\mathbf{L}_k$ sind demnach Linearkombinationen der Spaltenvektoren $\mathbf{z}_j$ von Z. Man hat also zwei Aussagen, auf denen die weitere Analyse beruht:
(A1) Die Matrix T ist orthonormal, und
(A2) die Unkorreliertheit der L_k impliziert die Orthogonalität der Vektoren $\mathbf{L}_k$:

$$\mathbf{L}_k' \mathbf{L}_{k'} = \begin{cases} \|\mathbf{L}_k\|^2, & k = k' \\ 0, & k \neq k' \end{cases}, \quad k = 1, \ldots, n \tag{1.6}$$

[3] http://www.uwe-mortensen.de/VektorenMatrizen2020.pdf, Abschnitt 2.6.1

[4] Eine allgemeine lineare Transformation führt einen Vektor $\mathbf{x}$ in einen Vektor $\mathbf{y}$ über, der sich hinsichtlich seiner Orientierung *und* seiner Länge, u.U. auch hinsichtlich seiner Dimensionalität von $\mathbf{x}$ unterscheidet. Bei einer Rotation bleibt die Länge invariant.

Setzt man $\lambda_k = \|\mathbf{L}_k\|^2$, so gilt

$$L'L = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n) \tag{1.7}$$

Eigenvektoren und Eigenwerte: Die Aussagen (A1) und (A2) erlauben eine Charakterisierung der Matrix T, die eine explizite Bestimmung von T und damit L ermöglicht: Aus (1.5) folgt $T'Z' = L'$, so dass

$$T'Z'ZT = L'L = \Lambda, \tag{1.8}$$

folgt, wobei Λ in (1.7) eingeführt wurde. Die Orthonormalität von T impliziert nun (Multiplikation von links mit T)

$$TT'Z'ZT = Z'ZT = T\Lambda, \quad \text{d.h. } Z'Z\mathbf{t}_k = \lambda_k\mathbf{t}_k,\ k = 1, \ldots, n \tag{1.9}$$

d.h. T ist die Matrix der Eigenvektoren $\mathbf{t}_k$ von $Z'Z$, und die λ_k erweisen sich als die zugehörigen Eigenwerte von $Z'Z$. T kann durch ein iteratives Verfahren berechnet werden, worauf hier nicht eingegangen werden muß (vergl . Golub & van Loan (2013)), so dass auch L berechnet werden kann.

Folgerungen:
1. Nach (1.5) gilt $Z\mathbf{t}_k = \mathbf{L}_k$ und die Zentriertheit der Spaltenvektoren $\mathbf{z}_j$ vererbt sich auf die $\mathbf{L}_k$, d.h. die Summme der Komponenten von $\mathbf{L}_k$ ist gleich Null[5]. Dann ist $\|\mathbf{L}_k\|^2$ proportional zur Varianz der Komponenten von $\mathbf{L}_k$, also der Koordinaten der Fälle auf der k-ten latenten Variablen; der Proportionalitätsfaktor ist $1/m$. Nach (1.8) gilt $\mathbf{t}_k'Z'Z\mathbf{t}_k = \lambda_k$ (s. a. (1.6) von A2), d.h. die Eigenwerte λ_k sind proportional zu den Varianzen der Koordinaten der Fälle auf L_k.

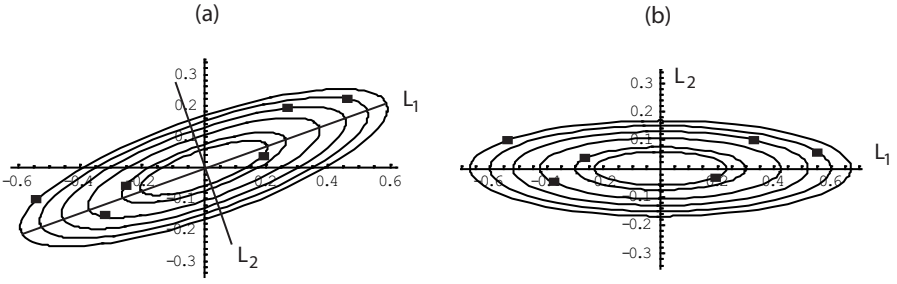
2. Nach (1.8) gilt $\mathbf{t}_k'Z'Z\mathbf{t}_k = \lambda_k$; diese Gleichung ist ein Spezialfall der allgemeinen *quadratischen Form* $\mathbf{x}'Z'Z\mathbf{x} = Q(\lambda) \in \mathbb{R}$, und für $\|\mathbf{x}\| = 1$ ist $Q(\mathbf{x})$ der Rayleigh-Quotient, der nach dem Satz von Courant-Fischer[6] maximal wird, wenn $\mathbf{x} = \mathbf{t}_1$ der zum maximalen Eigenwert korrespondierende Eigenvektor von $Z'Z$ ist; dann ist $Q(\mathbf{t}_1) = \lambda_1$. Für k_0 eine Konstante ist $\mathcal{E}_x = \{\mathbf{x}|\mathbf{x}'Z'Z\mathbf{x} = k_0\}$ ein Ellipsoid[7], und dem Satz von Courant-Fischer entsprechend ist die Orientierung der maximalen Ausdehnung des Ellipoids durch die Orientierung des ersten Eigenvektors gegeben, der also die Orientierung der ersten Hauptachse des Ellipsoids bestimmt. Wegen $\lambda_1 = \|\mathbf{L}_1\|^2$ folgt, dass die Varianz der Koordinaten auf L_1 maximal ist.

[5] Es sei $\vec{1} = (1, \ldots, 1)'$ ein m-dimensionaler Vektor, dessen Komponenten alle gleich 1 sind. Die Summme der Komponenten von $\mathbf{z}_j$ ist gleich dem Skalarprodukt $\mathbf{z}_j'\vec{1} = 0$. Dann ist $\mathbf{L}_k'\vec{1} = t_{1k}\mathbf{z}_1'\vec{1} + \cdots + t_{nk}\mathbf{z}_n'\vec{1} = 0$.

[6] http://www.uwe-mortensen.de/VektorenMatrizen2020.pdf, Abschnitt 2.6.5. Aauf Seite 148 findet man den klassischen Ansatz, das Maximum über die Differentiation quadratischer Formen zu bestimmen.

[7] http://www.uwe-mortensen.de/VektorenMatrizen2020.pdf, p. 68

Abbildung 3: Punktekonfiguration und Ellipsen.



3. Die Beziehung $Z = LT'$ impliziert $Z' = TL'$ und damit

$$Z'Z = TL'LT' = T\Lambda T'. \tag{1.10}$$

Aus $ZT = L$ folgt insbesondere $\tilde{\mathbf{z}}_i'T = \tilde{\mathbf{L}}_i'$ und nach Transposition $\tilde{\mathbf{L}}_i = T'\tilde{\mathbf{z}}_i$. Multiplikation von rechts mit $\Lambda\tilde{\mathbf{L}}_i$ liefert

$$\tilde{\mathbf{z}}_i'T\Lambda\tilde{\mathbf{L}}_i = \tilde{\mathbf{L}}_i'\Lambda\tilde{\mathbf{L}}_i$$

Aber wie gerade gezeigt ist $\tilde{\mathbf{L}}_i = T'\tilde{\mathbf{z}}_i$, so dass wegen (1.10) $\tilde{\mathbf{z}}_i'T\Lambda T'\tilde{\mathbf{z}}_i = \tilde{\mathbf{z}}_i'Z'Z\tilde{\mathbf{z}}_i$ schließlich

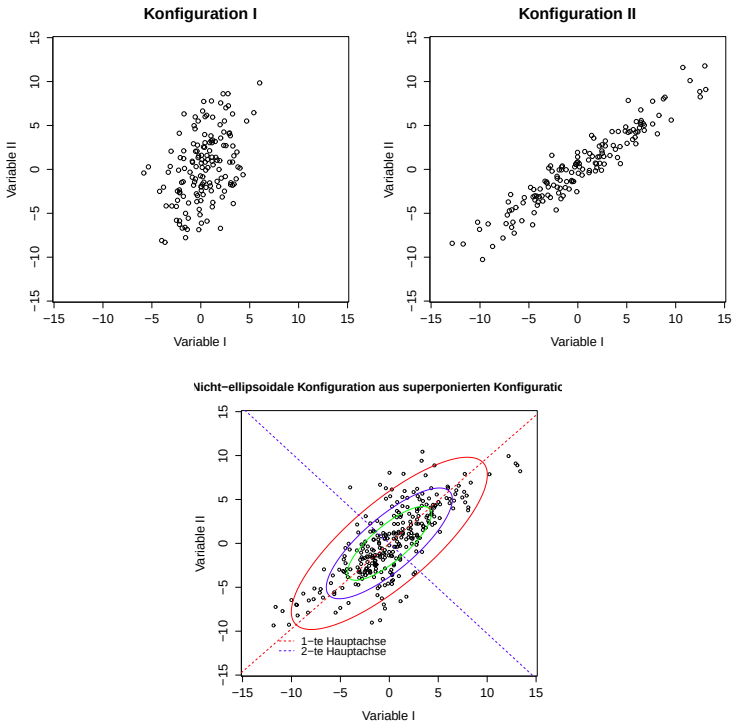
$$\tilde{\mathbf{z}}_i'Z'Z\tilde{\mathbf{z}}_i = \tilde{\mathbf{L}}_i'\Lambda\tilde{\mathbf{L}}_i = k_{0i}, \quad i = 1, \ldots, m \tag{1.11}$$

folgt. Dies bedeutet, dass einerseits jeder Fall, repräsentiert durch den Vektor $\tilde{\mathbf{z}}_i$ auf einem durch $\mathcal{E}_{iz} = \{\mathbf{z}|\mathbf{z}'Z'Z\mathbf{z} = k_{0i}\}$ definierten Ellipsoid liegt, und andererseits auf einem in den latenten Koordinaten L_k definierten, achsenparallelen Ellipsoid $\mathcal{E}_{iL} = \{\mathbf{y}'\Lambda\mathbf{y} = k_{0i}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n\}$. Die Abbildung 4 illustriert diesen Sachverhalt.

Die Ellipsen sind durch die Matrizen $Z'Z$ bzw. Λ definiert und ihre Existenz setzt *nicht* voraus, dass die Punktekonfigurationen elliptoid sind, was der Fall wäre, wären die Daten multivariat normalverteilt. Es ist durchaus möglich, dass die Stichprobe der m Fälle aus Teilstichproben aus verschiedenen Subpopulatiionen zusammengesetzt ist und die entsprechenden Teilkonfigurationen unterschiedliche Orientierungen im $(X_1, \ldots, X_n)$-Koordinatensystem haben. In den Beispielen in Abschnitt 3 wird diese Möglichkeit illustriert. Wenn die Kovarianzen und Korrelationen zwischen den Variablen berechnet werden, indem über alle Fälle in der Gesamtstichprobe gemittelt wird, so beziehen sich die Ellipsoide stets auf die Gesamtstichprobe, weil sie eben durch $X'X$, $Z'Z$ oder Λ definiert sind.

4. Zum Abschluß soll noch eine Bemerkung zur Bedeutung der Matrix T gemacht werden. Bisher ist nur die Darstellung der Konfiguration der Fälle betrachtet worden. Die Beziehung $Z = LT'$ impliziert aber die Darstellung des Spaltenvektors

Abbildung 4: Superponierte Punktekonfigurationen und Ellipsen



$\mathbf{z}_j$ von Z: dieser Vektor repäsentiert die j-te gemessene Variable. Es gilt

$$\mathbf{z}_j = L\tilde{\mathbf{t}}_j, \quad j = 1, \ldots, n \tag{1.12}$$

d.h. $\mathbf{z}_j$ ist eine Linearkombination der Spaltenvektoren $\mathbf{L}_k$ von L mit Koeffizienten t_{jk}, den Komponenten des j-ten Zeilenvektors von T (j-ter Spaltenvektor von T'). Dies bedeutet, dass die Zeilen von T , d.h. die Spaltenvektoren $\tilde{\mathbf{t}}_j$ von T' die Variablen abbilden, während die Spalten von T die latenten Variablen L_k repräsentieren. Für die tatsächliche Darstellung der Variablen werden die $\tilde{\mathbf{t}}_j$ allerdings in skalierter Form betrachtet, wie in Abschnitt 2.1 näher ausgeführt wird.

Singularwertzerlegung Die Beziehung (1.3), also $Z = LT'$, führt auf die zentrale Gleichung der PCA. Dazu werde L normalisiert[8]: da $\mathbf{L}_k'\mathbf{L}_k = \|\mathbf{L}_k\|^2 = \mu_k$ das Quadrat der Länge von $\mathbf{L}_k$ ist, und da man einen Vektor auf die Länge 1 normalisiert, indem man seine Komponenten durch die Länge des Vektors dividiert,

[8]Es sei $\mathbf{x}$ ein beliebiger Vektor; gesucht ist ein Skalar $\mu \in \mathbb{R}$ derart, dass $\|\mu\mathbf{x}\| = 1$. Es ist $\lambda\mathbf{x}'\lambda\mathbf{x} = \mu^2\mathbf{x}'\mathbf{x} = \mu^2\|\mathbf{x}\|^2$, so dass $\mu\|\mathbf{x}\| = 1$, so dass $\mu = 1/\|\mathbf{x}\|$. $\mathbf{x}$ wird also normiert, indem man seine Komponenten mit $1/\|\mathbf{x}\|$ multipliziert.

hat man für den normalisierten Vektor $\mathbf{q}_k$

$$\mathbf{q}_k = \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}}\mathbf{L}_k = \Lambda^{-1/2}\mathbf{L}_k \tag{1.13}$$

Insgesamt hat man die Matrix $Q = [\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n]$

$$Q = L\Lambda^{-1/2} \tag{1.14}$$

Dann kann L in der Form $L = Q\Lambda^{1/2}$ geschrieben werden, und in $Z = LT'$ eingesetzt ergibt sich die

Singularwertzerlegung oder SVD[9]

$$Z = Q\Lambda^{1/2}T'. \tag{1.15}$$

So, wie sich die Matrix T als Matrix der Eigenvektoren von $Z'Z$ erwiesen hat, ergibt sich Q als Matrix der Eigenvektoren von ZZ': es ist

$$ZZ' = Q\Lambda^{1/2}T'T\Lambda^{1/2}Q' = Q\Lambda Q'.$$

In Q stehen nicht alle Eigenvektoren von ZZ', sondern nur die, die zu Eigenwerten ungleich Null korrespondieren; die von Null verschiedenen Eigenwerte von $Z'Z$ und ZZ' sind identisch.

2 PCA

2.1 SVD und PCA

Die Beziehung (1.15) bietet zwei Möglichkeiten, Z zu beschreiben:

$$\begin{aligned} Z &= LT', \quad L = Q\Lambda^{1/2} && (2.1)\\ &= QA', \quad A = T\Lambda^{1/2} && (2.2) \end{aligned}$$

Geht man von der Zerlegung $Z = LT'$ aus, so fokussiert man auf die Struktur der Fälle, da die $\mathbf{L}_k$ der Forderung A3 genügen. Betrachtet man die Zerlegung $Z = QA'$, so fokussiert man auf die Struktur der Variablen, wie im Folgenden spezifiert wird.

Es seien $\mathbf{L}_k$ und $\mathbf{a}_k$ die k-ten Spaltenvektoren von L bzw. A:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_k &= (\ell_{1k}, \ell_{2k}, \ldots, \ell_{mk})' && (2.3)\\ \mathbf{a}_k &= (a_{1k}, a_{2k}, \ldots, a_{nk})', \quad k = 1, \ldots, n && (2.4) \end{aligned}$$

Die ℓ_{ik}, $i = 1, \ldots, m$ heißen *Faktorwerte* (Faktor Scores) der Fälle, und die a_{jk} heißen *Faktorladungen* der gemessenen Variablen.

[9] = Singular Value Decomposition

Faktorwerte: Es sei $\tilde{\mathbf{z}}_i$ der i-e i-te Spaltenvektor von Z', (d.h. der i-te Zeilenvektor von Z); die Komponenten von $\tilde{\mathbf{z}}_i$ sind die (spalten-)standardisierten Messwerte des i-ten Falles für die Variablen, und wegen $ZT = L$ folgt[10]

$$\ell_{ik} = \tilde{\mathbf{z}}_i' \mathbf{t}_k = \sum_{j=1}^{n} z_{ij} t_{jk} = \|\tilde{\mathbf{z}}_i\| \|\mathbf{t}_k\| \cos\theta_{ik}. \tag{2.5}$$

Der Faktorwert ℓ_{ik} repräsentiert dem i-ten Fall auf der k-ten latenten Variablen oder Dimension, etwa die Ausprägung des k-ten latenten Merkmals beim i-ten Fall. Nach (2.5) ist ℓ_{ik} das Skalarprodukt des Vektors $\tilde{\mathbf{x}}_i$ und des Vektors $\mathbf{t}_k$, also der Messwerte des i-ten Falles in den Variablen und der Repräsentation der Variablen auf der k-ten latenten Dimension. ℓ_{ik} ist maximal wenn $\tilde{\mathbf{x}}_i$ und $\mathbf{t}_k$ parallel sind; dann ist der Winkel $\theta_{ik} = 0$, die Komponenten von $\tilde{\mathbf{x}}_i$ und $\mathbf{t}_k$ unterscheiden sich nur durch einen gemeinsamen Proportionalitätsfaktor und $\tilde{\mathbf{x}}_i$ liegt auf der k-ten latenten Achse, und $\ell_{ik} = 0$ wenn $\tilde{\mathbf{x}}_i$ und $\mathbf{t}_k$ orthogonal sind, wenn also das Profil der Messwerte des i-ten Falls mit dem Profil der Repräsentationen der Variablen auf der k-ten latenten Dimension gewissermaßen nicht korreliert.

Faktorladungen: Aus (2.2) folgt $A = Z'Q$, so dass das Element a_{jk} von A durch

$$a_{jk} = \mathbf{z}_j' \mathbf{q}_k = \sum_{i=1}^{m} z_{ij} q_{ik} = \|\mathbf{z}_j\| \|\mathbf{q}_k\| \cos\varphi_{jk} \tag{2.6}$$

Die Komponenten von $\mathbf{z}_j$ sind die standardisierten Messwerte der Fälle für die j-te Variable, und die Komponenten von $\mathbf{q}_k$ sind die Repräsentationen der Fälle auf der k-ten latenten Variablen. Man kann die Ladung a_{jk} als Korrelation (bis auf den Faktor $1/m$) zwischen den Messwerten der Fälle für die j-te Variable und den Repräsentationen der Fälle auf der k-ten latenten Dimension sehen. a_{jk} ist maximal, wenn der Winkel φ_{jk} zwischen diesen beiden Vektoren gleich Null ist; dann unterscheiden sich die Komponenten den Vektoren $\mathbf{z}_j$ und $\mathbf{q}_k$ nur durch einen Proportionalitätsfaktor und der Vektor $\mathbf{z}_j$ liegt auf der k-ten latenten Achse, und $a_{jk} = 0$, wenn $\mathbf{z}_j$ und $\mathbf{q}_k$ orthogonal sind.

Messwerte: Die Messwerte z_{ij} (i-ter Fall, j-ter Test) sind Skalarprodukte von Vektoren, deren Komponenten durch Werte der latenten Vareiablen definiert sind. Es gilt

$$\begin{aligned} z_{ij} &= \mathbf{q}_i' \tilde{\mathbf{a}}_j = \|\tilde{\mathbf{q}}_i\| \|\tilde{\mathbf{a}}_j\| \cos\phi_{ij} && (2.7) \\ &= \tilde{\mathbf{L}}_i' \tilde{\mathbf{t}}_j = \|\tilde{\mathbf{L}}_i\| \|\tilde{\mathbf{t}}_j\| \cos\phi_{ij} && (2.8) \end{aligned}$$

$\tilde{\mathbf{q}}_i$ und $\tilde{\mathbf{L}}_i$ sind die i-ten Zeilenvektoren von Q bzw. L; sie repräsentieren den i-ten Fall auf den latenten Dimensionen, und $\tilde{\mathbf{t}}_j$ und $\tilde{\mathbf{a}}_j$ sind die j-ten Zeilenvektoren von T bzw. A, sie repräsentieren die j-te Variable auf den latenten Dimensionen. Die latenten Dimensionen oder Variablen beschreiben also Fälle und Variablen

[10] s. http://www.uwe-mortensen.de/VektorenMatrizen2020.pdf, p. 19

gleichermaßen. $\cos\phi_{ij}$ ist ein Ähnlichkeitsmaß für den i-ten Fall und den j-ten Test: für $\phi_{ij} = 0$ wird z_{ij} maximal relativ zu den Längen der Vektoren $\tilde{\mathbf{q}}_i$ und $\tilde{\mathbf{a}}_j$, etc. Der Vektor $\tilde{\mathbf{a}}_j$ (oder $\tilde{\mathbf{t}}_j$) definiert eine bestimmte Orientierung und damit eine bestimmte Gerade im Raum der latenten Variablen, auf dem die gemessene j-te Variable und $\tilde{\mathbf{q}}_i$ gleichermaßen liegen. Dieser Befund liegt nahe, die Vektoren $\tilde{\mathbf{q}}_i$ oder $\tilde{\mathbf{L}}_i$ einerseits und die $\tilde{\mathbf{t}}_j$ bzw. $\tilde{\mathbf{a}}_j$ andererseits simultan in einer Graphik darzustellen. Das Resultat ist ein *Biplot*, auf den weiter unten zurückgekommen wird.

Varianzen der Faktorwerte: Da $L'L = \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ folgt

$$\mathbf{L}_k'\mathbf{L}_k = \|\mathbf{L}_k\|^2 = \lambda_k, \quad k = 1, \ldots, n \tag{2.9}$$

Die Standardisierung der Datenmatrix impliziert, dass die Spaltensummen von Z und damit die von L stets gleich Null sind[11]. Deswegen kann man $\frac{1}{m}\|\mathbf{L}_k\|^2 = \frac{1}{m}\lambda_k$ als Varianz der Abbildungen der Fälle auf die k-te latente Dimension betrachten.

Ladungen und Korrelationen: Es ist $\frac{1}{m}Z'Z = R$ die Matrix der Korrelationen zwischen den Variablen. Aus $Z = QA'$ folgt dann

$$\frac{1}{m}Z'Z = R = \frac{1}{m}AQ'QA' = \frac{1}{m}AA'. \tag{2.10}$$

Das Element in der u-ten Zeile und v-ten Spalte von AA' ist gleich dem Skalarprodukt der u-ten und der v-ten Zeile von A, d.h. von $\tilde{\mathbf{a}}_u$ und $\tilde{\mathbf{a}}_v$ (die Zeilen von A repräsentieren die gemessenen Variablen, die Spalten von A repräsentieren die latenten Variablen). Wegen $A = T\Lambda^{1/2}$ hat man $a_{uk} = t_{uk}\sqrt{\lambda_k}$ und $a_{vk} = t_{vk}\sqrt{\lambda_k}$, so dass

$$r_{uv} = \frac{1}{m}\tilde{\mathbf{a}}_u'\tilde{\mathbf{a}}_v = \frac{1}{m}\sum_{k=1}^{n}\lambda_k t_{uk}t_{vk} = \frac{1}{m}\|\tilde{\mathbf{a}}_u\|\|\tilde{\mathbf{a}}_v\|\cos\alpha_{uv} \tag{2.11}$$

α_{uv} der Winkel zwischen den Vektoren $\tilde{\mathbf{a}}_u$ und $\tilde{\mathbf{a}}_v$. Insbesondere erhält man für den Fall $u = v$ die Beziehung

$$r_{uu} = \frac{1}{m}\|\tilde{\mathbf{a}}_u\|^2 = 1 \tag{2.12}$$

so dass (2.11) impliziert, dass

$$r_{uv} = \cos\alpha_{uv} \tag{2.13}$$

Geometrische Implikationen und Anzahl der latenten Variablen: Der Befund (2.12) bedeutet, dass die Variablen stets durch Punkte (Endpunkte von Vektoren) auf einer Hyperkugel mit dem Radius 1 repräsentiert werden. Werden die Daten durch nur zwei latente Variable definiert, so ist die Hyperkugel ein Kreis, im Falle von drei latenten Variablen ist die Hyperkugel eben eine Kugel. Besonders für niedrigdimensionale Lösungen hat man damit einen raschen Test

[11] V& M, Abschn.

zur Hand: liegen die die Variablen repräsentierenden Punkte auf einem Kreis, so kann man von einer 2-dimensionalen Lösung ausgehen, liegen dagegen einige der Variablen deutlich innerhalb des Kreises, so wird man eine höherdimensionale Lösung akzeptieren müssen.

Es werde noch das Kreuzprodukt $A'A$ betrachtet. Dieses Produkt ist gleich der Matrix der Skalarprodukte der Spaltenvektoren von A, und da die Spaltenvektoren von A orthogonal sind, hat man

$$\mathbf{a}'_k \mathbf{a}_{k'} = \begin{cases} 0, & k \neq k' \\ \|\mathbf{a}_k\|^2 = \sum_{j=1}^{n} \lambda_k t_{jk}^2 = \lambda_k, & k = k' \end{cases} \tag{2.14}$$

Fasst man dieses Ergbnis mit (2.9) zusammen, so hat man

$$\|\mathbf{L}_k\|^2 = \|\mathbf{a}_k\|^2 = \lambda_k. \tag{2.15}$$

Da die $\mathbf{L}_k$ zentriert sind, ist λ_k proportional zur Varianz der Faktorwerte der Fälle auf der k-ten latenten Dimension. Dass λ_k auch gleich der Quadratsumme der Ladungen der Variablen auf L_k ist, bedeutet aber nicht notwendig, dass λ_k auch proportional zur Varianz der Ladungen ist, da die Ladungen nicht zentriert sind.

2.2 Interpretationshilfen

2.2.1 Beiträge einer latenten Variablen

Es kann hilfreich sein, den Beitrag des i-ten Falles zu einer latenten Dimension zu bestimmen. In ausgeschriebener Form gilt nach (2.15)

$$\|\mathbf{L}_k\|^2 = \sum_{i=1}^{m} \ell_{ik}^2 = \lambda_k.$$

Der Beitrag des i-ten Falles zur Definition der k-ten latenten Dimension wird dann definiert durch

$$B_{ik} = \frac{\ell_{ik}^2}{\lambda_k}. \tag{2.16}$$

Offenbar gilt $0 \leq B_{ik} \leq 1$ und $\sum_i B_{ik} = 1$. Je größer B_{ik}, desto mehr wird die k-te Dimension durch den i-ten Fall bestimmt. Die Fälle mit hohen B_{ik}-Werten und hohen negativen B_{ik}-Werten definieren dann die Endpunkte der k-ten Dimension und können dabei helfen, eine inhaltliche Bedeutung dieser Dimension zu finden.

Ein weiteres Maß ist der *quadrierte Kosinus* des Winkels zwischen dem Vektor, der einen Fall repräsentiert, und der k-ten latenten Dimension. Diese Größe definiert die Bedeutung der k-ten latenten Dimension für den i-ten Fall. Der i-te Fall wird durch den Vektor $\tilde{\mathbf{L}}_i$ repräsentiert. ℓ_{ik} ist die Abbildung dieses Vektors auf die k-te latente Dimension, und der Winkel zwischen $\tilde{\mathbf{L}}_i$ und der k-ten

Dimension sei θ_{ik}. Dann ist

$$\cos^2 \theta_{ik} = \frac{\ell_{ik}^2}{\|\tilde{\mathbf{L}}_i\|^2}. \tag{2.17}$$

Für $\theta_{ik} = 0$ ist $\cos^2 \theta_{ik} = 1$ und damit $\ell_{ik}^2 = \|\tilde{\mathbf{L}}_k\|^2$; man kann sagen, dass $\tilde{\mathbf{L}}_k$ durch den i-ten Fall definiert wird (oder umgekehrt, dass der i-te Fall durch die k-te latente Dimension bestimmt wird). Für $\theta_{ik} = \pi/2$ ist $\cos \theta_{ik} = 0$ und $\tilde{\mathbf{L}}_i$ steht orthogonal zur k-ten latenten Achse, d.h. $\ell_{ik} = 0$, so dass der i-te Fall nichts zur Charakterisierung der k-ten latenten Dimension beiträgt, und umgekehrt diese nichts zur Charakterisierung des i-ten Falles beiträgt.

Abbildung!

2.2.2 Abschätzung der Anzahl latenter Dimensionen

Wie schon angemerkt wurde haben Datenmatrizen im Allgemeinen vollen Rang, d.h.numerisch gilt $\text{rg}(Z) = \min(m, n)$. Oft kann man aber vermuten, dass es nur $r < \min(m, n)$ bedeutsame latente Variable gibt und $\min(m, n) - r$ der berechneten latenten Variablen nur "Rauschen", also zufällige Effekte abbilden.

Im Extremfall ist $r = 1$; dann werden die Kovarianzen zwischen den Variablen durch nur eine latente Variable erklärt. Sowohl Fälle wie Variable werden mit nur vernachlässigbaren Abweichungen auf einer Geraden repäsentiert. Müssen zwei latente Variablen angenommen werden, so liegen wegen (2.12) alle Variablen mit nur vernachlässigbaren Abweichungen auf einem Kreis. Die Abweichungen liegen stets innerhalb des Kreises, nie außerhhalb. Stärkere Abweichungen ins Innere des Kreises legen dann nahe, dass zumindest für einige Variable eine oder mehrere latente Variable eine Rolle spielen könnten.

Generell kann man vermuten, dass sich "bedeutsame" latente Variable dadurch auszeichnen, dass sie mehr zwischen Fällen und Variablen unterscheiden als zufällige Effekte. Gleichung (2.15) legt dann nahe, als Maß für die Bedeutsamkeit die Eigenwerte λ_k zu wählen: differenziert eine latente Variable Variable relativ stark zwischen den Fällen, so wird λ_k entsprechend groß sein. Die Vermutung bzw. Hofffnung ist dann, dass zwischen der Größe der Eigenwerte für "bedeutende" latente Dimensionen und der für "zufällige" latente Variable ein deutlicher Unnterschied besteht. Diese Betrachtung der Eigenwerte ist der Scree-Test.

Abbildung scree-Test

Varianten des Scree-Tests:

2.2.3 Statistische Inferenz

Es gibt grundsätzlich zwei Modelle, in Bezug auf die die Resultate einer PCA interpretiert werden können; es sind die aus der ANOVA bekannten Modelle:

(i) das *'"Fixed Effect Model"* und (ii) das *"Random Efffect Model"*. Im Fixed Model wird die Stichprobe als die Population von Messungen betrachtet, die von Interesse ist, während beim Random Model die Daten eben als Stichprobe aus einer größeren Stichprobe betrachtet werden, auf die verallgemeinernd geschlossen werden soll. Insbesondere sollen neue Messungen im Rahmen der Resultate für die gegebenen Stichprobe diskutiert werden.

Das Fixed Effect Model: Die Matrix X kann auf der Basis der SVD über die dyadischen Produkte der Spaltenvektoren von Q und T ausgedrückt werden, denn die rechte Seite von $X = Q\Lambda^{1/2}T'$ ist äquivalent zu

$$X = \sigma_1 \mathbf{q}_1 \mathbf{t}_1' + \sigma_2 \mathbf{q}_2 \mathbf{t}_2' + \cdots + \sigma_n \mathbf{q}_n \mathbf{t}_n' = \sum_{k=1}^{n} \sigma_k \mathbf{q}_k \mathbf{t}_k' \quad \sigma_k = \sqrt{\lambda_k}. \tag{2.18}$$

(2.18) kann benutzt werden, um den Wert des Ranges r von X abzuschätzen: Terme mit "hinreichend" kleinen λ_k-Werten können u.U. vernachlässigt werden. Man hat dazu den

Satz 2.1 *(Satz von Eckart & Young) Die Approximation*

$$X \approx X_r = Q_r \Lambda_r^{1/2} T_r' = \sum_{k=1}^{r} \sqrt{\lambda_k} \boldsymbol{q}_k \boldsymbol{t}_k', \quad r < n \tag{2.19}$$

approximiert X im Sinne der Methode der Kleinsten Quadrate.

Beweis: Bekannt wurde diese Aussage (samt Beweis) durch die Arbeit von Eckart & Young (1936); eine modernere Version des Beweises wird in http://www.uwe-mortensen.de/VektorenMatrizen2020.pdf, Abschnitt 2.8.5 angeboten. □

Für $r < n$ wird im Allgemeinen $\hat{X}_r \neq X$ gelten. Dazu sei E eine Fehlermatrix derart, dass

$$X = \hat{X}_r + E, \tag{2.20}$$

d.h. $E = X - \hat{X}_r$. Man betrachtet dann die *Residual Sum of Squares* (RESS):

$$\text{RESS} = \|E\|^2 = \|X - \hat{X}_r\|^2 = \text{spur}(E'E) = I_n - \sum_{k=1}^{r} \lambda_k \tag{2.21}$$

(Vergl. V & M, Abschnitt 2.7.5)

Das Random Effect Model: Die Frage ist, ob die Ergebnisse für die Stichprobe auf eine Population generalisiert werden können. Eine möglichkeit, dies zu tun, besteht in der Annahme einere multivariaten Verteilung für für Daten; üblicherweise wird die multivariate Gauß-Verteilung angenommen. Diese Annahme muß aber keinesfalls gerechtfertigt sein. Ein alternativer Ansatz besteht in der Anwendung der *jack-knife*-Technik. Dazu wird, einer nach dem anderen, ein Fall aus den Daten gestrichen und die Analyse für die restlichen Fälle durchgeführt.

Anschließend wird der herausgenommene Fall auf der Basis der Analyse vorhergesagt. Auf diese Weise werden die Daten eines jeden Falls auf der Basis der jeweils übrigen vorausgesagt. Die vorhergesagten Werte werden dann in einer Matrix $\hat{X}$ zusammengefasst.

Die Qualität des PCA Random-Effekt-Modells wird dann durch den Vergleich von $\hat{X}$ mit den Matrizen $\hat{X}_r$ (vergl. (2.19)) bewertet. Die kritische Grösse ist die *Predicted Residual Sum of Squares* (PRESS). Man hat

$$\text{PRESS} = \|X - \hat{X}_r\|^2. \tag{2.22}$$

Die Qualität der PCA-Lösung ist um so besser, je kleiner die PRESS-Größe ist.

2.2.4 Rotationen

Grundsätzliche Argumentation: bei der PCA darf nicht rotiert werden, da dann die Unabhängigkeit der latenten Dimensionen verloren geht.

Es sei Z eine spaltenstandardisierte Datenmatrix, und

$$\frac{1}{\sqrt{m}} Z = Q \Lambda^{1/2} T'$$

sei die SVD von Z. Es sei $A = T\Lambda^{1/2}$ die Matrix der Ladungen für die Variablen. Die Spaltenvektoren $\mathbf{t}_k$ von T repräsentieren die Orientierungen, also der Hauptachsen des durch die Matrix $\frac{1}{m} Z'Z = R$ definierten Ellipsoids, ubnd die Orthogonalität der $\mathbf{t}_k$ bedeutet die Unkorreliertheit der durch diese Achsen repräsentierten latenten Variablen. Oft ergibt sich die Frage, ob eine Rotation der $\mathbf{a}_k = \sqrt{\lambda_k}\mathbf{t}_k$, also der Spaltenvektoren von A, eine bessere Interpretierbarkeit der Ergebnisse erlaubt.

Es sei also S eine orthonormale (n, n)-Matrix, die die $\mathbf{a}_k$ um einen bestimmten Winkel rotiert. Die Matrix $\tilde{A}$ der rotierten Achsen ist dann

$$\tilde{A} = SA. \tag{2.23}$$

Damit die $\mathbf{z}_j$ der Datenmatrix auch aus den rotierten Achsen rückgerechnet werden können, muß dann

$$\frac{1}{\sqrt{m}} Z = QSS'A' = QS\tilde{A}' = \tilde{Q}\tilde{A}' \tag{2.24}$$

gelten. QS enthält die rotierten Zeilenvektoren $\tilde{\mathbf{u}}_i$ von $\frac{1}{\sqrt{m}} Z$. Die Konfiguration der Fälle ist damit nicht mehr achsenparallel, d.h. in bezug auf die neuen Achsen folgt, dass die latenten Merkmale, die von diesen Achsen repräsentiert werden, *nicht* unkorrreliert sind.

Tabelle 1: Merkmalskorrelationen und Faktorladungen

Korrelationen zwischen den Merkmalen				
	Kompos.	Zeichn.	Farbe	Ausdruck
Kompos.	1.00	.415	-.097	.656
Zeichn.	.415	1.00	-.517	.575
Farbe	-.097	-.517	1.00	-.209
Ausdruck	.656	.575	-.208	1.00
de Piles Ästhetik: Faktorladungen bezüglich der Hauptachsen				
Merkmal	ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_4
Kompos.	.48	-.37	.78	.10
Zeichn.	.42	.19	-.28	.84
Farbe	-.38	-.85	-.21	.31
Ausdruck	.66	-.33	-.31	-.43
kum. Varianz	55.95	84.48	93.59	100.00

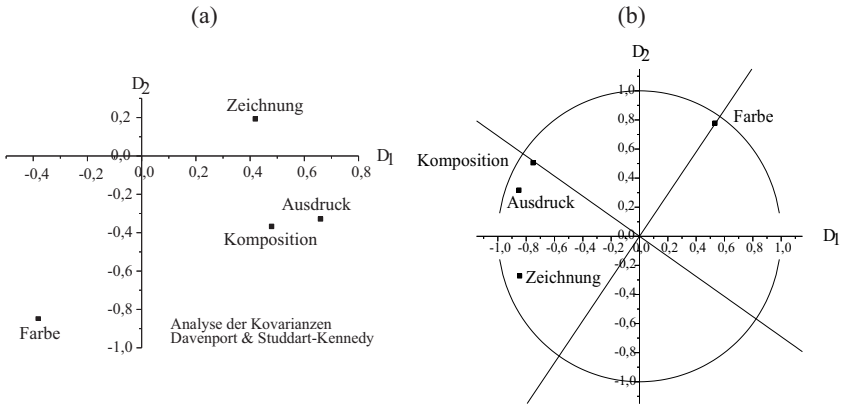
Davenport und Studdert-Kennedy (1972)[12] analysierten die ästhetischen Urteile des Kunstkritikers Roger de Pile über 56 Maler, von Albani, Dürer, Veronese, Holbein, Rembrandt, Rubens, Titian bis Van Dyck, Vanius und den Zuccaros, die de Pile Jahr 1743 notierte; diese Ratings liefern möglicherweise auch Informationen über die Kunstrezeption in der Mitte des 18-ten Jahrhunderts. Monsieur de Pile "ratete" die Maler in bezug auf vier Merkmale: "Komposition", "Zeichnung", "Farbe" und "Ausdruck", d.h. er schätzte die Maler bezüglich dieser Merkmale auf einer Skala von 0 bis 20 ein; die Ratingskala ist also keine Erfindung neuzeitlicher Psychologen[13].

Die Korrelation zwischen den Merkmalen 'Komposition' und 'Farbe' beträgt nach Tabelle 1 $r = .097$, – man kann $r = .00$ annehmen, d.h. die Beurteilungen Maler bezüglich dieser beiden Merkmnale sind unkorreliert. Es liegt dann nahe, diese beiden Merkmale als neue Bezugsmerkmale, also als "latente" Variable zu wählen. Die übrigen Merkmale lassen sich als Linearkombination dieser beiden neuen Variablen darstellen. Dies bedeutet eine Rotation der ursprünglichen latenten Achsen um einen bestimmten Winkel. In Bezug auf diese neuen Achsen wird die Konfuguration der Maler nicht mehr achsenparallel sein, die Abbildung der Maler auf die erste neue Achse werden nicht mehr die maximal mögliche Varianz haben. Die Frage ist, ob dieser Sachverhalt ein Nachteil ist: man interpretiert ja

[12]Davenport, M., Studdert-Kennedy, H. (1970) Use of orthogonal factors for selection of variables in a regression equation. Appl. Statist. **21**, 324-333. Dem Titel entsprechend diskutieren die Autoren die Anwendung der Hauptachsentransformation (Principal Component Analysis - PCA) im Rahmen eines Regressionsproblems. Es sollen optimale Prädiktoren für die Ratings gefunden werden.

[13]Eine ausführliche Diskussion dieser Daten findet man unter http://www.uwe-mortensen.de/fakanalysews0506b.pdf.

Abbildung 5: Faktorladungen für de Piles Merkmale von Gemälden: (a) von Kovarianzen, (b) von standardisierten Werten



die latenten Achsen nicht notwendig nach Maßgabe der Abbildungen der Fälle, sondern überlicherweise nach den Abbildungen der Variablen auf die latenten Achsen.

Analoge Betrachtungen gelten, wenn allgemeine Rotationsstrategeien wie die Varimax-Rotation auf die Variablen angewendet werden.

3 Beispiele

3.1 R.A. Fishers Iris-Daten

R. S. Fisher publizierte 1936 eine Methode zur Klassifikation von Objekten, die *Diskriminanzanalye*, die er an einem mittlerweile berühmten Datensatz aus der Botanik illustrierte: es sind Messungen an der Pflanze *Iris*. Tabelle 2 zeigt zur Illustration einen Ausschnitt aus diesem berühmten Datensatz. Es gibt vier Variablen: Die Kelchblatt (sepal)- sowie die Blütenblatt (petal)-Länge sowie die entprechenden Breiten in cm, und drei Kategorien (Arten: setosa, versicolor und virginica). Für jede dieser Arten gibt es fünzig Fälle, so dass die Tabelle insgesamt 150 Fälle enthält. Die Daten sollen hier einer PCA unterzogen werden. Da die erste Dimension so gewählt wird, dass die Varianz der Abbildungen der Fälle auf die korrespondierende Achse maximal ist, kann untersucht werden, ob diese Erste Achse auch eine Differenzierung zwischen den Irisarten liefert.

Es wird oft stillschweigend angenommen, dass die Stichprobe der Fälle homogen ist in dem Sinne, dass sich die Ergebnisse der Analyse für Teilstichpoben der Stichprobe nnur zufällig voneinander untereschеiden. In diesem Fall ist aber schon aus der Fischerschen Untersuchung (1936) bekannt, dass sich die drei Arten

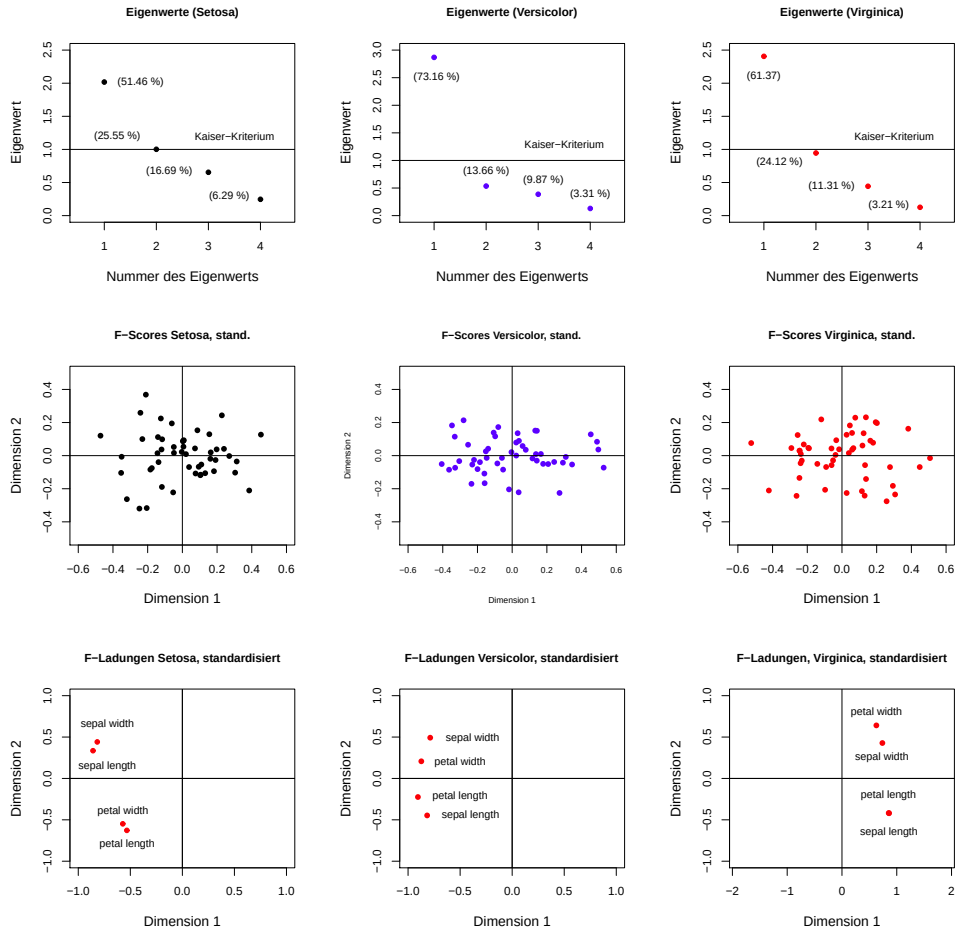
Tabelle 2: Fishers Irisdaten

	Sepal Length	Sepal Width	Petal Length	Petal Width	Species
1	5.1	3.5	1.4	0.2	setosa
2	4.9	3.0	1.4	0.2	setosa
3	4.7	3.2	1.3	0.2	setosa
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
50	5.0	3.3	1.4	0.2	setosa
51	7.0	3.2	4.7	1.4	versicolor
52	6.4	3.2	4.5	1.5	versicolor
53	6.9	3.1	4.9	1.5	versicolor
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
100	5.7	2.8	4.1	1.3	versicolor
101	6.3	3.3	6.0	2.5	virginica
102	5.8	2.7	5.1	1.9	virginica
103	7.1	3.0	5.9	2.1	virginica
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
150	5.9	3.0	5.1	1.8	virginica

unterscheiden, d.h. die Punktekonfiguration der Fälle besteht aus Teilkonfigurationen, die sich duch geeignet gewählte Hyperebenen separieren lassen; Fishers Lineare Diskriminanzanalyse (LDA) wird an anderer Stelle vorgestellt. Dieser Befund legt nahe, dass sich die PCAs für diese Teilpopulationen voneinander unterscheiden. Geht man also gewissermaßen naiv an die Daten heran, so findet sich für die Gesamtstichpobe stets ein Ellipsoid, dass die Gesamtstichprobe im Sinne der Abbildung 4 beschreibt. Die Analyse der Gesamtstichprobe kann sich von den Analysen der Teilstichproben unterscheiden. Diese Teilmengen sind zunächst jede für sich mit einer PCA analysiert worden. Die Abbildung 6 zeigt die Resultate der Einzelanalysen.[14] Die Scree-Plots (Eigenwerte versus Rangplatz der Eigenwerte) für die drei Arten legen nahe, dass zwei latente Dimensionen einen gute Approximation an die Daten liefern (die Werte in den Klammern sind die prozentualen Anteile einer Dimension an der Gesamtvarianz). Die Plots der Faktorwerte (F-Scores) zeigen, dass die Orientierungen der Konfigurationen der Fälle jeweils mit der der ersten latenten Dimension übereinstimmen, – dies entspricht dem Ansatz der PCA, als erste latente Dimension die Orientierung mit der maximalen Varianz der Abbildubngen der Fälle zu wählen. Die Struktur der Variablen ist aber, wie die Faktorladungen der Variablen für die drei Klassen von Iris zeigen, für jede der drei Arten spezifisch. Während alle Variablen (petal width, petal length, etc) auf der ersten latenten Dimension nahezu identische Ladungen zeigen, va-

[14] Berechnungen in ProbierScriptDiscrim-R

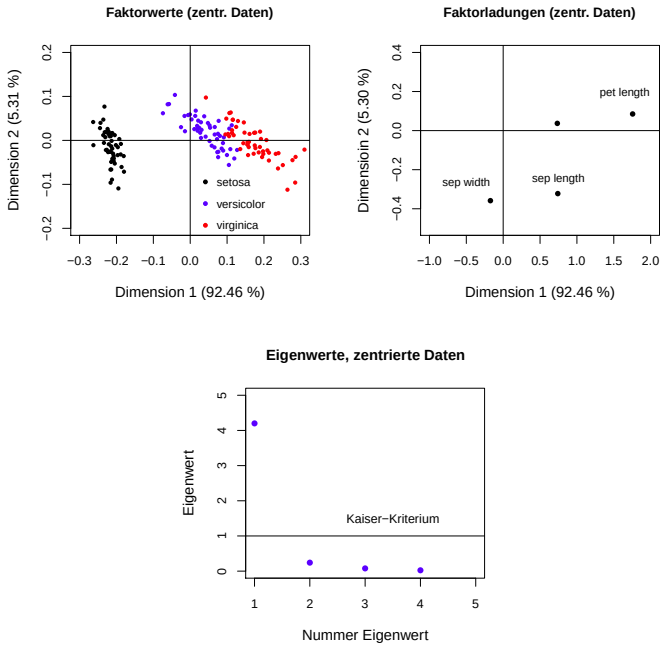
Abbildung 6: PCA Iris-Daten, Einzelanalysen (standardisierte Daten)



riieren die Ladungen auf der zweiten latenten Dimension; sogar die Reihenfolge der Abbildungen auf die zweite Achse variiert von einem Iristyp zum anderen.

Fasst man die Daten für die einzelnen Arten zu einer Gesamtstichprobe zusammen, so ergibt sich das in Abbildung 7 gezeigte Bild, falls die Daten nur zentriert werden. Die erste latente Dimension separiert im Wesentlichen die drei Klassen *setosa, versicolor* und *virginica*, und die Faktorladungen für die vier Variablen unterscheiden sich von denen für die einzelnen Klassen, – was nicht verwunderlich ist, die Faktorladungen für die Gesamtstichprobe ergeben sich aus einer Art Mittelung über die Einzelstichproben. Bemerkenswert ist, dass sich die Gruppe der setosa-Pflanzen so deutlich von den beiden übrigen Arten versicolor und virginica unterscheidet, die zwar auch separate, aber gleichwohl dicht beieinander liegende Cluster bilden. Es ist die Trennung von setosa einerseits und versicolor und virginica andererseits, die die erste latente Dimension definiert. Die erste Reihe

Abbildung 7: PCA Iris-Daten (zentriert)



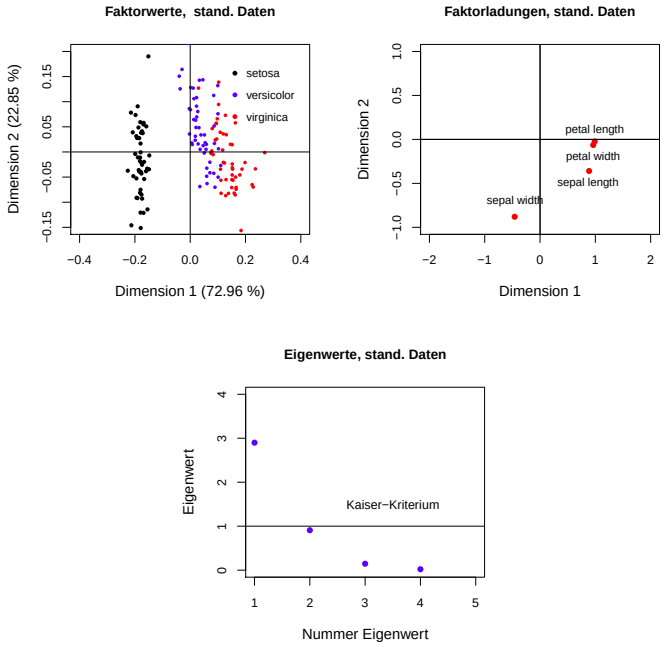
zeigt die Darstellung der Fälle der drei Gruppen in einem 2-dimensionalen latenten Koordinatensystem. Die erste Achse entspricht der größten Ausdehnung der Punktekonfiguration. Die zweite Reihe zeigt die Faktorladungen der vier Variablen sepal und petal length und sepal und petal width. Hier zeigen sich deutliche Unterschiede zwischen den drei Arten Setosa, Versicolor und Virginica. Die letzte Reihe zeigt den Verlauf der Eigenwerte für die drei Arten. Die erste latente Variable ”erklärt” demnach den größen Teil der Varianz, während die zweite latente Variable zumindest dem Kaiser-Kriterium zufolge nur noch eine grenzwertige, im Falle Versicolor gar keine erklärende Funktion für die Erklärung der Daten hat.

Abbildung 8 zeigt die Resultate einer PCA, wenn über alle drei Klassen gewissermassen gemittelt wird. Die Faktorwerte zeigen eine deutliche Separation der

Tabelle 3: Matrix der Korrelationen

	Sep. length	Sep. width	Pet. length	Pet. width
sep. length	1.000			
Sep. witdth	-.117	1.000		
Pet. length	.871	-.428	1.000	
pet. width	-.818	-.366	.962	1.000

Abbildung 8: PCA der standardisierten Irisdaten

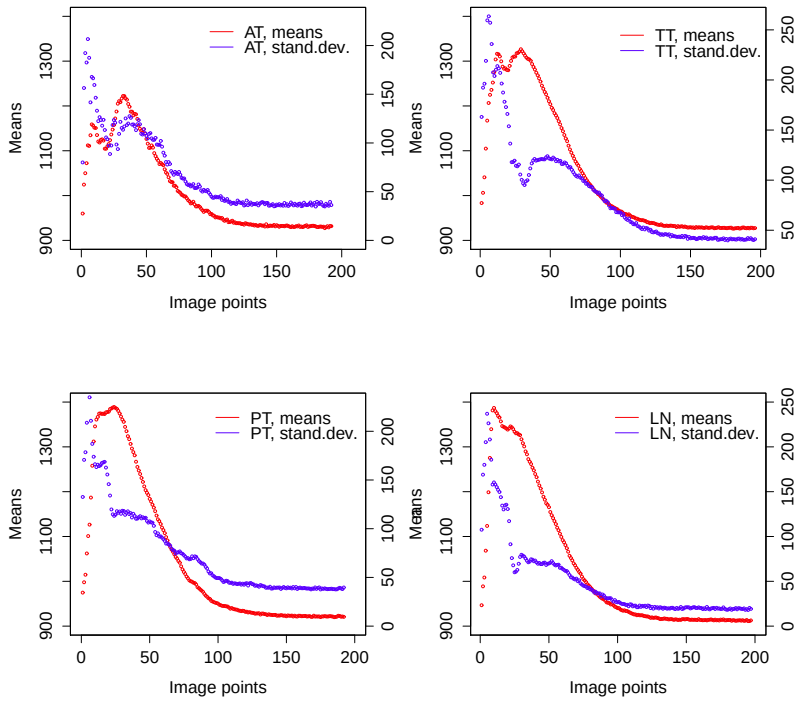


drei Iris-Klassen, auch wenn die Abbildungen der Punkte auf die die erste latente Achse für die Klassen Versicolor und Virginica gewisse Überlappungen zeigen. Deutlich wird die Klasse Setosa von den beiden übrigen Klassen getrennt. Die Eigenwerte zeigen, dass die Lösung maximal 2-dimenional ist; nach dem Kaiser-Kriterium ist die zweite Dimension kaum noch von Bedeutung. Von Interesse sind ebenfalls die Faktor-Ladungen. Die Struktur der Ladungen entspricht keiner der Strukturen in den Einzelanalysen, man kann sagen, dass sie ein Artefakt der Zusammenfassung der Daten ist. Dieser Befund wirft ein Schlaglicht auf die "naive" Interpretation von Analysen, die die Homogenität der Stichprobe von Fällen unterstellen. Allerdings kann die nähere Betrachtung der Konfiguration der Fälle möglicherweise Hinweise auf die Existenz verschiedenere Klassen von Fällen geben.

3.2 Die Analyse von Schilddrüsengeweben

In der Medizin müssen vielfach Gewebeproben klassifiziert werden. Für diese Aufgabe können OCT-Bilder (OCT – Optical Coherence Tomography) hilfreich sein. Bei dem hier betrachteten Gewebeproben handelt es sich um Schilddrüsengewebe. Die OCT-Bilder sind 2-dimensional. Es wurden 1-dimensionale Profile der Bilder angefertigt, die den Helligkeitsverlauf der Bilder über 190 bis 200 Pixel beschreiben. Die Frage war, ob diese Profile die für die Klassifikation notwendige

Abbildung 9: Mittlere Helligkeiten (Profile) und Standardabweichungen (rechte Skala) von OCT-Bildern (Schilddrüsengewebe)



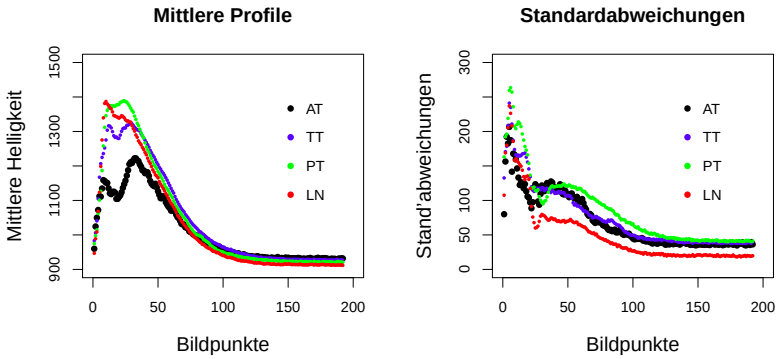
Information enthalten. Dementsprechend gibt es 192 Prädiktoren (Pixel), deren Helligkeitswerte als Prädiktorwerte in die Analyse eingingen.

Man kann fragen, wieviele Dimensionen zur Beschreibung der Profile überhaupt benötigt werden, und ob die PCA eine gewisse Trennung der Gewebetypen liefert, – schließlich soll die erste latente Dimension maximal zwischen den Fällen trennen, und falls die Fälle dem Gewebetyp entsprechend Cluster bilden, könnte es sein, dass zummindest die erste latente Dimension zwischen den Typen AT, TT, PT und LN diskriminiert. Insgesamt standen 291 "Fälle", d.h. Gewebeproben zur Verfügung: 26 Fälle für die Kategorie AT, 102 für die Kategorie TT, 89 für die Kategorie PT und 74 für die Kategorie LN.

Abbildung 9 zeigt die mittleren Profile und die Standardabweichungen pro Pixel. Die Abbildung 10 zeigt, dass sich die Profile hauptsächlich im Bereich 0 bis 50 Pixel unterscheiden; Beurteiler werden also insbesondere auf diesen Bereich fokussieren.

Die PCA ist einmal für zentrierte, und einmal für standardisierte Daten gerechnet worden. Die zentrierte Lösung macht insofern Sinn, als alle Bewertungen

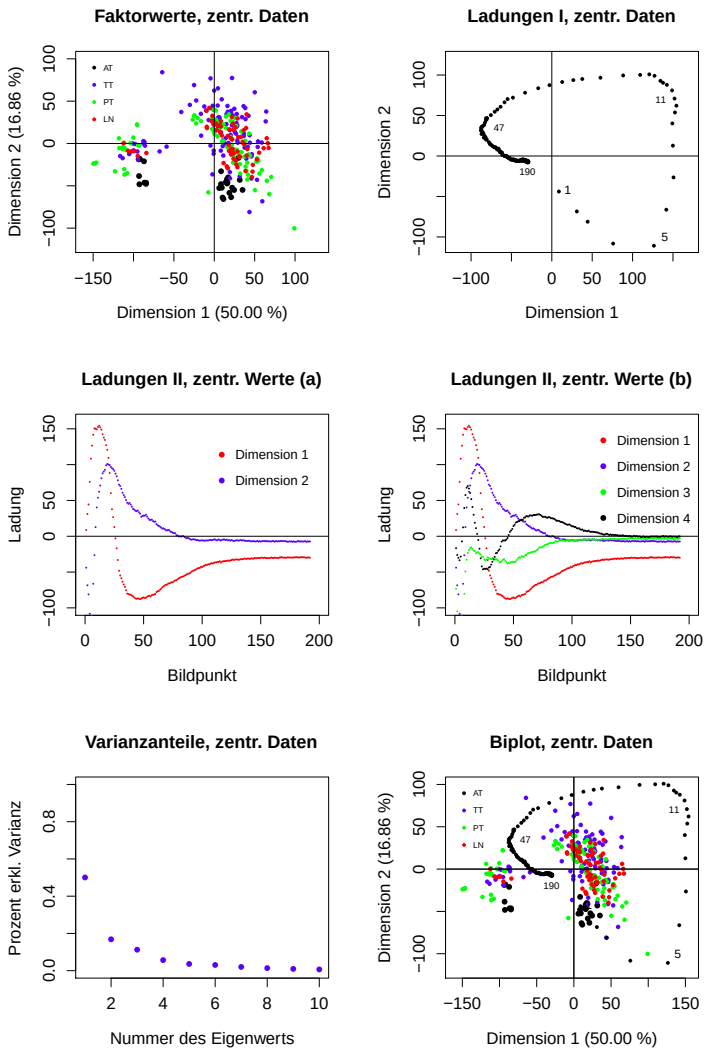
Abbildung 10: Mittlere Helligkeitsprofile (Schilddrüsengewebe)



auf demselben Skalentyp abgegeben wurden. Allerdings können die Variablen verschiedene Varianzen haben, was sich auf die Faktorwerte (Gewebeproben) ebenso wie auf die Faktorladungen (Pixel)auswirken kann.

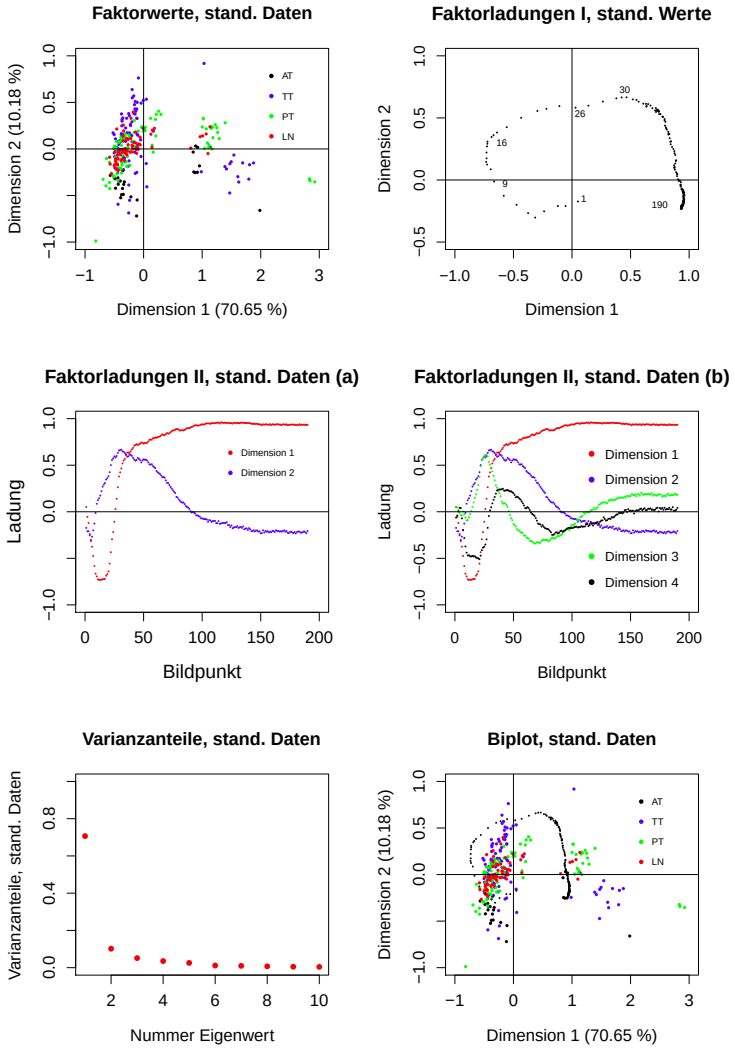
Abbildung 11 zeigt die Ergebnisse für die zentrierten Daten. Der Plot der Faktorwerte zeigt zwei Cluster, die die erste latente Variable definieren. Allerdings sind die Cluster nicht durch die Gewebetypen AT, TT, etc definiert, beide Cluster bestehen aus Mischungen dieser Typen. Es ist nicht klar, worin der Unterschied zwischen den Elementen des kleineren Clusters einerseits und des größeren Clusters andererseits ausmacht. Die beiden ersten latenten Variablen erklären überdies nur ca 67% der Gesamtvarianz, und es ist nicht klar, ob die restlichen 33% nur "Rauschen" bedeuten. Interessant ist der Verlauf der Ladungen für die "Variablen", also den Pixeln. Die Ladungen für die ersten 50 Pixel unterschieden sich deutlich voneinander, im Vergleich zu den Ladungen der restlichen 120 Pixel. Die mittleren Helligkeitsverläufe legen nahe, warum dies so ist. Während in Ladungen I die Ladungen der Pixel als Koordinaten der Pixen auf den latenten Dimensionen aufgetragen wurden, werden in Ladungen II die Ladungen auf der ersten und der zweiten latenten Dimension gegen die Pixel selbst aufgetragen. In (b) sind zusätzlich noch die Ladungen für die Dimensionen 3 (grün) und 4 (schwarz) aufgetragen worden. r Beitrag dieser Dimensionen ist offenbar geringer als der der ersten beiden Dimensionen, scheint aber noch hinreichend systematisch zu sein um die Vermutung zu rechtfertigen, dass diese Dimensionen nicht nur Rauschen abbilden. Abbildung 12 zeigt die Ergebnisse für die standardisierten Daten. Die Inspektion der Varianzanteile zeigt, dass die erste Dimension im Vergleich zu den Übrigen eine sehr viel dominantere Rolle zu spielen scheint. Zusammen erklären die beiden ersten Dimensionen ca 81% der Varianz in den Daten. Davon abgesehen zeigt sich die Aufspaltung zwei von den Gewebetypen unabhängige Cluster, wie schon bei den zentrierten Daten. Der Verlauf der Faktorladungen unterscheidet sich allerdings vom Verlauf bei den zentrierten Daten: Die Ladungen für die

Abbildung 11: Schilddrüsendaten: erklärte Varianz, zentr. Daten



Dimension 1 streben gegen 1 und nicht, wie bei den zentrierten Daten, gegen Null. Die Darstellung des Biplots ist allerdings nicht ganz korrekt, weil sowohl die Faktor*werte* wie die Faktor*ladungen* eingezeichnet wurden, – es geht bei der Darstellung mehr um das Prinzip des Biplot. Was sich allerdings vermuten läßt, ist, dass das kleine Cluster durch Abweichungen in den höheren Pixelbereichen erzeugt wird.

Abbildung 12: Schilddrüsendaten: erklärte Varianz, stand. Daten



4 PCA und Faktorenanalyse

4.1 Die Annahmen

Bei der Faktorenanalyse wird angenommen, dass die zentrierten Datenvektoren $\mathbf{x}_j$ sich (i) als Linearkombinationen "gemeinsamer Faktoren" $\mathbf{F}_k$, $k = 1, \ldots, r$, sowie eines jeweilig "spezifischen Faktor"' $\mathbf{e}$ ergeben:

$$\mathbf{x}_j = b_{1j}\mathbf{F}_1 + \cdots + b_{rj}\mathbf{F}_r + \mathbf{e}_j, \quad j = 1, \ldots, n \tag{4.1}$$

wobei die $\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \ldots, \mathbf{F}_r$ hypothetische, unkorrelierte "Faktoren", also latente Größen sind, und die b_{jk} sind Gewichte, mit denen die Faktoren in die j-te gemessene Variable eingehen. Die $\mathbf{x}_j$ werden explizit, ebenso die $\mathbf{F}_k$, als Zufallsvektoren aufgefasst. Es sei $\mathbf{F} = [\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \ldots, \mathbf{F}_n]$; dann kann der Ansatz in Matrixform geschrieben werden:

$$X = FB' + \mathbf{e} \tag{4.2}$$

Annahmen:

$$\mathbb{E}(\mathbf{e}) = 0, \quad \mathbb{E}(F) = 0, \quad \mathbb{E}(F'F) = I, \quad \mathbb{E}(X) = 0. \tag{4.3}$$

Es werde insbesondere $X = Z$ gesetzt, d.h. es werden standardisierte Messwerte betrachtet. Dann ist $\frac{1}{m}Z'Z = R$ die Matrix der Korrelationen zwischen den Variablen. Der Anstz (4.2) impliziert dann

$$mR = (FBA' + \mathbf{e})'(FB' + \mathbf{e}) = BF'FB' + +BF'\mathbf{e} + \mathbf{e}'FB' + \mathbf{e}'\mathbf{e} \tag{4.4}$$

Die Komponenten von $\mathbf{e}$ werden als statistisch unabhängig angenommen, so dass

$$\mathbf{e}'\mathbf{e} = \operatorname{diag}(e_1^2, \ldots, e_n^2). \tag{4.5}$$

Weiter wird angenommen, dass die Fehler und die Faktoren statistisch unabhängig sind, so dass $AF'\mathbf{e} = 0$ und $\mathbf{e}'FB' = 0$. Dann resultiert

$$\frac{1}{m}\mathbb{E}(Z'Z) = R = B\mathbb{E}(F'F)B' + \mathbf{e}'\mathbf{e} = BB' + \mathbf{e}'\mathbf{e}, \tag{4.6}$$

Diese Gleichung wird gelegentlich als *Fundamentaltheorem der Faktorenanalyse* bezeichnet. Für r_{jj} ergibt sich

$$r_{jj} = \sum_{k=1}^{r} b_{kk}^2 + e_j^2 \tag{4.7}$$

Hierin ist

$$h_j^2 = \sum_{k=1}^{r} b_{kk}^2 \tag{4.8}$$

die *Kommunalität*; die Kommunalität ist derjenige Anteil an r_{jj}, der auf die gemeinsamane Faktoren zurückgeführt werden kann, während e_j^2 der Anteil ist, der auf den spezifischen Faktor in der j-ten Variablen zurückgeht. Wegen $r_{jj} = 1$ folgt

$$h_j^2 + e_j^2 = 1. \tag{4.9}$$

Oft wird die zusätzliche Annahme gemacht, dass die Daten multivariat Gaußverteilt sind. Diese Annahme – falls sie gerechtfertigt ist – erlaubt die Anwendung der Maximum-Likelihood-Methode zur Schätzung der freien Parameter.

4.2 Approximation: die Hauptkomponentenanalyse

Vergleicht man den auf der SVD beruhenden Ansatz der PCA mit dem der Faktorenanalyse, so fällt auf, dass der wesentliche Unterschied zwischen dder PCA und der Faktorenanalyse (FA) darin besteht, dass bei der FA die spezifischen Faktoren und damit die Kommunalitäten der Variablen eingeführt werden. Oft wird angeführt, dass die FA ein *Modell*, die PCA dagegen nur eine Beschreibung der Daten sei. Man muß allerdings bedenken, dass auch die PCA auf einer zentralen Annahme beruht, nämlich dass sich die beobachteten Vektoren $\mathbf{x}_j$ als Linearkombinationen der latenten Vektoren ergeben, $X = LT'$; die Annahme der Orthonormalität von T führt dann zu $XT = L$, d.h. die Vektoren von L sind Linearkombinationen der Spaltenvektoren von X. Die Linearitätsannahme ist ja nicht trivial: die Frage ist doch, warum sie gelten soll. Ein Antwort auf diese Frage könnte in dem Hinweis bestehen, dass lineare Funktionen oft eine gute Annäherung an die "wahren" nichtlinearen Funktionen bestehen. Man hat es dann bei der PCA ebenfalls mit einem Modell zu tun, dass eben (i) in der Annahme der Linearität als Approximation an möglicherweise existierende Beziehungen und (ii) in der Annahme, dass die latenten Variablen mit "hinreichend kleinen" Eigenwerten eben "Fehlervariablen" reflektieren. Setzt man $B = A = T\Lambda^{1/2}$ und $F = Q$, so liefert die PCA eine als *Hauptkomponentenanalyse* bekannnte Startlösung für die FA.

5 Zusammenfassung

Die PCA ist ein handliches Verfahren, um sich schnell Einen eindruck von der Mehrdimensionalität eines Datensatzes zu verschaffen. Darüber hinaus leistet es gute Dienste im Zusammenhang mit anderen Verfahren wie der multiplen Regression, wenn es Probleme mit korrelierenden Prädiktorvariablen gibt. Die PCA liefert eine erste Appoximation an eine faktorenanalytische Diskussion eines Datensatzes.

Im Zusammenhang mit der FA wird oft angemerkt, dass die FA ein modell der Daten reprräsentiere, während die PCA "nur" ein Beschreibung der Daten liefere. Es darf allerdings nicht übersehen werden, dass es keine Beschreibung ohne theoretische Begriffe gibt, – der Hintergrund dieser Aussage liegt in den Diskussionen der ursprünglichen Annahmen der Philosophen des Wiener kreises, die eine metaphyikfreie, auf elementaren, d.h. theoriefreien Aussagen beruhende Wissenschaft aufbauen wollten. Dieserr nspruch führte bereits innerhalb des Wiener Kreises zur *Protokollsatzdebatte*, deren Resultat die Einsicht war, dass auchh einfache Protokollsätze nicht notwendig frei von jeder Theorie sind, schon Protokollätze sind "theoriegetränkt". Bei der PCA besteht diese nicht weiter hintergehbare Theorie in der Annahme, dass die Variablen linear aufeinander wirken. In http://www.uwe-mortensen.de/fakanalysews0506b.pdf werden nichtlineare Mo-

delle vorgestellt. Ein konzeptuell aufwändigeres Verfahren ist die Kernel-PCA, bei der eine Abbildung in einen Raum höherer Dimension ein additives Modell zuläßt. Die Kernel-PCA muß wegen der vorbereitenden Betrachtungen gesondert dargestellt werden.

Nimmt man bei der PCA noch die Annahme, die Daten seien multivariat normalverteilt hinzu, so lassen sich die orthogonalen latenten Dimensionen als Repräsentationen statistisch unabhängige Merkmale interpretieren. Ein Ansatz, von vorn herein auf statistisch unabhängige latente Variablen zu zielen, ist die *Independent Component Analysis* (ICA). Bei dieser Analyse wird gerade vorausgesetzt, dass die Daten *nicht* multivariat Gauß-verteilt sind. Auch hier wird eine gesonderte Darstellung nötig.

6 Anhang

Dazu erinnere man sich an die Forderung, dass die $\mathbf{L}_k$ aus den $\mathbf{z}_j$ erreichnet werden müssen, – es sind ja nur die Daten Z gegeben. Nach (**??**) ist die Beziehung zwischen den $\mathbf{z}_j$ und den $\mathbf{L}_k$ linear, so dass man folgern kann, dass sich die $\mathbf{L}_k$ aus den $\mathbf{z}_j$ ebenfalls als Linearkombination ergeben. Es sei also $V = [\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n]$ eine Matrix mit n-dimensionalen Spaltenvektoren $\mathbf{v}_k$ derart, dass

$$ZV = L, \quad Z\mathbf{v}_k = \mathbf{L}_k, \ k = 1, \ldots, n \tag{6.1}$$

gilt. Nach A1 sollen die $\mathbf{L}_k$ orthogonal sein; dementsprechend muß

$$V'(Z'Z)V = L'L = \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n) \tag{6.2}$$

gelten, wobei $\lambda_k = \mathbf{L}_k'\mathbf{L}_k = \|\mathbf{L}_k\|^2$ ist. Nach A2 soll λ_1 maximal sein. Dazu kann man festellen, dass $\mathbf{v}'Z'Z\mathbf{v}$ eine quadratische Form ist[15], und nach dem Satz von Courant-Fischer gilt[16]

$$Q(\mathbf{v}) = \frac{\mathbf{v}'Z'Z\mathbf{v}}{\mathbf{v}'\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}'Z'Z\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|^2} = \frac{\mathbf{v}'}{\|\mathbf{v}\|}Z'Z\frac{\mathbf{v}'}{\|\mathbf{v}\|} = \max \tag{6.3}$$

genau dann, wenn $\mathbf{v}/\|\mathbf{v}\| = \mathbf{t}_1$, wobei $\mathbf{t}_1$ der zum größten Eigenwert λ_1 korrespondierende Eigenvektor von $Z'Z$ ist. Für $\mathbf{L}_2$ folgt dann ebenfalls aus dem Satz von Courant-Fischer, dass $\mathbf{L}_2 = Z\mathbf{t}_2$ ist $\mathbf{t}_2$ der zum zweitgrößten Eigenwert λ_2 korrespondierende Eigenvektor von $Z'Z$, etc. Damit wird A2 erfüllt, wenn $V = T$, T die (n, n)-Matrix der Eigenvektoren von $Z'Z$ gesetzt wird. Die in A2 genannte Nebenbedigung besteht darin, dass die $\mathbf{v}$ auf die Länge 1 normiert sein muß, und sie wird in (6.3) durch die Betrachtung von $\mathbf{v}/\|\mathbf{v}\|$ erfüllt. Tatsächlich wird für die Eigenvektoren $\mathbf{t}_k$ gefordert, dass sie die Länge 1 haben. Da Eigenvektoren symmetrischer Matrizen außerdem orthogonal sind folgt, dass T orthonormal ist. d.h. es gilt $T'T = I_n$, I_n die (n, n)-Einheitsmatrix.

[15] V& M, Abschn. 2.5.2
[16] V& M, Abschn. 2.5.4

Literatur

[1] Brachinger, HW, Ost F.: Modelle mit latenten Variablen: Faktorenanalyse, Latent-Structure-Analyse und LISREL-Analyse. In: Fahrmeier, L., Hamerle, A., Tutz, G. (Hrsg): Multivariate statistische Verfahren. Walter de Gruyter, Berlin, New York, 1996

[2] Busemeyer, J.R., Jones, L. E. (1983) Analysis of multiplicative combination rules when the causal variables are measured with error. *Psychological Bulletin*, 93 (3), 549 - 562

[3] Cliff, N. (1988) The Eigenvalues-Greater-Than-One-Rule and the reliability of components. *Psychological Bulletin*, 103, 276-279

[4] Christoffersson, A. (1975) Factor analyis of dichotomized variables. *Psychometrika*, 40, 5-32

[5] Davenport, M., Studdert-Kennedy, H. (1970) Use of orthogonal factors for selection of variables in a regression equation. *Applied Statistics*, 21, 324–333

[6] Eckart, C., Young, G. (1936) The approximation of one matrix by another of lower rank. *Psychometrika*, 1, 211–218

[7] Feller, W.: An introduction to probability theory and its applications, Vol. II, New York 1966

[8] Gabriel, K.R. (1971) The biplot graphic display of matrices with application to principal component analysis. *Biometrika*, 58, 453–467

[9] Gabriel, K.R. (1978) Least squares approximation of matrices by additive and multiplicative models. *Journal of the Royal Society B*, 40, 186-196

[10] Golub, G.H., Van Loan, C.F.: Matrix Computations. Baltimore 2013.

[11] Gould, J.: Der falsch vermessene Mensch. Frankfurt, 1988

[12] Harman, H.H.: Modern Factor Analysis. Chicago, 1967

[13] Hotelling, H. (1933) Analysis of a complex of statistical variables into principal components. *Journal Educational Psychology*, 24 (7), 498-520

[14] Gower, C., Hand, D.J.: Biplots. Chapman & Hill, London, 1996

[15] Guttman, L: (1956) Image theory for the structure of quantitative variates, *Psychometrika*, 18, 277–296

[16] Kelly, T.L. (1940) Comment on Wilson and Worcester's "Note on factor analysis". *Psychology*, 5, 117 – 120

[17] Kenny, D. A., Judd, C. M. (1984) Estimating the nonlinear interactive effects of latent variables. *Psychological Bulletin*, 96 (1), 201 – 210

[18] Magidson, J., Vermunt, J. K. (2002) Latent class models for clustering: a comparison wiht K-means. *Canadian Journal of Marketing Research*, 20, 37 – 44

[19] Muthé, B. O. (2002) Beyond SEM: General latent variable modelling. *Behaviormetrika*, 29 (1), 81 – 117

[20] Pearson, K. (1901) On lines and planes of closest fit to systems of points in space. *Phil. Mag.*, 6, 557–572

[21] Rist, F., Glöckner-Rist, A., Demmel, R. (2009) The Alcohol Use Disorders Identification Test revisited: Establishing its structure using nonlinear factor analysis and identifying subgroups of respondents using latent factor analysis. *Drug and Alcohol Dependence*, 100, 71 –82

[22] Spearman, C. (1904) General intelligence, objectively determined and measured. *American Journal of Psychology*, 15, 201 – 293

[23] Thurstone, L.L. (1931) Multiple Factor Analysis, *Psychological Review*, 38, 406 – 427

Index