

6.3 Неоднозначность факторного решения

Пусть $T(m \times m)$ - некоторая матрица ортогонального преобразования, то есть

$T^{-1}T = T^T T = E$. По-другому, такая матрица называется матрицей вращения.

Тогда $F' = FT$ является новой системой факторов, повернутой относительно старой системы F на некоторый угол с неизменным масштабом.

Рассмотрим вычисленные признаки $Y = FA^T$. Тогда в новой системе координат им будет соответствовать новая матрица факторных нагрузок A' и

тогда $Y = F'A'^T$. Из условия $FA^T = F'A'^T$ получим $FA^T = FTA'^T$, откуда

$A^T = TA'^T$ или $A' = AT$.

Как известно, ковариационная матрица вычисленных признаков есть

$\frac{1}{N} Y^T Y = AA^T$. Тогда в новом базисе мы должны получить то же самое

$$\frac{1}{N} Y^T Y = A'A'^T = AT(AT)^T = ATT^T A^T = AA^T.$$

Следовательно, $\mathbf{A}'\mathbf{A}'^T = \mathbf{A}\mathbf{A}^T = \bar{\mathbf{R}}$, где $\bar{\mathbf{R}}$ - редуцированная корреляционная матрица.

Таким образом, матрица факторных нагрузок может быть определена только с точностью до ортогонального преобразования. Геометрически это означает, что существует множество систем координат общих факторов. В связи с этим, в факторном анализе дополнительно возникает так называемая проблема вращения факторов. Поиск решения данной проблемы также представляет собой самостоятельную задачу, как, например, задача определения характерностей.

6.4. Метод главных факторов

Рассмотрим редуцированную корреляционную матрицу

$$\bar{\mathbf{R}} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^m \mathbf{a}_{1k}^2 & \boxtimes & \sum_{k=1}^m \mathbf{a}_{1k}\mathbf{a}_{nk} \\ \boxtimes & \boxtimes & \boxtimes \\ \sum_{k=1}^m \mathbf{a}_{nk}\mathbf{a}_{1k} & \boxtimes & \sum_{k=1}^m \mathbf{a}_{nk}^2 \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^m \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{1k}^2 & \boxtimes & \mathbf{a}_{1k}\mathbf{a}_{nk} \\ \boxtimes & \boxtimes & \boxtimes \\ \mathbf{a}_{nk}\mathbf{a}_{1k} & \boxtimes & \mathbf{a}_{nk}^2 \end{pmatrix} =$$

$$\sum_{k=1}^m \mathbf{A}_k = \sum_{k=1}^m \mathbf{a}_k \mathbf{a}_k^T,$$

где $\mathbf{a}_k^T = (\mathbf{a}_{1k}, \dots, \mathbf{a}_{nk})^T$ - столбец k в матрице \mathbf{A} факторных нагрузок.

Следовательно, редуцированная матрица $\bar{\mathbf{R}}$ образована совокупностью m вкладов \mathbf{A}_k общих факторов от факторных нагрузок \mathbf{a}_k . Тогда

$$\bar{\mathbf{R}} = \sum_{k=1}^m \mathbf{A}_k = \mathbf{A}_1 + \sum_{k=2}^m \mathbf{A}_k = \mathbf{A}_1 + \bar{\mathbf{R}}_1 \text{ или } \bar{\mathbf{R}}_1 = \bar{\mathbf{R}} - \mathbf{A}_1, \text{ где } \bar{\mathbf{R}}_1 - \text{ матрица остаточных}$$

корреляций после исключения вклада первого фактора. Аналогично

получим, что $\bar{\mathbf{R}}_k = \bar{\mathbf{R}} - \sum_{s=1}^k \mathbf{A}_s$ - матрица остаточных корреляций после

исключения вкладов k последовательных факторов.

Рассмотрим вклад k фактора в общности всех признаков $V_k = \sum_{j=1}^n a_{jk}^2$, который

является суммой квадратов элементов k столбца матрицы A факторных нагрузок. Очевидно, что

$$\sum_{k=1}^m V_k = \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n a_{jk}^2 = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^m a_{jk}^2 = \sum_{j=1}^n h_j^2 = n - \sum_{j=1}^n d_j^2$$

-суммарный вклад всех факторов соответствует совокупной общности признаков, то есть той доле их совокупной дисперсии, которую можно объяснить общими факторами.

Пусть факторы упорядочены по своим вкладам в общности признаков $V_1 > \dots > V_m$. Это требование естественно, так как наиболее важными являются факторы, обеспечивающие наибольшие вклады в дисперсии признаков. Найдем фактор F_1 из условия максимизации его вклада V_1 . Для этого требуется решить

задачу на условный экстремум вида $\max \sum_{j=1}^n a_{j1}^2$ при ограничениях $F_1^T F_1 = N$.

Так как

$$\sum_{j=1}^n a_{j1}^2 = \sum_{j=1}^n r^2(x_j, F_1) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^n (x_j^T F_1)^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^n (Y_j^T F_1)^2,$$

то получим задачу $\max \sum_{j=1}^n (Y_j^T F_1)^2$ при $F_1^T F_1 = N$. Составим функцию Лагранжа

$$L(F_1, \lambda_1) = \sum_{j=1}^n (Y_j^T F_1)^2 - \lambda_1 F_1^T F_1,$$

где искомый вектор $F_1 = (f_{11}, \dots, f_{N1})^T$ должен удовлетворять системе уравнений

$$\frac{\partial L}{\partial F_1} = 2 \sum_{j=1}^n (Y_j^T F_1) Y_j - 2\lambda_1 F_1 = 0.$$

Отсюда получим

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^n (Y_j^T F_1) Y_j = \frac{1}{N} \lambda_1 F_1 \quad \text{или} \quad \sum_{j=1}^n a_{j1} Y_j = \frac{1}{N} \lambda_1 F_1.$$

Построим систему из n уравнений, последовательно умножая данное уравнение

слева на $\frac{1}{N}Y_i^T, i=1, \dots, n$, и получим

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^n a_{j1} Y_i^T Y_j = \frac{1}{N} \lambda_1 \frac{1}{N} Y_i^T F_1, i=1, \dots, n.$$

Тогда получим $\sum_{j=1}^n a_{j1} r(Y_i, Y_j) = \frac{1}{N} \lambda_1 a_{i1}, i=1, \dots, n$. Запишем это в виде матричного

уравнения

$$\bar{\mathbf{R}} \mathbf{a}_1 = \frac{1}{N} \lambda_1 \mathbf{a}_1.$$

Согласно данному уравнению, искомый вектор факторных нагрузок \mathbf{a}_1 есть один из собственных векторов редуцированной корреляционной матрицы $\bar{\mathbf{R}}$, а $\frac{1}{N} \lambda_1$ - ее соответствующее собственное число

Найдем величину $\frac{1}{N}\lambda_1$. Снова рассмотрим уравнение

$$\sum_{j=1}^n a_{j1}Y_j = \frac{1}{N}\lambda_1 F_1$$

и, умножив его на F_1^T , получим

$$\sum_{j=1}^n a_{j1}F_1^T Y_j = \frac{1}{N}\lambda_1 F_1^T F_1 = \lambda_1 \quad \text{или} \quad N \sum_{j=1}^n a_{j1}^2 = N V_1 = \lambda_1.$$

Это означает, что максимум вклада V_1 первого фактора достигается, когда вектор факторных нагрузок \mathbf{a}_1 пропорционален собственному вектору редуцированной корреляционной матрицы $\bar{\mathbf{R}}$, соответствующему ее максимальному собственному числу $\bar{\lambda}_1 = \frac{1}{N}\lambda_1 = V_1$.

Пусть $\mathbf{A}(n \times n) = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ - матрица собственных векторов матрицы $\bar{\mathbf{R}}$, где $\alpha_i = (\alpha_{1i}, \dots, \alpha_{ni})^T$, $\|\alpha_i\| = 1$, $\bar{\Lambda}(n \times n)$ - диагональная матрица собственных чисел матрицы $\bar{\mathbf{R}}$, тогда $\bar{\mathbf{R}} = \mathbf{A}\bar{\Lambda} = \mathbf{A}\bar{\Lambda}\mathbf{A}^T$ и $\mathbf{A} = \bar{\Lambda}^{-1/2}\bar{\mathbf{R}}$. Отсюда $\mathbf{a}_1 = \bar{\Lambda}^{-1/2}\alpha_1 = \sqrt{\lambda_1} \alpha_1$. После нахождения вектора \mathbf{a}_1 нагрузок фактора F_1 можно построить матрицу остатков $\bar{\mathbf{R}}_1 = \bar{\mathbf{R}} - \mathbf{A}_1$ и для нее найти фактор F_2 из условия максимизации его вклада V_2 и так далее. Можно показать, что у матриц $\bar{\mathbf{R}}$ и $\bar{\mathbf{R}}_1$ совпадают все собственные числа, кроме первого. Для матрицы $\bar{\mathbf{R}}$ это собственное число является наибольшим, а для $\bar{\mathbf{R}}_1$ оно равно нулю. Следовательно, наибольшее собственное число $\bar{\mathbf{R}}_1$ равно второму собственному числу $\bar{\lambda}_2$ матрицы $\bar{\mathbf{R}}$ и, вообще, вектор факторных нагрузок \mathbf{a}_k определяется через k -ое по величине собственное число $\bar{\lambda}_k$ матрицы $\bar{\mathbf{R}}$.

Поэтому факторное решение по методу главных факторов состоит в следующем:

1. задать характеристики и определить редуцированную корреляционную матрицу $\bar{\mathbf{R}}$;
2. найти все ненулевые собственные числа $\bar{\lambda}_i$ матрицы $\bar{\mathbf{R}}$ и соответствующие собственные векторы $\alpha_i, i=1, \dots, n$;
3. определить факторные нагрузки $\mathbf{a}_k = \sqrt{\bar{\lambda}_k} \alpha_k$;
4. взять первые m факторов.

Заметим, что из решения задачи максимизации вклада V_k фактора F_k можно

формально оценить его значения на основе формулы $\sum_{j=1}^n a_{jk} Y_j = \frac{1}{N} \lambda_k F_k$, откуда

получим $F_k = \frac{N}{\lambda_k} \sum_{j=1}^n a_{jk} Y_j$ и окончательно:

$$F_k = \frac{N}{N \bar{\lambda}_k} \sum_{j=1}^n \sqrt{\bar{\lambda}_k} \alpha_{jk} Y_j = \frac{1}{\sqrt{\bar{\lambda}_k}} \sum_{j=1}^n \alpha_{jk} Y_j.$$

В матричном виде оценка значений k -го фактора имеет вид $F_k = \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \mathbf{Y} \boldsymbol{\alpha}_k$, а значения

всех n факторов имеют вид

$$\mathbf{F} = (F_1, \dots, F_n) = \mathbf{Y} \left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_1}} \boldsymbol{\alpha}_1, \dots, \frac{1}{\sqrt{\lambda_n}} \boldsymbol{\alpha}_n \right) = \mathbf{Y} \mathbf{A} \bar{\boldsymbol{\Lambda}}^{-1/2}.$$

Так как матрица вычисленных значений неизвестна, то часто для приближенной оценки значений факторов делают некорректное предположение $\mathbf{X} \approx \mathbf{Y}$. Тогда $\mathbf{F} = \mathbf{X} \mathbf{A} \bar{\boldsymbol{\Lambda}}^{-1/2}$, что с точностью до обозначений совпадает с решением по методу главных компонент, если не ограничиваться вычислением только m первых факторов и заменить $\bar{\mathbf{R}}$ на \mathbf{R} .

6.5. Метод центроидных факторов

Как было показано, согласно формуле вклада k -го фактора в общности признаков

$$V_k = \sum_{j=1}^n a_{jk}^2 = \sum_{j=1}^n r^2(X_j, F_k), \quad k = 1, \dots, m,$$

метод главных факторов дает точное решение задачи максимизации квадратов коэффициентов корреляции исходных признаков последовательно с каждым из общих факторов.

Геометрически решение такой задачи означает, что очередной общий фактор F_k ищется как вектор, ортогональный к F_1, \dots, F_{k-1} предыдущим факторам и ближайший к совокупности исходных признаков $X_j, j = 1, \dots, n$. Заметим, что близость по направлению двух векторов-признаков длины \sqrt{N} в N -мерном пространстве объектов оценивается модулем косинуса угла между ними, то есть модулем коэффициента их взаимной корреляции.

Поэтому близость вектора F_k , ортогонального предыдущим F_1, \dots, F_{k-1} векторам, к совокупности исходных признаков $X_j, j = 1, \dots, n$ можно также оценить величиной вклада

$$W_k = \sum_{j=1}^n |r(X_j, F_k)| = \sum_{j=1}^n |a_{jk}|, \quad k = 1, \dots, m.$$

Поставим, как и раньше, задачу последовательного выделения общих факторов, каждый из которых максимизирует свой вклад W_k в суммарную общность признаков.

Пусть, как и раньше, факторы упорядочены по своим вкладам $W_1 > \dots > W_m$. Найдем фактор F_1 из условия максимума вклада W_1 , решив задачу на условный экстремум вида

$$\max \sum_{j=1}^n |a_{j1}| \quad \text{при ограничениях} \quad F_1^T F_1 = N.$$

Так как

$$\sum_{j=1}^n |a_{j1}| = \sum_{j=1}^n |r(X_j, F_1)| = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^n |X_j^T F_1| = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^n |Y_j^T F_1|,$$

то получим задачу $\max \sum_{j=1}^n |Y_j^T F_1|$ при ограничениях $F_1^T F_1 = N$.

Составим функцию Лагранжа

$$L(F_1, \lambda_1) = \sum_{j=1}^n |Y_j^T F_1| - \lambda_1 F_1^T F_1,$$

где вектор $F_1 = (f_{11}, \dots, f_{N1})^T$ должен удовлетворять системе уравнений

$$\frac{\partial L}{\partial F_1} = \sum_{j=1}^n Y_j \operatorname{sign}(Y_j^T F_1) - 2\lambda_1 F_1 = 0.$$

Обозначим $\varphi_j = \operatorname{sign}(Y_j^T F_1)$, $j = 1, \dots, n$ и получим систему уравнений

$$(3.1) \quad \sum_{j=1}^n \varphi_j Y_j = 2\lambda_1 F_1.$$

Найдем λ_1 . Для этого транспонируем, умножим справа на F_1 и получим

$$\sum_{j=1}^n \varphi_j Y_j^T F_1 = 2\lambda_1 F_1^T F_1 \text{ и } \sum_{j=1}^n |Y_j^T F_1| = 2\lambda_1 N.$$

Отсюда $\lambda_1 = \frac{1}{2N} \sum_{j=1}^n |Y_j^T F_1| = \frac{1}{2} W_1$, что означает максимум вклада W_1 , достигнутый при

максимизации величины λ_1 .

Снова рассмотрим уравнение (3.1) и, возведя его в квадрат, получим

$$\left(\sum_{i=1}^n \varphi_i Y_i \right)^T \left(\sum_{j=1}^n \varphi_j Y_j \right) = 4\lambda_1^2 F_1^T F_1.$$

Преобразуем и получим $\sum_{i=1}^n \varphi_i Y_i^T \sum_{j=1}^n \varphi_j Y_j = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \varphi_i \varphi_j Y_i^T Y_j = 4\lambda_1^2 N$, откуда

$$(3.2) \quad \lambda_1^2 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \varphi_i \varphi_j \frac{1}{N} Y_i^T Y_j = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \varphi_i \varphi_j r(Y_i, Y_j) = \frac{1}{4} \Phi^T \bar{R} \Phi.$$

Следовательно, максимизация λ_1 означает максимизацию квадратичной формы $\boldsymbol{\varphi}^T \bar{\mathbf{R}} \boldsymbol{\varphi}$,

где $\boldsymbol{\varphi} = (\varphi_1, \dots, \varphi_n)^T$ - вектор коэффициентов, принимающих значения +1 и -1.

Рассмотрим алгоритм определения вектора знаков $\boldsymbol{\varphi}$, доставляющего максимум квадратичной форме $\boldsymbol{\varphi}^T \bar{\mathbf{R}} \boldsymbol{\varphi}$. Пусть задан некоторый начальный произвольный вектор знаков $\boldsymbol{\varphi}_0$. Пусть признаки перебираются циклически по одному и пусть проведено s циклов просмотра и построен вектор $\boldsymbol{\varphi}_s$. На $s+1$ цикле все компоненты вектора $\boldsymbol{\varphi}_s$

перестраиваются по формуле $\varphi_{i,s+1} = \text{sign} \left(\sum_{j=1}^n \varphi_{j,s} \bar{r}_{ij} \right)$, где $\bar{r}_{ij} = r(Y_i, Y_j)$ - элемент

редуцированной корреляционной матрицы $\bar{\mathbf{R}}$, стоящий на пересечении i строки и j столбца.

Алгоритм прекращает работу, когда $\boldsymbol{\varphi}_{s+1} = \boldsymbol{\varphi}_s$, то есть, когда ни одна компонента $\varphi_{i,s+1}$, $i = 1, \dots, n$ не изменила своего знака. Сразу отметим, что, в отличие от метода главных факторов, данный алгоритм обеспечивает лишь локальный максимум квадратичной формы $\boldsymbol{\varphi}^T \bar{\mathbf{R}} \boldsymbol{\varphi}$. Но его достоинство состоит в том, что он чрезвычайно прост.

Для обоснования правила пересчета вектора знаков $\boldsymbol{\varphi}$ найдем из (3.1) искомый фактор

$F_1 = \frac{1}{2\lambda_1} \sum_{j=1}^n \varphi_j Y_j$ и подставим сюда выражение для λ_1 из выражения (3.2):

$$(3.3) \quad F_1 = \frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{\varphi}^T \bar{\mathbf{R}} \boldsymbol{\varphi}}} \sum_{j=1}^n \varphi_j Y_j.$$

Так как $\varphi_j = \text{sign}(Y_j^T F_1)$, $j = 1, \dots, n$, то вычислим ковариацию фактора F_1 с вычисленным признаком Y_j и получим $\frac{1}{N} Y_j^T F_1 = \frac{1}{N} Y_j^T \sum_{p=1}^n \varphi_p Y_p / \sqrt{\boldsymbol{\varphi}^T \bar{\mathbf{R}} \boldsymbol{\varphi}}$. Так как

$\boldsymbol{\varphi}^T \bar{\mathbf{R}} \boldsymbol{\varphi} > 0$, то

$$\varphi_j = \text{sign}(Y_j^T F_1) = \text{sign}\left(\frac{1}{N} Y_j^T F_1\right) = \text{sign}\left(\sum_{p=1}^n \varphi_p \frac{1}{N} Y_j^T Y_p\right) = \text{sign}\left(\sum_{p=1}^n \varphi_p r(Y_j, Y_p)\right) =$$

$$\text{sign}\left(\sum_{p=1}^n \varphi_p \bar{r}_{jp}\right), \quad j = 1, \dots, n,$$

что дает выражение для алгоритма поиска максимума формы $\boldsymbol{\varphi}^T \bar{\mathbf{R}} \boldsymbol{\varphi}$.

Вектор факторных нагрузок первого выделенного фактора F_1 на исходные признаки $X_j, j = 1, \dots, n$ определяется, как известно, как вектор корреляций исходных признаков с

фактором $\mathbf{a}_1 = \frac{1}{N} \mathbf{X}^T F_1$. Так как $\frac{1}{N} \mathbf{X}^T F_1 = \frac{1}{N} \mathbf{Y}^T F_1$, то факторные нагрузки определим как

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{N} \mathbf{Y}^T F_1 = \frac{1}{N} \mathbf{Y}^T \frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{\Phi}^T \mathbf{R} \boldsymbol{\Phi}}} \sum_{j=1}^n \varphi_j Y_j, \text{ где } \varphi_j = \text{sign} \left(\sum_{p=1}^n \varphi_p \bar{r}_{jp} \right).$$

Тогда, с учетом (3.1), (3.2) и $W_1 = 2\lambda_1$, получим

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{\Phi}^T \mathbf{R} \boldsymbol{\Phi}}} \sum_{j=1}^n \varphi_j \frac{1}{N} \mathbf{Y}^T Y_j = \frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{\Phi}^T \mathbf{R} \boldsymbol{\Phi}}} \sum_{j=1}^n \varphi_j \begin{pmatrix} \bar{r}_{1j} \\ \vdots \\ \bar{r}_{nj} \end{pmatrix} =$$

$$\frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{\Phi}^T \mathbf{R} \boldsymbol{\Phi}}} \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^n \varphi_j \bar{r}_{1j} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^n \varphi_j \bar{r}_{nj} \end{pmatrix} = \frac{1}{W_1} \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^n \varphi_j \bar{r}_{1j} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^n \varphi_j \bar{r}_{nj} \end{pmatrix}.$$

Следовательно, факторные нагрузки первого фактора есть

$$a_{i1} = \frac{1}{W_1} \sum_{j=1}^n \varphi_j \bar{r}_{ij}, \quad i = 1, \dots, n, \quad \text{где } W_1 = \sqrt{\boldsymbol{\varphi}^T \bar{\mathbf{R}} \boldsymbol{\varphi}}.$$

Формально оценку значений фактора F_1 можно получить из выражения (3.3). Но, так как вычисленные векторы Y_j неизвестны, то, сделав некорректное предположение $\mathbf{X} \approx \mathbf{Y}$, можно приближенно оценить фактор:

$$F_1 = \frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{\varphi}^T \bar{\mathbf{R}} \boldsymbol{\varphi}}} \sum_{j=1}^n \varphi_j X_j, \quad \text{где } \varphi_j = \text{sign} \left(\sum_{p=1}^n \varphi_p \bar{r}_{jp} \right).$$

Вектору F_1 можно придать следующий геометрический смысл. Вектор F_1 является линейной комбинацией векторов признаков со знаками. Если $\varphi_j = +1$, то вектор X_j надо оставить без изменения. Если $\varphi_j = -1$, то вектор X_j надо заменить на противоположный такой же длины. Затем все векторы признаков сложить, а в качестве фактора F_1 взять вектор длины \sqrt{N} , совпадающий по направлению с этой суммой. Такой вектор является вектором центра тяжести концов суммируемых векторов признаков. Поэтому такой фактор и называется центроидным.

После нахождения вектора \mathbf{a}_1 факторных нагрузок фактора F_1 строится матрица остатков $\bar{\mathbf{R}}_1 = \bar{\mathbf{R}} - \mathbf{A}_1$ и для нее аналогично находится фактор F_2 из условия максимизации его вклада W_2 и так далее. Вычисления заканчиваются после того, как было получено m факторов.