Reduced-Rank-Regression

Seminar Multivariate Statistik, Regression und Klassifikation

Daniel Herbst

10. Mai 2021

Gliederung

Ausgangssituation:

$$\mathbf{X} := (X_1, \ldots, X_r)^\top \quad \text{und} \quad \mathbf{Y} := (Y_1, \ldots, Y_s)^\top$$

mit gemeinsamer Verteilung $\mathbb{P}^{(\mathbf{X},\mathbf{Y})}$, $\mathbb{P}^{\mathbf{X}} \ll \lambda^r$, $\mathbb{P}^{\mathbf{Y}} \ll \lambda^s$ sowie $r, s \in \mathbb{N}$ mit $s \leq r$,

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} := \mathbb{E}\mathbf{X}, \quad \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} := \mathbb{E}\mathbf{Y} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} \Sigma_{\mathbf{XX}} & \Sigma_{\mathbf{XY}} \\ \Sigma_{\mathbf{YX}} & \Sigma_{\mathbf{YY}} \end{pmatrix} := \boldsymbol{\Sigma}\left(\begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix}\right).$$

Das klassische lineare Regressionsmodell

Klassisches multivariates Regressionsmodell mit zufälliger Inputvariable:

$$\mathbf{Y} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X} + \mathcal{E},$$

wobei $\mathbf{X} := (X_1, \ldots, X_r)^\top$ und $\mathbf{Y} := (Y_1, \ldots, Y_s)^\top$, $s \leq r$.

- $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^s$ und $\boldsymbol{\Theta} \in \mathbb{R}^{s \times r}$ unbekannte Parameter
- $\mathcal{E}$ ein (nicht beobachtbarer) s-dimensionaler zufälliger Fehler mit

$$\mathbb{E}\mathcal{E} = 0 \quad \text{und} \quad \mathbf{X} \text{ und } \mathcal{E} \text{ unkorreliert.}$$

Das klassische lineare Regressionsmodell

Möchten optimale $\boldsymbol{\mu}$ und $\boldsymbol{\Theta}$ finden in dem Sinne, dass

$$W(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Theta}) := \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})^\top] \in \mathbb{R}^{s \times s}$$

„klein“ wird.

Definition (Löwner-Halbordnung)

Sei $V := \{\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{s \times s} \mid \mathbf{A}^\top = \mathbf{A}\}$ der Raum der symmetrischen $s \times s$-Matrizen.

$$\forall\, \mathbf{A}, \mathbf{B} \in V : \ \mathbf{A} \leq_L \mathbf{B} \ :\Leftrightarrow \ \mathbf{B} - \mathbf{A} \textit{ positiv semidefinit.}$$

Es lässt sich leicht nachprüfen, dass diese Relation eine Halbordnung auf V, die sogenannte Löwner-Halbordnung, definiert.

Löwner-Halbordnung: $\mathbf{A} \leq_L \mathbf{B} \;:\Leftrightarrow\; \mathbf{B} - \mathbf{A}$ pos. semidef.

Wollen: $W(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Theta}) := \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})^\top] \;\rightarrow\;$ min

Falls $\lambda_j(\mathbf{A})$ der j-größte Eigenwert von $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{s \times s}$, dann

$$\mathbf{A} \leq_L \mathbf{B} \implies \lambda_j(\mathbf{A}) \leq \lambda_j(\mathbf{B}), \quad j = 1, \dots, s.$$

Also:

$$\operatorname{tr}(W(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Theta})) = \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})^\top(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})],$$

wird ebenso minimiert.

$$W(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Theta}) := \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})^\top], \quad \mathbf{A} \leq_L \mathbf{B} \;:\Leftrightarrow\; \mathbf{B} - \mathbf{A} \text{ pos. semidef.}$$

Satz

In der Situation von vorher ist

$$\operatorname*{argmin}_{(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Theta})} W(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Theta}) = (\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\Theta}_{\text{min}}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}) =: (\boldsymbol{\mu}_{\text{min}}, \boldsymbol{\Theta}_{\text{min}}) \quad \textit{(bezüglich } \leq_L \textit{)},$$

$$W(\boldsymbol{\mu}_{\text{min}}, \boldsymbol{\Theta}_{\text{min}}) = \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XY}}.$$

Ferner gilt für $\mathcal{E} := \mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu}_{\text{min}} - \boldsymbol{\Theta}_{\text{min}}\mathbf{X}$, *dass*

$$\mathbb{E}\mathcal{E} = \mathbf{0} \quad \textit{und} \quad \mathbb{E}[\mathcal{E}(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}})^\top] = \mathbf{0}.$$

Beweis. Mit $\mathbf{X}_c := \mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}$, $\mathbf{Y}_c := \mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}}$ gilt für alle $\boldsymbol{\Theta} \in \mathbb{R}^{s\times r}$, $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^s$:

$$\begin{aligned}
W(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Theta}) &= \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})^\top] \\
&= \mathbb{E}[(\mathbf{Y}_c - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X}_c + (\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} - \boldsymbol{\mu}))(\mathbf{Y}_c - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X}_c + (\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} - \boldsymbol{\mu}))^\top] \\
&= \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Theta}^\top - \boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XY}} + \boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}\boldsymbol{\Theta}^\top \\
&\qquad + (\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} - \boldsymbol{\mu})^\top \\
&= \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XY}} \\
&\qquad + \underbrace{(\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1/2} - \boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{1/2})(\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1/2} - \boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{1/2})^\top}_{=:A(\boldsymbol{\Theta}) \quad \text{positiv semidefinit}} \\
&\qquad + \underbrace{(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} - \boldsymbol{\mu})^\top}_{=:B(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Theta}) \quad \text{positiv semidefinit}} \\
&\geq \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XY}}.
\end{aligned}$$

$$W(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Theta}) = \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XY}} + A(\boldsymbol{\Theta}) + B(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Theta})$$

$\Longrightarrow$ $W(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Theta})$ minimal für $A(\boldsymbol{\Theta}) = B(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Theta}) = \mathbf{0}$, was der Fall ist, wenn

$$\boldsymbol{\Theta} = \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1} =: \boldsymbol{\Theta}_{\text{min}} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\Theta}_{\text{min}}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} =: \boldsymbol{\mu}_{\text{min}}.$$

Man erhält nun

$$\begin{aligned}
\mathcal{E} &= \mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu}_{\text{min}} - \boldsymbol{\Theta}_{\text{min}}\mathbf{X} \\
&= \mathbf{Y} - (\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - (\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1})\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}) - (\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1})\mathbf{X} \\
&= \mathbf{Y}_c - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}\mathbf{X}_c
\end{aligned}$$

und es gilt offensichtlich $\mathbb{E}\mathcal{E} = \mathbf{0}$ sowie

$$\mathbb{E}[\mathcal{E}\mathbf{X}_c^\top] = \mathbb{E}[(\mathbf{Y}_c - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}\mathbf{X}_c)\mathbf{X}_c^\top] = \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}} = \mathbf{0}.$$

Das Reduced-Rank-Regressionsmodell

Nun ein etwas anderes Regressionsmodell:

$$\mathbf{Y} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{CX} + \mathcal{E},$$

wobei

- $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^s$ und $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{s \times r}$ unbekannte Parameter
- $\mathcal{E}$ nicht beobachtbarer, zufälliger Fehler mit $\mathbb{E}\mathcal{E} = 0$ und Kovarianzmatrix $\Sigma_{\mathcal{E}\mathcal{E}}$
- $\mathbf{X}$ und $\mathcal{E}$ unkorreliert
- es gibt ein $t \in \{0, \ldots, s\}$ mit $\operatorname{rk} \mathbf{C} \leq t \leq s$.

In diesem Fall gibt es Matrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{s \times t}$ und $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{t \times r}$ mit $\mathbf{C} = \mathbf{AB}$, d.h. das Modell lässt sich auch schreiben als

$$\mathbf{Y} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{ABX} + \mathcal{E}.$$

$$\mathbf{Y} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{C}\mathbf{X} + \mathcal{E}, \qquad \mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{B} \text{ mit } \mathbf{C} \in \mathbb{R}^{s\times r}, \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{s\times t}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{t\times r}$$

$$W(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Theta}) := \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\Theta}\mathbf{X})^\top], \quad \mathbf{A} \leq_L \mathbf{B} \;:\Leftrightarrow\; \mathbf{B} - \mathbf{A} \text{ pos. semidef.}$$

Möchten auch hier wieder $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^s$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{s\times t}$ und $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{t\times r}$ finden, die $\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{ABX}$ auf eine gewisse Art und Weise minimieren, gehen nun aber etwas anders vor:
$\boldsymbol{\Gamma} \in \mathbb{R}^{s\times s}$ symmetrisch positiv definite Gewichtsmatrix, minimiere

$$W_{t,\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}, \mathbf{B}) := \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{ABX})^\top \boldsymbol{\Gamma} (\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{ABX})]$$

über $\boldsymbol{\mu}$, $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$.

Satz

Seien $\mathbf{X}$ *und* $\mathbf{Y}$ *wie vorher und* $0 \leq t \leq s$*. Dann ist*

$$\operatorname{argmin}_{(\boldsymbol{\mu},\mathbf{A},\mathbf{B})} W_{t,\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\mu},\mathbf{A},\mathbf{B}) = (\boldsymbol{\mu}_{\min}^{(t)}, \mathbf{A}_{\min}^{(t)}, \mathbf{B}_{\min}^{(t)}) \quad \textit{mit}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{\min}^{(t)} &:= \boldsymbol{\Gamma}^{-1/2}\mathbf{U}_t && \in \mathbb{R}^{s\times t} \\ \mathbf{B}_{\min}^{(t)} &:= \mathbf{U}_t^\top \boldsymbol{\Gamma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1} && \in \mathbb{R}^{t\times r} \\ \boldsymbol{\mu}_{\min}^{(t)} &:= \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \mathbf{A}_{\min}^{(t)}\mathbf{B}_{\min}^{(t)}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} && \in \mathbb{R}^{s}, \end{aligned}$$

wobei $\mathbf{U}_t := (\mathbf{u}_1,\dots,\mathbf{u}_t) \in \mathbb{R}^{s\times t}$ *und* $\mathbf{u}_1,\dots,\mathbf{u}_t$ *orthonormale Eigenvektoren zu den Eigenwerten* $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_t \geq 0$ *von* $\boldsymbol{\Gamma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XY}}\boldsymbol{\Gamma}^{1/2}$ *seien. Ferner gilt*

$$W_{t,\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\mu}_{\min}^{(t)}, \mathbf{A}_{\min}^{(t)}, \mathbf{B}_{\min}^{(t)}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}})\operatorname{tr}(\boldsymbol{\Gamma}) - \sum_{i=1}^{t}\lambda_i.$$

$$\text{Wollen: } W_{t,\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C}) := \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{CX})^\top \boldsymbol{\Gamma} (\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{CX})] \;\to\; \min$$

Beweis. Für $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^s$, $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{s \times r}$ und $\mathbf{X}_c := \mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}_\mathbf{X}$, $\mathbf{Y}_c := \mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu}_\mathbf{Y}$ gilt:

$$\begin{aligned}
W_{t,\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C}) &= \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{CX})^\top \boldsymbol{\Gamma} (\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{CX})] \\
&= \mathbb{E}[(\mathbf{Y}_c - \mathbf{CX}_c + (\boldsymbol{\mu}_\mathbf{Y} - \mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}))^\top \boldsymbol{\Gamma} (\mathbf{Y}_c - \mathbf{CX}_c + (\boldsymbol{\mu}_\mathbf{Y} - \mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu}))] \\
&= \mathbb{E}[(\mathbf{Y}_c - \mathbf{CX}_c)^\top \boldsymbol{\Gamma} (\mathbf{Y}_c - \mathbf{CX}_c)] \\
&\qquad + \underbrace{(\boldsymbol{\mu}_\mathbf{Y} - \mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Gamma} (\boldsymbol{\mu}_\mathbf{Y} - \mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})}_{\geq 0 \quad \text{(da } \boldsymbol{\Gamma} \text{ symmetrisch positiv definit)}}
\end{aligned}$$

Wollen: $\mathbb{E}[(\mathbf{Y}_c - \mathbf{C}\mathbf{X}_c)^\top \boldsymbol{\Gamma}(\mathbf{Y}_c - \mathbf{C}\mathbf{X}_c)] \;\to\; \min$

Mit $\boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{XX}} := \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}$, $\boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{YY}} := \boldsymbol{\Gamma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}}\boldsymbol{\Gamma}^{1/2}$, $\boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{YX}} := \boldsymbol{\Gamma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}$, $\boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{XY}} := \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XY}}\boldsymbol{\Gamma}^{1/2}$ und $\mathbf{C}^* := \boldsymbol{\Gamma}^{1/2}\mathbf{C}$ ist

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}[(\mathbf{Y}_c - \mathbf{C}\mathbf{X}_c)^\top \boldsymbol{\Gamma}(\mathbf{Y}_c - \mathbf{C}\mathbf{X}_c)] &= \mathbb{E}[\mathbf{Y}_c^\top \boldsymbol{\Gamma}\mathbf{Y}_c - \mathbf{X}_c^\top \mathbf{C}^\top \boldsymbol{\Gamma}\mathbf{Y}_c - \mathbf{Y}_c^\top \boldsymbol{\Gamma}\mathbf{C}\mathbf{X}_c + \mathbf{X}_c^\top \mathbf{C}^\top \boldsymbol{\Gamma}\mathbf{C}\mathbf{X}_c] \\
&= \operatorname{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{YY}} - \mathbf{C}^*\boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{XY}} - \boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{YX}}\mathbf{C}^{*\top} + \mathbf{C}^*\boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{XX}}\mathbf{C}^{*\top}) \\
&= \operatorname{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{YY}} - \boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}^{*-1}_{\mathbf{XX}}\boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{XY}}) \\
&\quad + \operatorname{tr}\big((\mathbf{C}^*\boldsymbol{\Sigma}^{*1/2}_{\mathbf{XX}} - \boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}^{*-1/2}_{\mathbf{XX}}) \\
&\qquad\quad \cdot (\mathbf{C}^*\boldsymbol{\Sigma}^{*1/2}_{\mathbf{XX}} - \boldsymbol{\Sigma}^*_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}^{*-1/2}_{\mathbf{XX}})^\top \big).
\end{aligned}
$$

$$\mathbb{E}[(\mathbf{Y}_c - \mathbf{C}\mathbf{X}_c)^\top \Gamma (\mathbf{Y}_c - \mathbf{C}\mathbf{X}_c)] = \text{Konst.} + \operatorname{tr}\Big((\mathbf{C}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*1/2} - \Sigma_{\mathbf{YX}}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*-1/2}) \cdot (\mathbf{C}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*1/2} - \Sigma_{\mathbf{YX}}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*-1/2})^\top \Big)$$

Lemma (Satz von Eckart-Young)

Seien $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $b := \operatorname{rk} \mathbf{B} \leq \operatorname{rk} \mathbf{A} =: r$, und sei $\lambda_j(\mathbf{C})$ für eine reelle symmetrische Matrix $\mathbf{C}$ deren j-größter Eigenwert. Dann gilt:

$$\lambda_j((\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} - \mathbf{B})^\top) \geq \lambda_{j+b}(\mathbf{A}\mathbf{A}^\top)$$

mit Gleichheit für

$$\mathbf{A}_b := \sum_{i=1}^{b} \lambda_i^{1/2} \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top,$$

wobei $\lambda_i := \lambda_i(\mathbf{A}\mathbf{A}^\top)$ und $\mathbf{u}_i$ bzw. $\mathbf{v}_i$ jeweils orthonormale Eigenvektoren von $\mathbf{A}\mathbf{A}^\top$ bzw. $\mathbf{A}^\top\mathbf{A}$ zu λ_i seien.

$$\mathbb{E}[(\mathbf{Y}_c - \mathbf{C}\mathbf{X}_c)^\top \Gamma (\mathbf{Y}_c - \mathbf{C}\mathbf{X}_c)] = \text{Konst.} + \operatorname{tr}\Big((\mathbf{C}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*1/2} - \Sigma_{\mathbf{YX}}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*-1/2}) \cdot (\mathbf{C}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*1/2} - \Sigma_{\mathbf{YX}}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*-1/2})^\top \Big)$$

$k := \operatorname{rk} \Sigma_{\mathbf{YX}} = \operatorname{rk} \Sigma_{\mathbf{YX}}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*-1/2}$ und seien $\mathbf{u}_i$ orthonormale Eigenvektoren zu λ_i von

$$(\Sigma_{\mathbf{YX}}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*-1/2})(\Sigma_{\mathbf{YX}}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*-1/2})^\top = \Sigma_{\mathbf{YX}}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*-1} \Sigma_{\mathbf{XY}}^* = \Gamma^{1/2} \Sigma_{\mathbf{YX}} \Sigma_{\mathbf{XX}}^{-1} \Sigma_{\mathbf{XY}} \Gamma^{1/2}, \quad 1 \leq i \leq s,$$

$$\mathbf{v}_i := \lambda_i^{-1/2} \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*-1/2} \Sigma_{\mathbf{XY}}^* \mathbf{u}_i = \lambda_i^{-1/2} \Sigma_{\mathbf{XX}}^{-1/2} \Sigma_{\mathbf{XY}} \Gamma^{1/2} \mathbf{u}_i, \quad 1 \leq i \leq k$$

$\xRightarrow{\text{Eckart-Young}}$ Zweiter Term von $(*)$ minimal für

$$\mathbf{C}^* \Sigma_{\mathbf{XX}}^{*1/2} = \Gamma^{1/2} \mathbf{C} \Sigma_{\mathbf{XX}}^{1/2} = \sum_{i=1}^{\min\{k,t\}} \lambda_i^{1/2} \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \quad \text{also}$$

$$\mathbf{C}_{\min}^{(t)} := \Gamma^{-1/2} \left(\sum_{i=1}^{\min\{k,t\}} \lambda_i^{1/2} \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \right) \Sigma_{\mathbf{XX}}^{-1/2} = \Gamma^{-1/2} \left(\sum_{i=1}^{t} \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \right) \Gamma^{1/2} \Sigma_{\mathbf{YX}} \Sigma_{\mathbf{XX}}^{-1}.$$

$$
\begin{aligned}
W_{t,\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C}) := \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{C}\mathbf{X})^\top \boldsymbol{\Gamma} (\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{C}\mathbf{X})] \\
= \text{Konst.} + \operatorname{tr}\Big((\mathbf{C}^* \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{*1/2} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}^* \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{*-1/2}) \\
\cdot (\mathbf{C}^* \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{*1/2} - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}^* \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{*-1/2})^\top \Big) \\
+ (\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} - \boldsymbol{\mu})^\top \boldsymbol{\Gamma} (\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \mathbf{C}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} - \boldsymbol{\mu})
\end{aligned}
$$

$$
\mathbf{C}_{\text{min}}^{(t)} = \boldsymbol{\Gamma}^{-1/2} \left(\textstyle\sum_{i=1}^{t} \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \right) \boldsymbol{\Gamma}^{1/2} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}
$$

$\implies W_{t,\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ minimal für

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}_{\text{min}}^{(t)} &= \boldsymbol{\Gamma}^{-1/2} \mathbf{U}_t & \in \mathbb{R}^{s \times t} \\
\mathbf{B}_{\text{min}}^{(t)} &= \mathbf{U}_t^\top \boldsymbol{\Gamma}^{1/2} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1} & \in \mathbb{R}^{t \times r} \\
\boldsymbol{\mu}_{\text{min}}^{(t)} &= \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} - \mathbf{A}_{\text{min}}^{(t)} \mathbf{B}_{\text{min}}^{(t)} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}} & \in \mathbb{R}^{s},
\end{aligned}
$$

wobei $\mathbf{U}_t := (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_t) \in \mathbb{R}^{s \times t}$.

Spezialfälle der Reduced-Rank-Regression

Haben soeben $W_{t,\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C}) := \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{C}\mathbf{X})^\top \boldsymbol{\Gamma}(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{C}\mathbf{X})]$ minimiert

Spezielle Wahlen von $\boldsymbol{\Gamma}$ und $\mathbf{X}, \mathbf{Y}$:

- $\mathbf{X} = \mathbf{Y}$ und $\boldsymbol{\Gamma} = \mathbf{I}_s$: *Hauptkomponentenanalyse (principal component analysis, PCA)* (Vortrag 6).
- $\boldsymbol{\Gamma} = \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YY}}^{-1}$: *kanonische Korrelationsanalyse* (Vortrag 7).
- Setup der kanonischen Korrelationsanalyse für einen $\{0, 1\}$-wertigen Vektor $\mathbf{Y}$, der Gruppenzugehörigkeiten modelliert: *lineare Diskriminanzanalyse* (Vortrag 8).

Stichprobenschätzung bei der Reduced-Rank-Regression

Zur Minimierung benötigt: $\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{X}}, \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}}$ und $\Sigma_{\mathbf{XX}}, \Sigma_{\mathbf{XY}}, \Sigma_{\mathbf{YX}}, \Sigma_{\mathbf{YY}}$ - typischerweise unbekannt. I.d.R. Stichprobe gegeben:

$$\mathcal{D} := \{(\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_j) \mid 1 \leq i \leq n\},$$

unabhängige Realisierungen von r- bzw. s-dimensionalen Zufallsvektoren $\mathbf{X}$ bzw. $\mathbf{Y}$. Arbeiten stattdessen einfach mit den entsprechenden empirischen Größen:

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathbf{X}} := \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \mathbf{x}_j = \bar{\mathbf{x}}_n, \quad \widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathbf{Y}} := \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} \mathbf{y}_j = \bar{\mathbf{y}}_n$$

$$\mathbf{x}_{cj} := \mathbf{x}_j - \bar{\mathbf{x}}_n, \quad \mathbf{y}_{cj} := \mathbf{y}_j - \bar{\mathbf{y}}_n, \quad \mathcal{X}_c := (\mathbf{x}_{c1}, \ldots, \mathbf{x}_{cn}), \quad \mathcal{Y}_c := (\mathbf{y}_{c1}, \ldots, \mathbf{y}_{cn})$$

$$\widehat{\Sigma}_{\mathbf{XX}} := \frac{1}{n}\mathcal{X}_c\mathcal{X}_c^\top \in \mathbb{R}^{r\times r}, \quad \widehat{\Sigma}_{\mathbf{YY}} := \frac{1}{n}\mathcal{Y}_c\mathcal{Y}_c^\top \in \mathbb{R}^{s\times s},$$

$$\widehat{\Sigma}_{\mathbf{YX}} := \frac{1}{n}\mathcal{Y}_c\mathcal{X}_c^\top = \widehat{\Sigma}_{\mathbf{XY}}^\top \in \mathbb{R}^{s\times r}.$$

Stichprobenschätzung bei der Reduced-Rank-Regression

$$\widehat{\mathbf{C}}_{\text{min}}^{(t)} := \boldsymbol{\Gamma}^{-1/2}\left(\sum_{i=1}^{t} \widehat{\mathbf{u}}_i \widehat{\mathbf{u}}_i^{\top}\right)\boldsymbol{\Gamma}^{1/2}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{YX}}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{XX}}^{-1},$$

wobei $\widehat{\mathbf{u}}_i$, $1 \leq i \leq t$ orthonormale Eigenvektoren zu den je i-größten Eigenwerten λ_i, $1 \leq i \leq t$ von $\boldsymbol{\Gamma}^{1/2}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{YX}}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{XX}}^{-1}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{XY}}\boldsymbol{\Gamma}^{1/2}$ seien. $\boldsymbol{\Theta}_{\text{min}}$ wird analog durch

$$\widehat{\boldsymbol{\Theta}}_{\text{min}} := \widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{YX}}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{XX}}^{-1}$$

geschätzt.

Simulationsbeispiel

Erzeugen je $n = 1000$ unabhängige Realisierungen

$$\mathbf{x}_j \sim \mathcal{N}_3(\mathbf{0},\ 0.3 \cdot \mathbf{I}_3), \quad \varepsilon_j \sim \mathcal{N}_3(\mathbf{0},\ 0.15 \cdot \mathbf{I}_3), \quad 1 \leq j \leq n,$$

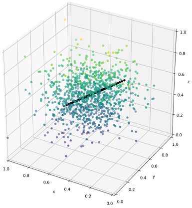
$$\mathbf{C} := \frac{1}{4} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 3}, \quad \boldsymbol{\mu} := \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y}_j := \boldsymbol{\mu} + \mathbf{C}\mathbf{x}_j + \varepsilon_j$$

Stichprobe:

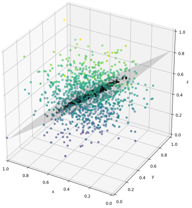
$$\mathcal{D} := \{(\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_j) \mid 1 \leq i \leq n\},$$

verwenden $\boldsymbol{\Gamma} := \mathbf{I}_s$ bei der Reduced-Rank-Regression.

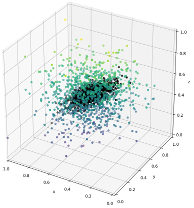
$$\implies \quad \hat{\boldsymbol{\mu}}^{(3)}_{\min} \approx \begin{pmatrix} 0.504 \\ 0.490 \\ 0.499 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{C}}^{(3)}_{\min} \approx \begin{pmatrix} 0.246 & -0.018 & 0.241 \\ -0.018 & 0.212 & 0.007 \\ -0.017 & -0.017 & -0.279 \end{pmatrix}$$



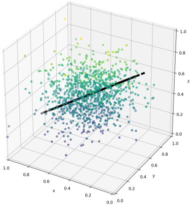
(a) $\mathbf{x}, \mathbf{y};\ t = 1$



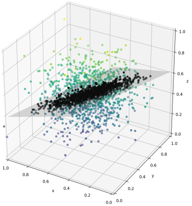
(b) $\mathbf{x}, \mathbf{y};\ t = 2$



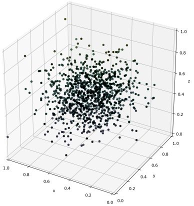
(c) $\mathbf{x}, \mathbf{y};\ t = 3$



(d) $\mathbf{y}, \mathbf{y};\ t = 1$



(e) $\mathbf{y}, \mathbf{y};\ t = 2$



(f) $\mathbf{y}, \mathbf{y};\ t = 3$

Effektive Dimension der Regression

Reduced-Rank-Regressionsmodell: $\mathbf{Y} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{CX} + \mathcal{E}, \quad \operatorname{rk} \mathbf{C} \leq t$

Haben zuvor $W_{t,\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C}) := \mathbb{E}[(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{CX})^\top \boldsymbol{\Gamma}(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu} - \mathbf{CX})]$ minimiert

Wie wählt man die *effektive Dimension* t bei der Reduced-Rank-Regression geeignet?
Vergrößert man den Rang von $\mathbf{C}$ von $t = t_0$ zu $t = t_1, \ t_0 < t_1$, so

$$W_{t_0,\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\mu}_{\text{min}}^{(t_0)}, \mathbf{A}_{\text{min}}^{(t_0)}, \mathbf{B}_{\text{min}}^{(t_0)}) - W_{t_1,\boldsymbol{\Gamma}}(\boldsymbol{\mu}_{\text{min}}^{(t_1)}, \mathbf{A}_{\text{min}}^{(t_1)}, \mathbf{B}_{\text{min}}^{(t_1)}) = \sum_{i=t_0+1}^{t_1} \lambda_i$$

wobei $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_t \geq 0$ Eigenwerte von $\boldsymbol{\Gamma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XY}}\boldsymbol{\Gamma}^{1/2}$ nach Größe sortiert.

- In der Praxis (mit $\widehat{\lambda}_i$) untersuchen, bis wann es sich „lohnt“, t zu vergrößern
- etwa mit Tests, ob $\operatorname{rk} \boldsymbol{\Gamma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XX}}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{XY}}\boldsymbol{\Gamma}^{1/2} = \operatorname{rk} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{YX}}$ kleiner als eine festgelegte Zahl ist

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit.