

Zusammenfassung – Hauptachsentransformation

1. **Daten** Gegeben seien Messungen von n Variablen an m Fällen; \mathbf{x}_j sei m -dimensionaler Vektor mit den Messungen für die j -te Variable. Weiter sei $X = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n]$ die $(m \times n)$ -Matrix der Messwerte. Es wird vorausgesetzt, dass die Messungen pro Variable zentriert oder standardisiert sind. Gesucht sind latente Variable (latente "Dimensionen"), in Bezug auf die die Kovarianzen bzw. Korrelationen zwischen den gemessenen Variablen interpretiert werden können.

2. **Ansatz** Man macht den Ansatz

$$\mathbf{x}_j = t_{j1}\mathbf{L}_1 + \dots + t_{jn}\mathbf{L}_n = L\mathbf{t}_j, \quad j = 1, \dots, n \quad (1)$$

mit $L = [\mathbf{L}_1, \dots, \mathbf{L}_n]$; fasst man die t_{jk} zu einer $(n \times n)$ -Matrix $T = (t_{jk})$ zusammen, so ergibt sich

$$X = LT', \quad X' = TL'. \quad (2)$$

L ist eine $(m \times n)$ -Matrix, T ist eine $(n \times n)$ -Matrix.

Notation: Im Folgenden sind \mathbf{x}_j , \mathbf{L}_k , $j, k = 1, \dots, n$, die Spaltenvektoren von X bzw. L , und $\tilde{\mathbf{x}}_i$, $\tilde{\mathbf{L}}_i$, $i = 1, \dots, m$, sind die Zeilenvektoren von X bzw. L . Es wird vorausgesetzt, dass die Anfangspunkte aller Vektoren im Ursprung des jeweiligen Koordinatensystems liegen.

Nach (1) und (2) sind die \mathbf{x}_j Linearkombinationen der \mathbf{L}_k , und nach (2) sind die $\tilde{\mathbf{x}}_i$ Linearkombinationen der Spaltenvektoren von T :

$$\tilde{\mathbf{x}}_i = T\tilde{\mathbf{L}}_i \text{ bzw. } T'\tilde{\mathbf{x}}_i = \tilde{\mathbf{L}}_i, \quad i = 1, \dots, m \quad (3)$$

3. **Annahmen und Folgerungen**

A1. Die \mathbf{L}_k sind orthogonal,

A2. T definiert eine Rotation.

Bemerkungen: A1 bedeutet, dass $\mathbf{L}_j'\mathbf{L}_k = 0$ für $j \neq k$, so dass man annehmen kann, dass die latenten Variablen, die durch die \mathbf{L}_k repräsentiert werden, unkorreliert sind; sie können dann unabhängig voneinander interpretiert werden. A2 bedeutet, dass (i) $T'T = I$ die Einheitsmatrix ist, und dass (ii) die Längen der $\tilde{\mathbf{x}}_i$ und die Skalarprodukte zwischen diesen Vektoren durch die Transformation in die $\tilde{\mathbf{L}}_i$ -Vektoren nicht verändert werden, d.h. dass die Konfiguration der Punkte, die die Fälle repräsentieren, invariant bleibt. Dies erleichtert die Interpretation der latenten Variablen, auf die die Variablen abgebildet werden.

Folgerungen:

1. T ist die Matrix der Eigenvektoren von $X'X$,
2. Die Endpunkte der $\tilde{\mathbf{x}}_i$ liegen auf Ellipsoiden $\mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{x}}}$, ebenso liegen die Endpunkte der $\tilde{\mathbf{L}}_i$ auf Ellipsoiden $\mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{L}}}$, unter der Voraussetzung, dass die Anfangspunkte der Vektoren in den Ursprung des jeweiligen Koordinatensystems gelegt werden; die $\mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{x}}}$ haben identische Orientierungen, ebenso die $\mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{L}}}$, und es gilt

$$\mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{L}}} \xrightarrow{T} \mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{x}}}, \quad \mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{x}}} \xrightarrow{T'} \mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{L}}} \quad (4)$$

d.h. die $\mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{x}}}$ und $\mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{L}}}$ gehen durch Hauptachsentransformationen ineinander über;

3. Für die zu den Eigenvektoren T gehörigen Eigenwerte $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n$ gilt $\lambda_k = \|\mathbf{L}_k\|^2$, $1 \leq k \leq n$, und $\|\mathbf{L}_k\|^2 \leq \lambda_1$.

Beweis:

Zu 1: Die Annahme A1 impliziert

$$X'X = TL'LT' = T\Lambda T', \quad \Lambda = \text{diag}(\|\mathbf{L}_1\|^2, \dots, \|\mathbf{L}_n\|^2) \quad (5)$$

Nach A2 ist T eine Rotation, so dass $T'T = I$ die Einheitsmatrix, und die Multiplikation von rechts mit T führt zu

$$(X'X)T = T\Lambda, \quad \text{d.h. } (X'X)\mathbf{t}_k = \lambda_k \mathbf{t}_k, \quad 1 \leq k \leq n \quad (6)$$

und diese Beziehung bedeutet, dass die \mathbf{t}_k Eigenvektoren von $X'X$ und die $\lambda_k = \|\mathbf{L}_k\|^2$ die zugehörigen Eigenwerte von $X'X$ sind.

Zu 2: Nach Gleichung (3), also $X' = TL'$, rotiert T den Zeilenvektor $\tilde{\mathbf{L}}_i$ in den Zeilenvektor $\tilde{\mathbf{x}}_i$, und T' bewirkt die inverse Rotation. Die Endpunkte der $\tilde{\mathbf{x}}_i$ sind die Koordinaten des i -ten Falls in dem durch die gemessenen Variablen definierten Koordinatensystem, die Endpunkte der $\tilde{\mathbf{L}}_i$ sind die Koordinaten des i -ten Falls im durch die latenten Variablen definierten Koordinatensystem. Aus (3) folgt $\tilde{\mathbf{x}}'_i = \tilde{\mathbf{L}}_i T'$. Die Multiplikation von $\tilde{\mathbf{x}}'_i$ von rechts mit $(X'X)\tilde{\mathbf{x}}_i$ führt wegen (3) auf die Gleichung¹

$$\tilde{\mathbf{x}}'_i (X'X)\tilde{\mathbf{x}}_i = \tilde{\mathbf{L}}'_i \Lambda \tilde{\mathbf{L}}_i = k_i, \quad i = 1, \dots, m \quad (7)$$

k_i ist einfach der Wert von $\tilde{\mathbf{x}}'_i (X'X)\tilde{\mathbf{x}}_i$. Die Menge $\mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{x}}} = \{\tilde{\mathbf{x}}|\tilde{\mathbf{x}}'(X'X)\tilde{\mathbf{x}} = k_i \in \mathbb{R}\}$ definiert ein Ellipsoid, d.h. die Endpunkte der $\tilde{\mathbf{x}}$ liegen auf einem Ellipsoid, und analog dazu liegen die Endpunkte der $\tilde{\mathbf{L}}$ in $\mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{L}}} = \{\tilde{\mathbf{L}}|\tilde{\mathbf{L}}'\Lambda\tilde{\mathbf{L}} = k_i\}$ auf einem Ellipsoid. Die Ellipsoide $\mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{x}}}$ haben alle eine identische, durch $X'X$ definierte Orientierung, ebenso haben die $\mathcal{E}_{i,\tilde{\mathbf{L}}}$ eine identische, durch Λ definierte Orientierung. (3) besagt, dass T bzw. T' diese beiden Klassen

¹ $\tilde{\mathbf{x}}'_i (X'X)\tilde{\mathbf{x}}_i = \tilde{\mathbf{L}}'_i T' (X'X) T \tilde{\mathbf{L}}_i = \tilde{\mathbf{L}}'_i T' T \Lambda T' T \tilde{\mathbf{L}}_i = \tilde{\mathbf{L}}'_i \Lambda \tilde{\mathbf{L}}_i$

von Ellipsoiden ineinander überführt. Die Matrix T der Eigenvektoren von $X'X$ ist also eine Transformationsmatrix; T bzw. T' bewirkt eine Rotation der Punktekonfiguration der Fälle, oder der Hauptachsen der Ellipsoide, weshalb auch in Bezug auf T die Rede von einer *Hauptachsentransformation* ist.

Zu 3: Die Behauptung ergibt sich z.B. aus der Maximierung des Rayleigh-Koeffizienten

$$\frac{\tilde{\mathbf{x}}'(X'X)\tilde{\mathbf{x}}}{\tilde{\mathbf{x}}'\tilde{\mathbf{x}}} = \lambda, \quad (8)$$

(Vergl. Abschnitt über den Rayleigh-Quotienten und Bemerkungen dazu im Anhang des Skriptums *Kurze Einführung* . . . , die Spaltenvektoren $\tilde{\mathbf{x}}_i$ von X' (Zeilenvektoren von X) sind Spezialfälle der $\tilde{\mathbf{x}}$). \square

4. **Die Singularwertzerlegung einer Matrix** Betrachtet wird $X = LT'$. Es gilt $\|\mathbf{L}_k\| = \sqrt{\lambda_k} = \lambda_k^{1/2}$, die Längen der L -Vektoren sind die Wurzeln aus den Eigenwerten von L . Ein Vektor wird normiert, wenn man seine Komponenten durch die Länge des Vektors teilt. Deshalb erhält man

$$Q = L\Lambda^{-1/2}. \quad (9)$$

Denn die Multiplikation einer Matrix (hier L) mit einer Diagonalmatrix von rechts (hier $\Lambda^{-1/2}$) bedeutet stets die Skalierung der Längen der Spaltenvektoren von L , und die Spalten von Q sind die normierten Spaltenvektoren von L . Multipliziert man (9) von rechts mit $\Lambda^{1/2}$, so erhält man $Q\Lambda^{1/2} = L$. Setzt man diesen Ausdruck für L in $X = LT'$ ein, so erhält man die

Singularwertzerlegung (SVD = Singular Value Decomposition)²

$$X = Q\Lambda^{1/2}T' \quad (10)$$

Die $\sqrt{\lambda_k}$ heißen auch *Singularwerte*, die Spaltenvektoren von Q und T heißen auch *Links-* bzw. *Rechtssingularvektoren*.

Anmerkung: Im Zusammenhang mit dem Begriff des Rangs einer Matrix wurde der Satz bewiesen, dass eine Matrix X stets als Produkt $X = UV$ angeschrieben werden kann, wobei U ein $(m \times r)$ -Matrix und V eine $(r \times n)$ -Matrix ist, wenn X den Rang r hat. (10) ist ein Spezialfall dieser Beziehung, etwa mit $U = Q\Lambda^{1/2}$, $V = T'$. \square

Offenbar gelten die Beziehungen

$$X'X = T\Lambda^{1/2}Q'Q\Lambda^{1/2}T' = T\Lambda T' \quad (11)$$

$$XX' = Q\Lambda^{1/2}T'T\Lambda^{1/2}Q' = Q\Lambda Q'. \quad (12)$$

Die Bedeutung von (11) ist bereits klar: T ist die Matrix der Eigenvektoren von $X'X$, und Λ ist die zugehörige Diagonalmatrix der Eigenwerte. Die

²Die SVD kann für *beliebige* Matrizen X bestimmt werden!

Gleichung (12) ist suggestiv, allerdings ein wenig schlampig angeschrieben worden. Q ist offenbar die Matrix der Eigenvektoren von XX' . Aber XX' ist eine $(m \times m)$ -Matrix, so dass Q und Λ ebenfalls $(m \times m)$ -Matrizen sein müssen. (11) und (12) suggerieren nun, dass die Matrix Λ für $X'X$ und XX' identisch ist. Dies bedeutet zunächst einmal, dass die *von Null verschiedenen* Eigenwerte von $X'X$ und XX' identisch sind. Der Rang von XX' ist aber höchstens gleich n (da der Rang von X maximal gleich n ist). Sei der Rang gleich $r \leq n$. Dann sind aber nur r Eigenwerte von $X'X$ und XX' ungleich Null. Die Gleichung (12) ist also so zu verstehen, dass in Λ nur die von Null verschiedenen Eigenwerte erscheinen, und Q dementsprechend eine $(m \times r)$ -Matrix ist, in der also nur die zu Eigenwerten ungleich Null korrespondierenden Eigenvektoren von XX' stehen. Eine deshalb oft gewählte Schreibweise ist demnach

$$X'X = T_r \Lambda_r T_r' \quad (13)$$

$$XX' = Q_r \Lambda_r Q_r' \quad (14)$$

Der Index r signalisiert, dass nur die von Null verschiedenen Eigenwerte und die dazu korrespondierenden Eigenvektoren angeschrieben werden. Dementsprechend schreibt man auch

$$X = Q_r \Lambda_r^{1/2} T_r'. \quad (15)$$

Wegen der unvermeidlichen Mess- und Rundungsfehler findet man, dass numerisch $r = n$, und der Wert von r muß abgeschätzt werden (Scree-Test, Kaiser-Kriterium). Dann ist $Q_r \Lambda_r^{1/2} T_r' = X_r \neq X$. Nach dem Satz von Eckart & Young (1936) ist X_r eine Kleinste-Quadrate-Approximation an X .

5. Faktorwerte und Ladungen Es gibt nun zwei Möglichkeiten:

$$X = Q \Lambda^{1/2} T' = \begin{cases} LT', & L = Q \Lambda^{1/2} \\ QA', & A = T \Lambda^{1/2} \end{cases} \quad (16)$$

L ist die Matrix der *Faktorwerte*³ (allerdings wird gelegentlich auch Q als Matrix der Faktorwerte bezeichnet, – es herrscht keine Eindeutigkeit der Benennung, aber aus dem Kontext wird stets klar, was gemeint ist). A ist die Matrix der *Faktorladungen*.

Zur Bedeutung von A : Aus $X = QA'$ folgt wegen $Q'Q = I$ die Beziehung $Q'X = A'$, d.h.

$$A = X'Q. \quad (17)$$

Demnach gilt für das Element a_{jk}

$$a_{jk} = \mathbf{x}'_j \mathbf{q}_k, \quad (18)$$

³factor scores

d.h. a_{jk} (= Ladung der j -ten Variablen auf der k -ten Dimension) entspricht der Kovarianz bzw. der Korrelation zwischen der j -ten gemessenen Variablen und der k -ten latenten Dimension.

Es ist $X'X$ die Matrix der Kovarianzen bzw. Korrelationen. Die Zeilen von A entsprechen den Variablen, die Spalten den latenten Variablen ("Dimensionen"). Man findet

$$C = (c_{ij}) = X'X = AQ'QA' = AA', \quad (19)$$

d.h. die Kovarianzen bzw. Korrelationen ergeben sich als Skalarprodukte der Zeilenvektoren von A :

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^r a_{ik}a_{jk}, \quad (20)$$

wobei *rechnerisch* wieder $r = n$ ist; für zwei Variablen i und j wird über die latenten Dimensionen addiert. Gilt $c_{ij} = r_{ij}$, d.h. werden standardisierte Messwerte betrachtet, so hat man insbesondere für $i = j$

$$r_{jj} = \sum_{k=1}^r a_{jk}^2 = 1. \quad (21)$$

Die Quadratsumme der Ladungen einer Variablen über alle latenten Dimensionen ist gleich 1. Also:

1. Ist die Anzahl der latenten Dimensionen gleich 2, so liegen die Endpunkte der Vektoren, die die gemessenen Variablen repräsentieren, auf einem Kreis,
2. Ist die Anzahl der latenten Dimensionen gleich 3, so liegen die Endpunkte dieser Vektoren auf einer Kugel,
3. Ist die Anzahl der latenten Dimensionen größer als 3, so liegen die Endpunkte auf einer Hyperkugel.

Weiter ist

$$A'A = \Lambda^{1/2}T'T\Lambda^{1/2} = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r) \quad (22)$$

d.h. $A'A$ enthält die Skalarprodukte der Ladungen für verschiedene Dimensionen,

$$A'A = \mathbf{a}'_k \mathbf{a}_{k'} = \sum_{j=1}^n a_{jk}a_{jk'} = \begin{cases} 0, & k \neq k' \\ \lambda_k, & k = k' \end{cases} \quad (23)$$

Es wird über die Variablen summiert. Die Summe der Quadrate der Ladungen für die verschiedenen Variablen für die k -te Dimension ist gleich dem Eigenwert für diese Dimension.

6. **PCA** Die Bestimmung latenter Dimensionen auf der Basis der SVD $X = Q\Lambda^{1/2}T'$ beruht auf einer Hauptachsentransformation, englisch *Principal Component Analysis*, abgekürzt PCA.