

STATISTISCHE EXTRAKTION RELEVANTER INFORMATION AUS MULTIVARIATEN ONLINE–MONITORING–DATEN DER INTENSIVMEDIZIN

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
der Universität Dortmund

Dem Fachbereich Statistik der Universität Dortmund
vorgelegt von

Vivian Lanius

aus Mülheim an der Ruhr

Dortmund 2004

1. Gutachter: Prof. Dr. U. Gather
2. Gutachter: Prof. Dr. W. Krämer

Tag der mündlichen Prüfung: 27. Januar 2005

Seit 1997 wird im Teilprojekt C4 des Sonderforschungsbereichs 475 „Komplexitätsreduktion in multivariaten Datenstrukturen“ an der Thematik „Zeitreihenanalytische Methoden zur Behandlung von Online-Monitoring-Daten aus der Intensivmedizin“ geforscht. Übergeordnetes Ziel des Projekts ist die Entwicklung intelligenter Entscheidungsunterstützungs- und Alarmsysteme zur bettseitigen kontinuierlichen Kontrolle des Zustands von Intensivpatienten. Der vorliegenden Arbeit liegen intensivmedizinische Daten aus diesem Projekt zugrunde.

INHALTSVERZEICHNIS

1	Einleitung	1
2	Statistische Grundlagen und Bezeichnungen	5
2.1	Statistische Verfahren zur Dimensionsreduktion	5
2.1.1	Hauptkomponentenanalyse	6
2.1.2	Faktoranalyse	9
2.2	Modellierung multivariater Zeitreihen	13
3	Verfahren zur Dimensionsreduktion für multivariate Zeitreihen	19
3.1	Faktoranalyse für multivariate Zeitreihen	22
3.1.1	Dynamische Faktormodelle im Frequenzbereich	24
3.1.2	Dynamische Faktormodelle im Zeitbereich	26
3.1.3	EM-Algorithmus zur Schätzung dynamischer Faktormodelle	31
3.2	Hauptkomponentenanalyse für multivariate Zeitreihen	34
3.2.1	Brillingers Hauptkomponentenanalyse im Frequenzbereich	36
3.2.2	Dynamische Hauptkomponentenanalyse in der Prozesskontrolle	38
3.3	Weitere dimensionsreduzierende Verfahren für autokorrelierte Beobachtungen	43
3.3.1	Minimum/Maximum Autokorrelations-Faktoranalyse	43
3.3.2	Kontinuum-Faktoranalyse	44
3.3.3	Independent Component Analyse	45
4	Dimensionsreduktion für Variablen aus der Intensivmedizin	47
4.1	Deskriptive Analyse der intensivmedizinischen Daten	48
4.2	Statische Dimensionsreduktion hämodynamischer Variablen	54
4.2.1	Statische Verfahren der Faktoranalyse	55
4.2.2	Statische Verfahren der Hauptkomponentenanalyse	57
4.3	Dynamische Dimensionsreduktion hämodynamischer Variablen	67
4.3.1	Dynamische Verfahren der Faktoranalyse	68
4.3.2	Dynamische Verfahren der Hauptkomponentenanalyse	74
4.4	Weitere Verfahren zur Dimensionsreduktion	77
4.5	Schlussfolgerungen	78
5	Prozedur zur Online-Extraktion relevanter Signale	80
5.1	Robuste Extraktion univariater Signale in Echtzeit	82

5.2	Robuste Extraktion multivariater Signale in Echtzeit	84
5.2.1	Multivariates Modell	84
5.2.2	Methoden der multivariaten Regression	85
5.2.3	Wahl einer Regressionsmethode im Online-Monitoring	89
5.2.4	Modifikation der gewählten Regressionsmethode	101
5.3	Gruppierung der Vitalparameter nach lokal ähnlichen Strukturen	112
5.3.1	Lokale Clusteranalyse hämodynamischer Vitalparameter	115
5.3.2	Gruppierung hämodynamischer Vitalparameter anhand klinischer Bewertungen	117
6	Zusammenfassung und Ausblick	122
	Anhang	124
	Anhang A: Der Kalmanfilter	124
	Anhang B: Interpretation des Abstands zweier Unterräume	126
	Anhang C: Wahl der optimalen Teilstichprobe bei Rauschen	128
	Anhang D: Vergleich robuster Kovarianzschätzer	130
	Literatur	131

1 EINLEITUNG

In der Intensivmedizin ist eine kontinuierliche bettseitige Kontrolle der quantitativen Messungen am Patienten von großer Bedeutung bei der Überwachung des Gesundheitszustands. Der Einsatz klinischer Informationssysteme ermöglicht eine automatische Online-Erfassung von verschiedenen Vitalparametern, Laborwerten, Medikamentengaben und therapeutischen Maßnahmen am Patientenbett. Grundlage dieser Arbeit sind Online-Monitoring-Daten, die auf der chirurgischen Intensivstation des Klinikums Dortmund erhoben werden.

Bei der Entwicklung klinischer Überwachungssysteme für menschliche Vitalparameter ist medizinisches Wissen mit geeignet gewählten bzw. modifizierten statistischen Verfahren zu kombinieren. Die kontinuierliche und automatische Bewertung des Zustands eines Intensivpatienten soll den medizinischen Pflegekräften als Entscheidungshilfe dienen. Eine frühzeitige Erkennung von Veränderungen in den Vitalparametern kann verbesserte Diagnosen sowie rechtzeitig einsetzende adäquate therapeutische Interventionen ermöglichen. Zur Realisierung dieses Ziels ist eine Online-Extraktion klinisch relevanter Informationen aus den aufgezeichneten Daten erforderlich.

Die aufgezeichneten intensivmedizinischen Patientenkurven in Form statistischer Zeitreihen sind aufgrund von technischen Messfehlern und physiologischer Variabilität stark verrauscht. Außerdem erschwert das Auftreten von Ausreißern, Niveau- und Trendänderungen, fehlenden Werten und veränderlichen Prozessvariabilitäten und -abhängigkeiten eine Modellierung der multivariaten Zeitreihen.

In der Praxis werden zur Erkennung alarmrelevanter Zustände bisher meist nur Schwellwertalarme eingesetzt, bei denen das Über- oder Unterschreiten kritischer Grenzen für jede einzelne überwachte Variable zu einem Alarm führt. Bei einer hohen Sensitivität dieser Alarmsysteme sind jedoch ein Großteil aller Alarme falsch positiv. Dies zieht eine Desensibilisierung der Pflegekräfte auf Intensivstationen gegenüber wahren Alarmen nach sich.

Die meisten Ansätze zur Analyse intensivmedizinischer Daten kommen aus den Bereichen Statistik und künstliche Intelligenz. Der Schwerpunkt existierender Veröffentlichungen zu dieser Problematik liegt dabei auf der Analyse und Online-Überwachung univariater Zeitreihen. Wie Högel (2000) in einem Überblicksartikel diskutiert, gehören dazu u. a. eine univariate (lokale) ARIMA-Modellierung (Imhoff, Bauer, Gather und Löhlein, 1997), Multi-Prozess-Kalman-Filter (Smith und West, 1983) sowie verschiedene CUSUM-, EWMA- oder Shewhart-basierte Ansätze. Bei den im Projekt C4 entwickelten Methoden liegt der Schwerpunkt der Arbeiten auf der univariaten Online-Erkennung und Unterscheidung von Mustern

wie Ausreißern, Niveauänderungen und Trends. Zur univariaten Extraktion relevanter Signale aus physiologischen Zeitreihen wurden robuste Regressionsverfahren herangezogen und auf den klinischen Kontext angepasst.

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Analyse der multivariaten intensivmedizinischen Zeitreihen. Dabei wird die Fragestellung untersucht, wie aus den Online–Aufzeichnungen von Vitalparametern des Herz–Kreislaufsystems, d. h. Variablen des hämodynamischen Systems, die wesentlichen Informationen zur kontinuierlichen Beurteilung des Zustands von Intensivpatienten abgeleitet werden können.

Selbst Ärzte mit langjähriger Erfahrung sind nur selten in der Lage, Beobachtungen von mehr als sieben Variablen zu verstehen und so zu bewerten, dass sie sicher auf den Patientenzustand zurückschließen können (Miller, 1956). Daher beruhen die diagnostischen und therapeutischen Entscheidungen in der Praxis bisher häufig nur auf den Beobachtungen einer kleinen Anzahl subjektiv ausgewählter Variablen, während die Information, die die übrigen Variablen beisteuern, vernachlässigt wird.

Von Interesse ist somit eine Extraktion weniger essentieller Komponenten aus den multivariaten Zeitreihen, die sämtliche klinisch relevante Information aus den Daten nutzt. Dabei liegt die Idee zugrunde, dass die hochkorrelierten multivariaten Beobachtungen hauptsächlich durch eine geringe Anzahl latenter physiologischer Faktoren angetrieben werden. Mit dem Ziel, solche nicht beobachtbaren wesentlichen Komponenten aus den Daten zu extrahieren, wird in dieser Arbeit zunächst die Anwendung dimensionsreduzierender statistischer Verfahren für Zeitreihen auf die intensivmedizinischen Variablen untersucht. Sofern es mit Hilfe solcher Techniken gelingt, die klinisch relevante Information auf wenige Größen zu komprimieren, sollen hier Methoden entwickelt werden, die eine automatische Extraktion dieser Komponenten in Echtzeit erlauben. Neben dem Wunsch nach einer Reduktion der Variablenzahl werden an die statistischen Methoden zusätzliche Anforderungen gestellt. Zum einen soll die medizinische Pflegekraft auf Basis der extrahierten Komponenten einfache Rückschlüsse auf den Zustand der Patienten ziehen können, und zum anderen soll jede relevante Veränderung in der Abhängigkeitsstruktur erkennbar sein.

Die intensivmedizinischen Online–Daten, wie sie vom Monitor aufgezeichnet werden, enthalten extremes Rauschen und Ausreißer. Eine Extraktion der klinisch relevanten Information aus den multivariaten Zeitreihen bedeutet auch die Trennung der essentiellen Signale von den irrelevanten Störgrößen. Daher liegt ein weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit auf der Erweiterung univariater Online–Signalextraktionsmethoden für intensivmedizinische Zeitreihen. Für die lokale Approximation der Signale durch lineare Funktionen werden robuste Verfahren der multivariaten Regression herangezogen und unter verschiedenen Aspekten verglichen. Schließlich wird eine hochrobuste Prozedur entwickelt, die es für die intensivmedizinischen Zeitreihen praktikabel erlaubt, in Echtzeit glatte Signale zu extrahieren. Die hierbei gewonnenen wesentlichen Informationen über strukturelle Änderungen in den intensivmedizinischen Zeitreihen werden schließlich zur Bewertung des Zustands der Patienten genutzt.

In Kapitel 2 sind einige Grundlagen aus der multivariaten Statistik zusammengestellt. Zum einen werden klassische statistische Verfahren der Dimensionsreduktion, wie Techniken der Hauptkomponenten- und Faktoranalyse, vorgestellt. Außerdem werden einige grundlegende Ergebnisse aus der Analyse multivariater Zeitreihen angegeben.

Das dritte Kapitel gibt einen umfassenden Überblick über die in der Literatur vorgeschlagenen Ansätze dimensionsreduzierender Methoden für multivariate Zeitreihen. Neben Verfahren, die auf eine Reduktion der großen Anzahl benötigter Parameter bei einer zeitreihenanalytischen Modellierung hochdimensionaler Prozesse abzielen, werden hier dynamische Faktormodelle vorgestellt und diskutiert. Diese Modelle benötigen starke Annahmen, um eine Identifizierbarkeit der Parameter zu erreichen. Darüber hinaus werden Techniken der dynamischen Hauptkomponentenanalyse eingeführt. Der wesentliche Unterschied zur statischen Hauptkomponentenanalyse besteht darin, dass die gesuchten Linearkombinationen hierbei oft auch vergangene Beobachtungen einbeziehen. Schließlich wird das Prinzip einiger verwandter Verfahren, die insbesondere für autokorrelierte Daten entwickelt wurden, erläutert. Eine Anwendung der vorgestellten Verfahren zur Dimensionsreduktion auf die hämodynamischen Zeitreihen wird im vierten Kapitel untersucht. Nach einer Beschreibung der in dieser Arbeit betrachteten Variablen des Herz-Kreislaufsystems erfolgt zunächst eine explorative Analyse der Online-Daten mit Hilfe statischer Methoden. Dabei wird sowohl eine faktoranalytische Modellierung als auch eine Beschreibung der Daten mittels weniger Linearkombinationen diskutiert. Die Extraktion statischer Hauptkomponenten wird einer subjektiven Variablenselektion, wie sie in der klinischen Praxis üblich ist, gegenübergestellt. Daran anschließend wird untersucht, ob dynamische Verfahren der Dimensionsreduktion besser geeignet sind, die vielfältigen Abhängigkeiten unter den Komponenten einer multivariaten intensivmedizinischen Zeitreihe zu erfassen. Abschließend erfolgt eine Zusammenfassung der Ergebnisse, verbunden mit einer kritischen Diskussion des Nutzens solcher dimensionsreduzierender Methoden im Online-Monitoring in der Intensivmedizin.

Das fünfte Kapitel beschäftigt sich mit einer Extraktion der klinisch relevanten Information aus intensivmedizinischen Online-Monitoring-Daten. Als Konsequenz aus den in Kapitel 4 gewonnenen Einsichten werden hier Kriterien festgelegt, die vorgeben, welche Informationen aus den überwachten Vitalparametern zur Beurteilung des Zustands eines Patienten erforderlich sind. Daraus ergibt sich zunächst eine Extraktion klinisch relevanter Signale. Nach der Einführung existierender univariater Methoden zur Online-Signalextraktion bei intensivmedizinischen Zeitreihen erfolgt deren Übertragung auf multivariate Zeitreihen. Zur lokalen Approximation der Signale durch lineare Funktionen werden robuste multivariate Regressionstechniken benötigt. Hier werden verschiedene bestehende Ansätze für eine Anwendung im multivariaten Online-Monitoring untersucht. Schließlich wird eine Signalextraktionsprozedur entwickelt, die insbesondere für eine praktikable Online-Approximation multivariater Signale aus hämodynamischen Zeitreihen geeignet ist. Basierend auf den hierbei gewonnenen Informationen über die Struktur der einzelnen Zeitreihen werden letztlich Ansätze zur Reduktion dieser Informationen genannt.

Abschließend werden in Kapitel 6 die wichtigsten im Rahmen dieser Arbeit erzielten Ergebnisse und gewonnenen Einsichten zusammengefasst. Außerdem wird ein Ausblick auf zukünftige Forschung auf diesem Gebiet gegeben.

Die in dieser Arbeit gewählte Vorgehensweise ist problemorientiert und teilweise stark explorativ. Geprägt von dem Wunsch, die hohe Anzahl überwachter Vitalparameter auf wenige Komponenten zu reduzieren, erfolgt zunächst eine empirische Anwendung entsprechender Verfahren auf die vorliegenden Daten. Die gefundenen Ergebnisse werden mit bestehendem medizinischen Wissen abgeglichen und hinsichtlich des Nutzens für die praktische Anwendung untersucht. Die hieraus gewonnenen Erkenntnisse machen für die Bearbeitung der klinischen Fragestellung eine Änderung der Lösungsstrategie erforderlich. Im zweiten Teil der Arbeit wird auf Basis medizinischen Wissens ein Forderungskatalog für das Problem aufgestellt. Hieraus ergeben sich Konsequenzen und Einschränkungen der Möglichkeiten statistischer Methodik. Aus verschiedenen Bereichen werden Methoden und Werkzeuge geeignet kombiniert. Die vorgeschlagene Prozedur geht letztlich sehr auf die Bedürfnisse im Monitoring hämodynamischer Variablen ein und ist somit stark auf die in der Intensivmedizin vorhandene Datenlage zugeschnitten.

2 STATISTISCHE GRUNDLAGEN UND BEZEICHNUNGEN

Wie aus der Einleitung deutlich wird, werden zur Bearbeitung der Fragestellung dieser Arbeit vor allem Verfahren aus der Zeitreihenanalyse und der multivariaten Statistik benötigt. Dies sind zum einen Methoden zur Modellierung multivariater stochastischer Prozesse und zum anderen Verfahren zur Dimensionsreduktion. In diesem Abschnitt werden daher zunächst einige bekannte grundlegende Resultate sowie einige später benötigte Eigenschaften dieser Verfahren vorgestellt.

2.1 STATISTISCHE VERFAHREN ZUR DIMENSIONSREDUKTION

Um in komplexen Sachverhalten Zusammenhänge zwischen verschiedenen Größen erfassen und untersuchen zu können, wird häufig eine große Anzahl an Variablen erhoben. Mit den fortschreitenden technischen Möglichkeiten, solche Datenmengen zu speichern und handzuhaben, ergeben sich vermehrt hochdimensionale Datensätze, die mit geeigneten statistischen Verfahren analysiert werden müssen. Diese Aufgabe wird aufgrund spärlich besetzter Datenräume (*Fluch der hohen Dimension*; Huber, 1993; Friedman, 1994; Gather und Becker, 2001) erschwert. Deshalb ist es von hohem Interesse, eine gute Darstellung der Daten in einem Raum mit geringerer Dimension zu finden. Klassische dimensionsreduzierende Verfahren mit diesem Ziel sind u. a. die Hauptkomponentenanalyse und die Faktoranalyse. Beide Methoden beschäftigen sich mit der Aufgabe, die Kovarianzstruktur von k beobachteten Variablen durch eine geringe Anzahl r von Komponenten möglichst gut zu beschreiben. Dennoch handelt es sich um zwei unterschiedliche Ansätze (Jolliffe, 2002, Kapitel 7), wie in den weiteren Ausführungen deutlich wird.

Ausgangssituation und Notation in diesem Abschnitt sei die folgende: Eine Realisierung $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ von N identisch gemäß $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_k)^\top \in \mathbb{R}^k$ verteilten Zufallsvektoren $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N$ wird als Stichprobe $\underline{\mathbf{x}}_N = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)^\top \in \mathbb{R}$ bezeichnet. Da das Augenmerk im folgenden auf den zweiten Momenten liegt, sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit der Erwartungswert $\boldsymbol{\mu} = \mathbb{E}[\mathbf{X}] = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^k$. Außerdem existiere die Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma} = \text{Cov}[\mathbf{X}] \in \mathbb{R}^{k \times k}$, und $\boldsymbol{\Sigma}$ sei eine symmetrische und positiv definite Matrix vom Rang k .

2.1.1 HAUPTKOMPONENTENANALYSE

Die Hauptkomponentenanalyse geht im wesentlichen auf Arbeiten von Pearson (1901) und Hotelling (1933) zurück. Durch eine lineare Transformation wird eine Reduktion einer Anzahl korrelierter Variablen auf weniger Komponenten erzielt, so dass die resultierenden Linearkombinationen der Variablen, die Hauptkomponenten, *unkorreliert* sind und nacheinander jeweils ein *Maximum an Varianz* erklären. Diese Eigenschaften werden häufig zur Definition der Hauptkomponentenanalyse verwendet.

Definition 2.1 (*Hauptkomponenten*)

Eine Linearkombination $Y_1 = \beta_1^\top \mathbf{X}$ eines Zufallsvektors $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^k$, wobei der Vektor $\beta_1 = \beta$ so gewählt wird, dass $\text{Var}[\beta^\top \mathbf{X}]$ maximal ist unter der Nebenbedingung $\beta^\top \beta = 1$, heißt erste Hauptkomponente von \mathbf{X} . Eine j -te Hauptkomponente $Y_j = \beta_j^\top \mathbf{X}$, $j = 2, \dots, k$, von \mathbf{X} ist definiert als Lösung $\beta_j = \beta$ des Optimierungsproblems $\max_{\beta^\top \beta = 1} \text{Var}[\beta^\top \mathbf{X}]$ unter $\text{Cov}[\beta \mathbf{X}, \beta_i^\top \mathbf{X}] = 0$, $i < j$.

Sukzessive wird damit eine Matrix orthonormaler Vektoren $\beta_{(k)} = (\beta_1, \dots, \beta_k)$ bestimmt, die wiederum eine Basis des \mathbb{R}^k bilden. Eine Lösung des Optimierungsproblems gibt der folgende Satz:

Satz 2.1 Bezeichne $\Sigma = \text{Cov}[\mathbf{X}] \in \mathbb{R}^{k \times k}$ die Kovarianzmatrix eines Zufallsvektors $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_k)^\top$. Außerdem seien $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_k \geq 0$ die geordneten Eigenwerte von Σ und $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k$ eine Basis zugehöriger, auf 1 normierter Eigenvektoren. Dann können Hauptkomponenten gemäß Definition 2.1 bestimmt werden über

$$Y_j = \mathbf{e}_j^\top \mathbf{X}, \quad j = 1, \dots, k,$$

d. h. $\beta_j = \mathbf{e}_j$, $j = 1, \dots, k$. Für die Hauptkomponenten gilt

$$\text{Var}[Y_j] = \beta_j^\top \Sigma \beta_j = \lambda_j, \quad j = 1, \dots, k. \quad (2.1)$$

Beweis Vgl. z. B. Jolliffe (2002, Kapitel 1.1). □

Die Matrix $\beta_{(k)}$ und die Eigenwerte von Σ ergeben sich aus der Spektralzerlegung $\Sigma = \beta_{(k)} \Lambda \beta_{(k)}^\top$, mit $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$.

Bemerkung 2.1

(i) (*Eindeutigkeit*) Die Hauptkomponententransformation ist für $\lambda_1 > \dots > \lambda_k \geq 0$ eindeutig bestimmt bis auf Multiplikation der Eigenvektoren mit dem Faktor -1 . Falls s Eigenwerte zusammenfallen, d. h. falls $\lambda_{q+1} = \dots = \lambda_{q+s}$, ist nur der s -dimensionale Unterraum bestimmt, in welchem s beliebige orthonormale Vektoren gewählt werden können (Flury, 1988).

(ii) (*Varianzen*) Wegen (2.1) folgt mit $\sum_{j=1}^k \text{Var}[X_j] = \text{tr}(\Sigma) = \sum_{j=1}^k \lambda_j = \sum_{j=1}^k \text{Var}[Y_j]$ sofort, dass durch die k Hauptkomponenten die Gesamtvarianz der Originalvariablen erfasst wird. Damit beschreibt $\sum_{j=1}^r \lambda_j / \sum_{j=1}^k \lambda_j$ den Anteil an der Gesamtvarianz, den die ersten r Hauptkomponenten auf sich vereinigen.

(iii) (*Normalisierung*) Anstelle der Nebenbedingung „ $\beta_j^\top \beta_j = 1$ für alle j “ in Definition 2.1 werden bisweilen auch andere Normalisierungsbedingungen, wie $\beta_j^\top \beta_j = \lambda_j$ für alle j oder $\beta_j^\top \beta_j = \lambda_j^{-1}$ für alle j genutzt (Jolliffe, 1995).

Die Eigenschaften aus Teil (ii) der Bemerkung 2.1 erweisen sich als nützlich für die Bestimmung der Anzahl r der benötigten Hauptkomponenten, falls ein festgelegter Anteil der Gesamtvarianz erfasst werden soll. Weitere übliche Kriterien zur Wahl von r sind u. a. der *Scree-Test*, *Kaisers Eigenwertkriterium* oder *Bartlett's Signifikanztest* (vgl. z. B. Fahrmeir, Tutz und Hamerle, 1996; Mardia, Kent und Bibby, 1995).

Bemerkung 2.2 (*Skaleninvarianz*)

Die Hauptkomponentenanalyse ist nicht *skaleninvariant*, da die Eigenvektoren der Kovarianzmatrix Σ im allgemeinen verschieden sind von denen einer skalierten Kovarianzmatrix $\tilde{\Sigma} = D\Sigma D$, wobei $D \neq I_k$ eine Diagonalmatrix bezeichnet. Damit stimmen die aus der Kovarianzmatrix gewonnenen Hauptkomponenten in der Regel nicht mit den aus der Korrelationsmatrix extrahierten überein. Eine Standardisierung der beobachteten Variablen vorab kann also zu deutlich anderen Ergebnissen führen. Werden die Variablen auf verschiedenen Skalen gemessen, ist eine Vorabskalierung der Variablen in vielen Fällen angebracht.

Geometrisch aufgefasst, handelt es sich bei der Hauptkomponententransformation um die Wahl eines neuen Koordinatensystems, welches durch eine Rotation des ursprünglichen Koordinatensystems im \mathbb{R}^k gewonnen wird. Die neuen Koordinatenachsen stimmen mit den Richtungen der Hauptkomponenten überein. Durch die Projektion in den r -dimensionalen Unterraum, der von den ersten $r < k$ Hauptkomponenten aufgespannt wird, wird dann ein Großteil der Varianz der Daten beschrieben. Eine intuitive, geometrisch motivierte Herleitung der Hauptkomponentenanalyse kann damit ausgehend von den Beobachtungen \mathbf{x}_i einer Stichprobe $\underline{\mathbf{x}}_N = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^k$ gegeben werden. Mit dem Ziel, die Information in den Daten auf wenige Komponenten zu verdichten, wird diejenige r -dimensionale Hyperebene im \mathbb{R}^k gesucht, die die Summe der euklidischen Abstände der Datenpunkte \mathbf{x}_i , $i = 1, \dots, N$, zu ihren Projektionen in die Hyperebene minimiert, d. h. gesucht ist eine Lösung zu folgendem Minimierungsproblem

$$\min_{\mu \in \mathbb{R}^k, \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{k \times k}, \text{rk}(\mathbf{A})=r} \mathbb{E}[(\mathbf{X} - \mu - \mathbf{A}\mathbf{X})^\top (\mathbf{X} - \mu - \mathbf{A}\mathbf{X})], \quad (2.2)$$

wobei $r < k$ und $\text{rk}(\mathbf{A})$ den Rang einer Matrix \mathbf{A} bezeichnet.

Da Hauptkomponenten eine Vielzahl von Kriterien optimieren (vgl. z. B. Jolliffe, 2002, Kapitel 2 und 3), werden zur Motivation des Verfahrens auch unterschiedliche Eigenschaften herangezogen.

Zur Bestimmung der Hauptkomponenten aus einer Stichprobe $\underline{\mathbf{x}}_N$ müssen die in der Regel unbekannten Parameter μ und Σ durch geeignete Schätzer $\hat{\mu}$ und $\hat{\Sigma}$ ersetzt werden. Die

Spektralzerlegung der symmetrischen, positiv semidefiniten Matrix $\hat{\Sigma}$ liefert die geschätzten Eigenwerte $\hat{\lambda}_1 \geq \dots \geq \hat{\lambda}_k > 0$ und Eigenvektoren $\hat{\beta}_{(k)} = (\hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_k)$ und damit die geschätzten Hauptkomponenten $\hat{Y}_j, j = 1, \dots, r$. Übliche Schätzer für μ und Σ sind das Stichprobenmittel $\bar{x} = \sum_{i=1}^N x_i$ und die Stichprobenkovarianzmatrix $S_N = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})^\top$.

Außer der Existenz des zweiten Moments sind für die Hauptkomponentenanalyse im Grunde keine Verteilungsannahmen an die betrachteten Zufallsvariablen erforderlich. Allerdings sollte für einen sinnvollen Einsatz eine elliptisch symmetrische Verteilung gegeben sein. Wird für X eine multivariate Normalverteilung angenommen, so können aus dem Maximum-Likelihood-Schätzer $\frac{N-1}{N} S_N$ für Σ ML-Schätzer für $\beta_{(r)}$ und Λ gewonnen werden, sowie deren asymptotische Verteilung, Konfidenzintervalle und Tests für die Koeffizienten der Hauptkomponenten, vgl. z. B. Flury (1988, Kapitel 2) oder Jolliffe (2002, Kapitel 3).

Die klassische Hauptkomponentenanalyse ist sehr empfindlich gegenüber Ausreißern (Devlin, Gnanadesikan und Kettenring, 1981). Bei den robusten Verfahren zur Hauptkomponentenanalyse lassen sich verschiedene Ansätze unterscheiden. Ein Robustifizierungsansatz besteht in der Ersetzung der klassischen empirischen Kovarianzmatrix durch einen robusten Kovarianzschätzer, wie M-Schätzer (Maronna, 1976; Campbell, 1980) bzw. MCD- oder S-Schätzer (Croux und Haesbroeck, 2000). Eine andere Möglichkeit beruht auf der Projection-Pursuit-Idee (Li und Chen, 1985; Croux und Ruiz-Gazen, 2004; Hubert, Rousseeuw und Verboven, 2002). Dabei wird zur Findung der Projektionsrichtungen sukzessive ein robustes univariates Streuungsmaß maximiert. Eine Kombination der Projection-Pursuit-Verfahren mit einer robusten Schätzung der Kovarianz, ROBPCA, schlagen Hubert, Rousseeuw und Van den Branden (2004) vor. Locantore, Marron, Simpson et al. (1999) beschäftigen sich mit einer robusten Hauptkomponentenanalyse für funktionale Daten, an die sich eine interessante Diskussion anschließt.

Falls in m , $m \geq 1$ Populationen k gleiche Merkmale erhoben werden und das Ziel jeweils eine Reduktion auf wenige Hauptkomponenten ist, liegt ein Vergleich der Hauptkomponententransformationen nahe (Krzanowski, 1979; Flury, 1988). Ein deskriptiver Vergleich der Unterräume, die von den ersten r Hauptkomponenten der untersuchten Populationen aufgespannt werden, ist mit Hilfe geeigneter Abstandsmaße zwischen Unterräumen im \mathbb{R}^k möglich (Golub und Van Loan, 1983). Durch die Minimierung eines solchen Abstandsmaßes sucht Krzanowski (1979) denjenigen Unterraum, der die Unterräume der ersten r spezifischen Hauptkomponenten der m Populationen bestmöglich repräsentiert. Crone und Crosby (1995) erweitern diese Ergebnisse und definieren über das auf den Winkeln zwischen Unterräumen basierende Abstandsmaß eine Metrik, die den Abstand zweier r -dimensionaler Unterräume $\mathcal{G}_A, \mathcal{G}_B \in \mathbb{R}^k$ misst. Bezeichnen A und $B \in \mathbb{R}^{k \times r}$ Matrizen vom Rang r , deren Spalten die Unterräume \mathcal{G}_A und \mathcal{G}_B aufspannen, dann lautet diese Metrik

$$\mathbb{D}(\mathcal{G}_A, \mathcal{G}_B) = (r - \text{tr}[A(A^\top A)^{-1} A^\top B(B^\top B)^{-1} B^\top])^{1/2}. \quad (2.3)$$

Für $2r \leq k$ nimmt dieser Abstand den maximalen Wert \sqrt{r} an, wenn \mathbf{A} einen Raum orthogonal zu \mathbf{B} aufspannt, bei identischen Unterräumen beträgt der Abstand 0. Für eine Gruppe von m r -dimensionalen Unterräumen $\{\mathcal{G}_i\}_{i=1}^m$ mit orthogonalen Hauptkomponentenrichtungen $\beta_{(r)}^i$, $i = 1, \dots, m$, wird der mittlere r -dimensionale Unterraum (*common subspace*) von den Eigenvektoren $\beta_{(r)}^{cs}$ der r größten Eigenwerte der Matrix

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \beta_{(r)}^i \beta_{(r)}^{i\top} \quad (2.4)$$

aufgespannt.

Flury (1988) betrachtet eine Hierarchie von Modellen, die neben Gleichheit und Proportionalität von Kovarianzmatrizen aus unterschiedlichen Populationen auch die Gemeinsamkeit aller oder nur einiger Hauptkomponenten definieren. In einem CPC(r^*)-Modell (*eng. common principal components*) wird angenommen, dass die Kovarianzmatrizen $\Sigma_i \in \mathbb{R}^{k \times k}$, $i = 1, \dots, m$, für die m unabhängigen Populationen durch eine gemeinsame orthogonale Matrix $\beta_{(r^*)}^{cpc}$ gleichzeitig diagonalisiert werden können, d. h.

$$\Sigma_i = \beta_{(r^*)}^{cpc} \Lambda_i \beta_{(r^*)}^{cpc\top}, \quad i = 1, \dots, m, \quad r^* \leq k. \quad (2.5)$$

Dabei werden die Variablen so rotiert, dass die resultierenden gemeinsamen Hauptkomponenten der m Gruppen möglichst unkorreliert sind. Für die m Populationen werden also r^* gemeinsame Projektionsrichtungen mit möglicherweise unterschiedlichen Varianzen gefordert. Neuenschwander und Flury (2000) befassen sich mit der Situation, dass die Unabhängigkeitsannahme für die m Populationen verletzt ist. Robuste Schätzverfahren in diesen Modellen werden von Boente, Pires und Rodrigues (2002) und Boente und Orellana (2004) untersucht.

2.1.2 FAKTORANALYSE

Faktoranalytische Techniken gehen ursprünglich auf eine Arbeit von Spearman (1904) zurück. Ziel ist die Reduktion der Dimension des Variablenraums durch das Auffinden einer geringeren Anzahl r von hypothetischen Variablen, den sogenannten latenten Faktoren. Die Darstellung der Kovarianzmatrix von k beobachteten Variablen beruht auf einem faktoranalytischen Modell. Das Hauptgewicht liegt hier auf der Erfassung der Kovarianzen (oder Korrelationen) und nicht auf den Varianzen.

Explizit werden in einem Faktormodell k beobachtbare Zufallsvariablen X_1, \dots, X_k , von einem Fehlerterm abgesehen, durch eine Linearkombination von $r \leq k$ gemeinsamen *latenten Variablen* $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_r)^\top$ ausgedrückt, d. h.

$$\begin{aligned} X_1 - \mu_1 &= l_{11}\xi_1 + l_{12}\xi_2 + \dots + l_{1r}\xi_r + \varepsilon_1 \\ X_2 - \mu_2 &= l_{21}\xi_1 + l_{22}\xi_2 + \dots + l_{2r}\xi_r + \varepsilon_2 \\ &\vdots \\ X_k - \mu_k &= l_{k1}\xi_1 + l_{k2}\xi_2 + \dots + l_{kr}\xi_r + \varepsilon_k, \end{aligned}$$

wobei $l_{js}, j = 1, 2, \dots, k; s = 1, 2, \dots, r$, die *Faktorladungen* und $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_k)^\top$ den Zufallsvektor der spezifischen Faktoren (Störterme, Resteinflüsse) bezeichnet. In Matrixschreibweise lautet das Modell

$$\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu} = \mathbf{L}\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (2.6)$$

wobei die Ladungen in der Ladungsmatrix $\mathbf{L} = \{l_{js}\} \in \mathbb{R}^{k \times r}$ zusammengefasst werden. Da der Nullpunkt der latenten Variablen frei wählbar ist, wird ohne Beschränkung der Allgemeinheit häufig die Annahme $\mathbf{E}[\boldsymbol{\xi}] = \mathbf{E}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{0}$ getroffen, wobei die Zufallsvariablen X_1, \dots, X_k als Abweichungen von ihrem Erwartungswert, d. h. als Residuen, verstanden werden.

Im Faktormodell (2.6) sind weder die Parameter \mathbf{L} bekannt, noch sind die gemeinsamen Faktoren $\boldsymbol{\xi}$ beobachtbar. Um für k beobachtbare Zufallsvariablen X_1, X_2, \dots, X_k genau $r + k$ nicht beobachtbare Zufallsvariablen $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_r, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_k$ identifizieren zu können, sind einige Modellannahmen notwendig.

In einem orthogonalen Faktormodell sind diese gegeben durch

(A.1) Die gemeinsamen Faktoren sind unkorreliert und standardisiert mit Varianz 1, d. h. für die Kovarianzmatrix der Faktoren gilt $\text{Cov}[\boldsymbol{\xi}] = \boldsymbol{\Sigma}_\xi = \mathbf{I}_r$.

(A.2) Die Kovarianzmatrix der spezifischen Einflüsse ist eine Diagonalmatrix $\text{Cov}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \boldsymbol{\Psi} = \text{diag}(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k)$, d. h. die Störterme werden als unkorreliert angenommen, und der Term $\mathbf{L}\boldsymbol{\xi}$ beschreibt vollkommen die Kovarianzen zwischen den Variablenpaaren (X_i, X_j) .

(A.3) Die gemeinsamen Faktoren und die Fehlerterme sind unkorreliert, d. h. $\text{Cov}[\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{0}$.

In einem obliquen Faktormodell wird Annahme (A.1) abgeschwächt im Sinne möglicherweise korrelierter Faktoren (Lawley und Maxwell, 1971). Außerdem wird die Unkorreliertheit von $\boldsymbol{\xi}$ und $\boldsymbol{\varepsilon}$ gemäß (A.3) in einigen Fällen zur stochastischen Unabhängigkeit verschärft.

Mit den Annahmen (A.1) – (A.3) folgt das *Fundamentaltheorem der Faktoranalyse* (Thurstone, 1935)

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{E}[(\mathbf{L}\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\varepsilon})(\mathbf{L}\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\varepsilon})^\top] = \mathbf{L}\boldsymbol{\Sigma}_\xi\mathbf{L}^\top + \boldsymbol{\Psi} = \mathbf{L}\mathbf{L}^\top + \boldsymbol{\Psi}. \quad (2.7)$$

Für die Kovarianz zwischen den Zufallsvariablen \mathbf{X} und den latenten Variablen $\boldsymbol{\xi}$ gilt $\text{Cov}[\mathbf{X}, \boldsymbol{\xi}] = \mathbf{L}$.

Bemerkung 2.3 (Identifizierbarkeit)

Im Hinblick auf die unbekannten Größen r , \mathbf{L} und $\boldsymbol{\Psi}$ sind folgende Resultate bezüglich der Existenz und Eindeutigkeit der Zerlegung aus (2.7) bekannt:

- (i) (Existenz) Eine Faktorisierung von $\boldsymbol{\Sigma}$ gemäß (2.7) existiert für den Fall $r = k$. Gleichermaßen existiert für $r \leq k$ und $\boldsymbol{\Psi}$ gegeben eine solche Zerlegung dann, wenn $\boldsymbol{\Sigma} - \boldsymbol{\Psi}$ positiv semidefinit mit $\text{rk}(\boldsymbol{\Sigma} - \boldsymbol{\Psi}) = r$ ist. Andernfalls kann eine Lösung von (2.7) nicht zulässig sein, falls z. B. negative spezifische Varianzen auftreten, vgl. Johnson und Wichern (1992).

- (ii) (Eindeutigkeit) Existiert eine Faktorisierung gemäß (2.7), so sind die Faktorladungen für $1 < r \leq k$ nicht eindeutig bestimmt, da für festes Ψ unendlich viele Matrizen L die Gleichung (2.7) erfüllen. Falls L und Ψ eine Lösung für (2.7) darstellen, so erfüllen auch $L^* = LU$ und Ψ , wobei $U \in \mathbb{R}^{r \times r}$ eine orthogonale Matrix ist, diese Gleichung. Die Ladungsmatrix L und auch die gemeinsamen Faktoren ξ sind damit in eindeutiger Weise nur bis auf eine Transformation (Rotation) durch eine beliebige orthogonale Matrix U bestimmt, wobei $\xi^* = U^\top \xi$ ist. Diese Problematik ist als Identifikationsproblem oder als Faktor–Rotations–Problem bekannt. Eine eindeutige Faktorisierung lässt sich nur erzielen, wenn zusätzliche Restriktionen auferlegt werden (Lawley und Maxwell, 1971).

Bemerkung 2.4 (*Skalenäquivarianz*)

Ein Faktormodell verhält sich skalenäquivalent. Eine Skalierung der Variablen gemäß $Y = DX$, mit $D = \text{diag}\{d_1, \dots, d_k\}$, $d_i > 0$, bewirkt eine entsprechende Transformation der Ladungsmatrix. Explizit folgt aus der transformierten Modellgleichung $Y = DL\xi + D\varepsilon$ für (2.7): $D\Sigma D = DLL^\top D + D\Psi D$. Damit lassen sich die Ladungsmatrix \tilde{L} und die Einzelrestvarianzmatrix $\tilde{\Psi}$ einfach über eine Skalierung der Lösungen L und Ψ aus der Zerlegung von Σ gewinnen, die Faktoren selbst bleiben unverändert.

In der Praxis müssen die unbekannten Parameter L und Ψ aus der Stichprobe \underline{x}_N geschätzt werden. Ein üblicher Lösungsansatz bestimmt die Schätzer \hat{L} und $\hat{\Psi}$ als Lösungen der Faktorisierung aus (2.7). Dabei wird Σ durch einen geeigneten Schätzer, häufig die Stichprobenkovarianzmatrix S_N , ersetzt, d. h. $S_N = \hat{L}\hat{L}^\top + \hat{\Psi}$. Anstelle der empirischen Kovarianz S_N wird in der Praxis häufig auch die Stichprobenkorrelationsmatrix R_N verwendet, falls die Variablen auf sehr unterschiedlichen Skalen gemessen werden.

Eine notwendige Bedingung für eine konsistente Schätzung der unbekannten Parameter ist, dass die Anzahl der zu schätzenden Parameter die Anzahl $k(k+1)/2$ der verschiedenen Elemente der Stichprobenkovarianzmatrix nicht übersteigt. Damit können maximal $q \leq (2k+1 - \sqrt{(8k+1)})/2$ Faktoren angepasst werden (Bartholomew und Knott, 1999).

Die Schätzung der Parameter kann mittels verschiedener Schätzprinzipien mit gegebenenfalls zusätzlichen Annahmen erfolgen. So werden unter dem Oberbegriff Faktoranalyse teilweise recht unterschiedliche Verfahren zusammengefasst. Verbreitet ist die Anwendung des Maximum–Likelihood–Prinzips oder von Verfahren, die sich an die Hauptkomponentenanalyse anlehnen. Daneben existieren zahlreiche weitere, teilweise eher einfache und intuitive Verfahren, vgl. Fahrmeir, Tutz und Hamerle (1996) oder Lawley und Maxwell (1971), insbesondere auch für Modelle mit zusätzlichen Restriktionen an die Ladungsmatrix.

Maximum–Likelihood–Schätzer

Ist die zusätzliche Annahme einer Normalverteilung der gemeinsamen Faktoren ξ und der spezifischen Faktoren ε gerechtfertigt, so liefert die Maximierung der Likelihood–Funktion die Maximum–Likelihood–Schätzer \hat{L} und $\hat{\Psi}$ für die unbekannten Parameter. Die Bestim-

mungsgleichungen ergeben sich durch Nullsetzen der partiellen Ableitungen. Eine Lösung dieser Gleichungen erfolgt mit Hilfe numerischer Verfahren, wobei die technische Nebenbedingung, dass $\mathbf{L}^\top \mathbf{\Psi}^{-1} \mathbf{L}$ diagonal ist (Jöreskog, 1977; für eine statistische Motivation vgl. Bartholomew und Knott, 1999, S. 42), eine eindeutige Schätzung der Ladungsmatrix garantiert. Wegen der Skalenäquivarianz der ML-Schätzer kann die Kovarianzmatrix auch durch die empirische Korrelationsmatrix \mathbf{R} ersetzt werden, die Faktoren bleiben dabei invariant. Falls die Annahme der Normalverteilung nicht erfüllt ist, maximieren die resultierenden Quasi-ML-Schätzer dennoch Kriterien, die auf den partiellen bzw. kanonischen Korrelationen beruhen (Jolliffe, 2002, Kapitel 7.2).

Die Anzahl r der gewünschten gemeinsamen Faktoren muss vorab spezifiziert werden. Unter einer Normalverteilungsannahme kann die Modellanpassung getestet werden, etwa hinsichtlich der Wahl von r , und es können Vertrauensintervalle für die ML-Schätzer bestimmt werden. Zu beachten ist, dass sich bei der ML-Schätzung die Einträge der ersten r Vektoren der geschätzten Ladungsmatrix durch die Hinzunahme weiterer Faktoren ändern können.

Die Hauptkomponentenmethode

In der Praxis ist der Einsatz der Hauptkomponentenanalyse zur Schätzung der Parameter des Faktormodells verbreitet. Dabei wird die Matrix $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{(r)} = (\hat{\boldsymbol{\beta}}_1, \dots, \hat{\boldsymbol{\beta}}_r)$ der ersten r Eigenvektoren der geschätzten Kovarianzmatrix als Schätzer für die Ladungsmatrix \mathbf{L} verwendet. Wegen der unterschiedlichen Zielsetzung der Verfahren ist diese Vorgehensweise jedoch nicht prinzipiell gerechtfertigt, vgl. dazu Jolliffe (2002). Eine Alternative, die diesem Ansatz entgegenkommt, ist die Hauptfaktoranalyse. Die Idee besteht darin, die Hauptkomponenten aus der reduzierten Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{\Psi}$ zu gewinnen, um schließlich iterativ Schätzer für die Modellparameter zu bestimmen. Natürlich wird hier zunächst ein geeigneter Schätzer für die Matrix $\mathbf{\Psi}$ der Einzelrestvarianzen benötigt.

Es ist möglich, dass bei der Schätzung eine Lösung mit negativen Werten für eine oder mehrere der Einzelrestvarianzen ψ_i , $i = 1, \dots, k$, gefunden wird. Der Parameterraum ist jedoch beschränkt auf $\psi_i \geq 0$ für alle $i = 1, \dots, k$. In diesem Fall liegt das Minimum der Likelihoodfunktion auf dem Rand des Parameterraums, und die betroffenen ψ_i sind Null. Diese Problematik ist als *Heywood-Fall* bekannt. Falls bei der Schätzung m Einzelrestvarianzen verschwinden, so deutet dies darauf hin, dass die zugehörigen m Variablen gänzlich in dem Raum liegen, der von den extrahierten Faktoren aufgespannt wird (Lawley und Maxwell, 1971). Allerdings ist es gleichzeitig nicht immer sinnvoll, die zugehörigen beobachteten Variablen zu eliminieren, da sie wichtige Information enthalten. Weitere Ursachen für Heywood-Fälle sind Fehler in den Daten, die Anpassung zu vieler oder zu weniger Faktoren oder die Untauglichkeit eines Faktormodells (Bartholomew und Knott, 1999). Statistische Inferenz ist im Heywood-Fall nicht mehr möglich.

Eine unter Restriktionen gefundene Lösung für das Faktormodell kann anschließend gemäß eines geeigneten Kriteriums rotiert werden, um so eine einfachere, besser zu interpretie-

rende Struktur der Ladungsmatrix zu finden. Übliche Ansätze sind Varimax-, Orthomax-, oder Oblimax-Rotationen, vgl. dazu Lawley und Maxwell (1971). In diesem Zusammenhang werden auch Rotationen für Modelle mit abhängigen Faktoren betrachtet. Interessant ist insbesondere auch eine Rotation nach dem Prokrustes-Kriterium. Durch die Spezifikation fester Rotationsrichtungen kann dabei vorhandenes Vorwissen mit in die Analyse einbezogen werden.

Im Anschluss an eine Parameterschätzung sind zusätzlich häufig die Faktoren selbst von Interesse. Bei den Faktorscores handelt es sich um die Werte der latenten Zufallsvariablen, so dass sie nicht wie Parameter im üblichen Sinne geschätzt werden können. In der Literatur werden verschiedene Verfahren (Bartlett-Scores oder Thomson-Scores) vorgeschlagen, vgl. Mardia, Kent und Bibby (1995), die wiederum auf verschiedenen Schätzprinzipien wie ML-, KQ- oder Regressionsschätzung beruhen. An dieser Stelle wird auf die verschiedenen Verfahren nicht weiter eingegangen. Für einen detaillierteren Einblick sei auf die oben genannte Literatur verwiesen.

Da die klassischen Verfahren der Faktoranalyse auf der empirischen Kovarianzmatrix beruhen, sind sie höchst empfindlich gegenüber Ausreißern (Tanaka und Odaka, 1989a,b). Robuste Ansätze der Faktoranalyse ersetzen daher die empirische Kovarianzmatrix durch robuste Schätzer, wie einen multivariaten M-Schätzer (Kosfeld, 1996; Campbell, 1980) oder den MVE-Schätzer (Filzmoser, 1999; Rousseeuw, 1985). Pison, Rousseeuw, Filzmoser und Croux (2003) schätzen die Kovarianzmatrix durch den MCD-Schätzer (Rousseeuw, 1985) und stellen fest, dass hierbei eine Hauptfaktoranalyse bessere Eigenschaften besitzt als eine ML-Faktoranalyse. Alternativ gewinnen Croux, Filzmoser, Pison und Rousseeuw (2003) robuste Ladungen und Faktoren über eine robuste alternierende Regression.

2.2 MODELLIERUNG MULTIVARIATER ZEITREIHEN

In diesem Abschnitt werden statistische Begriffe und Konzepte, die für die Analyse seriell korrelierter Beobachtungen benötigt werden, eingeführt, vgl. dazu auch Brillinger (1975), Brockwell und Davis (1991), Hannan (1970) oder Reinsel (1997).

Definition 2.2 (*stochastischer Prozess*)

Ein (vektorieller) stochastischer Prozess ist eine Familie von Zufallsvektoren $\{\mathbf{X}(t, \cdot) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^k, t \in \mathbb{T}\}$ auf einem Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{A}, P) , wobei \mathbb{T} die Indexmenge der Zeitpunkte t bezeichnet. Die Funktionen $\{\mathbf{X}(\cdot, \omega), \omega \in \Omega\}$ auf \mathbb{T} heißen Realisierungen oder Trajektorien des stochastischen Prozesses.

Als Indexmenge \mathbb{T} wird oft \mathbb{N} , \mathbb{Z} oder $[0, \infty)$ gewählt. In der Notation stochastischer Prozesse wird der Hinweis auf deren stochastische Natur in der Regel unterdrückt und stattdessen kurz $\{\mathbf{X}(t), t \in \mathbb{T}\}$ geschrieben. Außerdem werden sowohl die Trajektorie $\mathbf{X}(t)$ eines stochastischen Prozesses als auch vorliegende Daten $\mathbf{x}(t)$, $t = 1, \dots, T$, als *Zeitreihe* bezeichnet.

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit befassen wir uns mit der Analyse k –dimensionaler Zeitreihen $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), \dots, x_k(t))^T \in \mathbb{R}^k, t = 1, \dots, T$. Neben den seriellen Abhängigkeiten jeder einzelnen Komponente $\{X_j(t)\}, j = 1, \dots, k$, müssen bei einer Analyse multivariater stochastischer Prozesse auch Abhängigkeiten zwischen Komponenten $\{X_i(t_1)\}$ und $\{X_j(t_2)\}$ für $i \neq j, t_1, t_2 \in \mathbb{T}$, berücksichtigt werden. Somit ist bei einer Modellierung vektorieller Zeitreihen anstelle von unabhängigen Anpassungen univariater Zeitreihenmodelle an die einzelnen Komponenten der Einsatz echt multivariater Modelle angezeigt, um dem möglicherweise komplexen Erzeugungsmechanismus der beobachteten Zeitreihe gerecht zu werden. Unter der Annahme, dass ein stochastischer Prozess $\{\mathbf{X}(t), t \in \mathbb{T}\}$ endliche erste und zweite Momente besitzt, d. h. $E[X_i^2(t)] < \infty, \forall i, t$, sind Erwartungswert- und Kovarianzfunktion des Prozesses gegeben durch $\boldsymbol{\mu}(t) = E[\mathbf{X}(t)] = (\mu_1(t), \dots, \mu_k(t))^T \in \mathbb{R}^k$ und $\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(t + s, t) = E[(\mathbf{X}(t + s) - \boldsymbol{\mu}(t + s))(\mathbf{X}(t) - \boldsymbol{\mu}(t))^T] = (\gamma_{ij}(t + s, t)) \in \mathbb{R}^{k \times k}$. Ein wichtiges Konzept bei der Modellierung von Zeitreihen ist die Stationarität. Für die starke Stationarität wird gefordert, dass die gemeinsame Verteilung von $(\mathbf{X}(t_1), \dots, \mathbf{X}(t_l))$ und $(\mathbf{X}(t_1 + s), \dots, \mathbf{X}(t_l + s))$ für alle $l \in \mathbb{N}$ und $t_1, \dots, t_l, s \in \mathbb{Z}$ identisch ist. In dieser Arbeit werden wir jedoch eine weniger strikte Form, die schwache Stationarität, zugrunde legen.

Definition 2.3 (*Schwache Stationarität*)

Ein multivariater stochastischer Prozess $\{\mathbf{X}(t), t \in \mathbb{T}\}$ heißt schwach stationär, falls die Mittelwertfunktion $\boldsymbol{\mu}(t)$ und die Kovarianzfunktion $\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(t + s, t)$ von t unabhängig sind, d. h. $\boldsymbol{\mu}(t) = \boldsymbol{\mu}, t \in \mathbb{T}$, (Mittelwertstationarität) und $\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(t + s, t) = \boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s), t \in \mathbb{T}$, (Kovarianzstationarität).

Damit ist unter schwacher Stationarität die Invarianz von Erwartungswert und Kovarianz unter Verschiebungen entlang der Zeitachse zu verstehen. Die Einträge $\gamma_{ii}(s)$ der Hauptdiagonalen von $\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s)$ werden als Autokovarianzen zum Zeitlag s , die Einträge $\gamma_{ij}(s), i \neq j$, als Kreuzkovarianzen zum Lag s bezeichnet. Die Kreuzkovarianzmatrizen $\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s)$ sind nichtnegativ definit, im Sinne von $\sum_{s=1}^n \sum_{u=1}^n \mathbf{a}_s^T \boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s - u) \mathbf{a}_u \geq 0$ für alle positiven $n \in \mathbb{Z}$ und Vektoren $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^k$, aber im allgemeinen für $s \neq 0$ nicht symmetrisch. Stattdessen gilt die Beziehung $\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s)^T = \boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(-s)$. Da für die Auto- und Kreuzkorrelationen $\text{Corr}[X_i(t), X_j(t + s)] = \gamma_{ij}(s)(\gamma_{ii}(0)\gamma_{jj}(0))^{-1/2}$ gilt, ergeben sich die entsprechenden Korrelationsmatrizen gemäß $\boldsymbol{\rho}_{\mathbf{X}}(s) = \mathbf{V}^{-1/2} \boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s) \mathbf{V}^{-1/2}$, wobei $\mathbf{V} = \text{diag}\{\gamma_{11}(0), \dots, \gamma_{kk}(0)\}$.

Das bekannteste Konzept zur Beschreibung zeitlicher Abhängigkeiten im Rahmen von stochastischen Prozessen besteht in der Klasse linearer Zeitreihenmodelle. Hierbei werden zur Darstellung des Erzeugungsmechanismus lineare Filter genutzt. Als linearer Filter wird allgemein eine zeitinvariante Transformation eines m –dimensionalen Prozesses $\{\mathbf{Y}(t), t \in \mathbb{Z}\}$ in einen k –dimensionalen Prozess $\{\mathbf{X}(t), t \in \mathbb{Z}\}$ gemäß

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \mathbf{A}(j) \mathbf{Y}(t - j) \quad (2.1)$$

bezeichnet, wobei $\mathbf{A}(j)$, $j \in \mathbb{Z}$, eine Folge von $k \times m$ -Gewichtsmatrizen bezeichnet. Alternativ wird häufig die Schreibweise mit Hilfe des Backshiftoperators \mathbf{B} verwendet, wobei $\mathbf{B}^j \mathbf{X}(t) = \mathbf{X}(t - j)$, $\forall j \in \mathbb{Z}$, und damit $\mathbf{X}(t) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \mathbf{A}(j) \mathbf{B}^j \mathbf{Y}(t) = \mathbf{A}(\mathbf{B}) \mathbf{Y}(t)$ mit dem zugehörigen Polynom $\mathbf{A}(\mathbf{B})$. Ein Filter heißt *kausal* (oder realisierbar), falls $\mathbf{A}(j) = 0$ für $j < 0$, und *stabil*, falls $\sum_{j=-\infty}^{\infty} \|\mathbf{A}(j)\| \leq \infty$, wobei $\|A\|^2 = \text{tr}(A^\top A)$.

Definition 2.4 (*Weißes Rauschen*)

Ein stochastischer Prozess $\{\boldsymbol{\varepsilon}(t), t \in \mathbb{Z}\}$ heißt weißes Rauschen, falls gilt

$$\mathbf{E}(\boldsymbol{\varepsilon}(t)) = \mathbf{0}, \text{ Var}(\boldsymbol{\varepsilon}(t)) = \mathbf{\Gamma}_\varepsilon \text{ und } \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}(t), \boldsymbol{\varepsilon}(t - s)) = \mathbf{0}, \forall s, t \in \mathbb{Z}, s \neq 0.$$

Die $\boldsymbol{\varepsilon}(t)$ sind damit unkorrelierte Zufallsvektoren mit Erwartungswert $\mathbf{0}$ und identischer Kovarianzmatrix.

Eine weitverbreitete Modellklasse stochastischer Prozesse wird mit folgender Definition erfasst.

Definition 2.5 (*ARMA(p, q)-Prozess*)

Ein k -dimensionaler stochastischer Prozess $\{\mathbf{X}(t), t \in \mathbb{Z}\}$ heißt autoregressiver Moving-Average Prozess mit Ordnungen p und q , kurz: ARMA(p, q)-Prozess, wenn er der Darstellung

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{j=1}^p \boldsymbol{\Phi}(j) \mathbf{X}(t - j) + \sum_{j=0}^q \boldsymbol{\Theta}(j) \boldsymbol{\varepsilon}(t - j) \quad \forall t \in \mathbb{Z}.$$

genügt. Dabei sind $\boldsymbol{\Phi}(1), \dots, \boldsymbol{\Phi}(p), \boldsymbol{\Theta}(1), \dots, \boldsymbol{\Theta}(q)$ $k \times k$ -Matrizen, $\boldsymbol{\Theta}(0) = \mathbf{I}_k$ und $\{\boldsymbol{\varepsilon}(t), t \in \mathbb{Z}\}$ ist k -dimensionales weißes Rauschen.

In Kurzschreibweise werden ARMA(p, q)-Prozesse auch gemäß $\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{B}) \mathbf{X}(t) = \boldsymbol{\Theta}(\mathbf{B}) \boldsymbol{\varepsilon}(t)$ notiert, wobei $\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{B}) = \mathbf{I}_k - \boldsymbol{\Phi}(1)\mathbf{B} - \dots - \boldsymbol{\Phi}(p)\mathbf{B}^p$ und $\boldsymbol{\Theta}(\mathbf{B}) = \mathbf{I}_k + \boldsymbol{\Theta}(1)\mathbf{B} + \dots + \boldsymbol{\Theta}(q)\mathbf{B}^q$. Der Prozess $\{\mathbf{X}(t), t \in \mathbb{Z}\}$ aus (2.5) ist stationär, wenn alle Lösungen der charakteristischen Gleichung $\det\{\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{B})\} = 0$ außerhalb des Einheitskreises liegen. Dann existiert für $\mathbf{X}(t)$ auch eine *kausale* MA(∞)-Darstellung $\mathbf{X}(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \boldsymbol{\zeta}(j) \boldsymbol{\varepsilon}(t - j)$. Falls alle Lösungen des Polynoms $\det\{\boldsymbol{\Theta}(\mathbf{B})\} = 0$ außerhalb des Einheitskreises liegen, so ist der Prozess $\mathbf{X}(t)$ *invertierbar* und es existiert eine AR(∞)-Darstellung $\mathbf{X}(t) = \sum_{j=1}^{\infty} \boldsymbol{\Pi}(j) \mathbf{X}(t - j) + \boldsymbol{\varepsilon}(t)$. Der Prozess $\{\mathbf{X}(t), t \in \mathbb{Z}\}$ heißt ARMA(p, q)-Prozess mit Erwartungswert $\boldsymbol{\mu}$, falls $\mathbf{X}(t) - \boldsymbol{\mu}$ einem ARMA(p, q)-Prozess genügt.

In der Praxis zeigen viele stochastische Prozesse einen Trend im Niveau oder strukturelle Änderungen der Varianz. Häufig können instationäre Zeitreihen mit Hilfe integrierter Prozesse beschrieben werden.

Definition 2.6 (*Integration univariater Prozesse*)

Ein univariater Prozess $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}$ ohne deterministische Komponenten heißt integriert mit der Ordnung d oder $I(d)$, wenn er nach d -maligem Differenzieren $(1 - \mathbf{B})^d \mathbf{X}(t)$ einem invertierbaren MA(∞)-Prozess folgt.

Bei multivariaten Zeitreihen $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^k$, $k > 1$, wird zwischen integrierten und kointegrierten Prozessen unterschieden (Gonzalo und Granger, 1995).

Definition 2.7 (*Integration multivariater Prozesse*)

- (i) Ein Prozess $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^k$, $k > 1$, heißt (gemeinsam) integriert von der Ordnung 1, falls (a) alle Komponenten von $\mathbf{X}(t)$ univariat $I(1)$ sind und (b) $(\mathbf{I} - \mathbf{B})\mathbf{X}(t)$ einem invertierbaren $MA(\infty)$ -Prozess folgt, dessen Koeffizientenmatrizen vollen Rang haben.
- (ii) Ein Prozess $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^k$, $k > 1$, heißt kointegriert mit der Ordnung (d, b) , oder $CI(d, b)$, mit Kointegrationsrang m , falls (a) alle Komponenten von $\mathbf{X}(t)$ univariat $I(d)$ sind und (b) m linear unabhängige Linearkombinationen $\boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{X}(t)$ mit $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{k \times m}$ und $rk(\boldsymbol{\beta}) = m$ existieren, die gemeinsam $I(d - b)$, $d \geq b > 0$, sind.

Im Gegensatz zu gemeinsam integrierten Prozessen kann das multivariate Differenzieren eines kointegrierten Prozesses somit zu einer Form von Überdifferenzierung führen (Reinsel, 1997, Kapitel 2.4).

Hinsichtlich einer Darstellung von Verfahren zur Schätzung der Autokovarianzfunktion und der Modellparameter in Zeitreihenmodellen sowie der Identifikation der Modellordnung sei an dieser Stelle auf die Literatur verwiesen (Box, Jenkins und Reinsel, 1994; Brockwell und Davis, 1991; Reinsel, 1997).

Da Ausreißer zu Modellfehlspezifikationen, verzerrten Schätzern und schlechten Vorhersagen führen können, ist die Erkennung von Ausreißern und Strukturänderungen in Zeitreihen eine wichtige Aufgabe. Die Literatur behandelt hierbei hauptsächlich die retrospektive Analyse univariater Zeitreihen. Wichtige Arbeiten zur Identifikation und Unterscheidung verschiedener Ausreißertypen sind Fox (1972), Tsay (1986, 1988), Chang, Tiao und Chen (1988), Chen und Liu (1993), Justel, Peña und Tsay (2000) und Sánchez und Peña (2003). Diagnostische Verfahren zur Erkennung von Ausreißern in univariaten Zeitreihen betrachten u. a. Abraham und Chuang (1989) und Bianco, Garcia Ben, Martínez und Yohai (2001). Vorschläge zur robusten Schätzung der Modellparameter in univariaten ARIMA-Modellen finden sich bei Denby und Martin (1979), Martin (1979, 1981), Bustos und Yohai (1986), Rousseeuw und Leroy (1987, S. 112 ff) und Masarotto (1987a,b), wobei Martin und Yohai (1986) Influenzfunktionale für Zeitreihen betrachten. Verfahren zur robusten Schätzung der Autokovarianzfunktion behandeln Chan und Wei (1992) und Ma und Genton (2000).

Zur Ausreißererkennung in multivariaten Zeitreihen gibt es meines Wissens nur wenige Veröffentlichungen. Tsay, Peña und Pankratz (2000) verwenden individuelle und gemeinsame Likelihood-Quotienten-Statistiken zur Erkennung von Ausreißern, während Galeano, Peña und Tsay (2004) Projection-Pursuit-Verfahren nutzen, um schließlich in den univariaten Projektionsrichtungen Ausreißer zu entdecken.

Eine elegante Alternative zur Analyse stochastischer Prozesse im Zeitbereich ist eine Analyse im Frequenzbereich, wobei Stationarität und eine ausreichende Länge der multivariaten

Zeitreihe erforderlich sind. Falls die Autokovarianzfunktion $\gamma_{ij}(s) = \text{Cov}[X_i(t), X_j(t+s)]$ für alle $i, j = 1, \dots, k$, und jedes $s \in \mathbb{Z}$ absolut summierbar ist, d. h. falls $\sum_{s=-\infty}^{\infty} |\gamma_{ij}(s)| < \infty$, lässt sich die in der Autokovarianzfunktion $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s)$ enthaltene Information auf äquivalente Weise über die Spektraldichtefunktion $\mathbf{f}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha)$ ausdrücken. Die Spektraldichtematrix $\mathbf{f}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha)$ ist die Fouriertransformierte der Autokovarianzmatrizen $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s)$ des stationären Prozesses $\mathbf{X}(t)$ und berechnet sich gemäß $\mathbf{f}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha) = (2\pi)^{-1} \sum_{s=-\infty}^{\infty} \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s) \exp(-is\alpha)$, $-\infty < \alpha < \infty$. Dies ist eine gerade Funktion mit der Periode 2π und der zugehörigen inversen Transformation

$$\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s) = \int_{-\pi}^{\pi} \mathbf{f}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha) \exp(is\alpha) d\alpha. \quad (2.2)$$

Das (h, j) -te Element der Spektraldichtematrix ist durch $f_{hj}(\alpha) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \gamma_{hj}(s) \exp(-is\alpha)$ bestimmt, wobei $i = \sqrt{-1}$. Es heißt $f_{jj}(\cdot)$ Autospektraldichte oder Spektrum von $X_j(\cdot)$ und $f_{hj}(\alpha)$, $h \neq j$, Kreuzspektrum von $X_h(\cdot)$ und $X_j(\cdot)$. Mit Ausnahme der Diagonalelemente sind die Einträge der Spektraldichtematrix $\mathbf{f}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha)$ im allgemeinen komplex.

Die Fouriertransformation wandelt Faltungen in einfache Produkte um. Für die Spektraldichte von $\mathbf{Y}(t) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \mathbf{A}(s) \mathbf{X}(t-s)$, mit absolut summierbarem Filter $\{\mathbf{A}(s), s \in \mathbb{Z}\}$, gilt

$$\mathbf{f}_{\mathbf{Y}\mathbf{Y}}(\alpha) = \tilde{\mathbf{A}}(\alpha) \mathbf{f}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha) \tilde{\mathbf{A}}^*(\alpha),$$

wobei $\tilde{\mathbf{A}}(\alpha) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \mathbf{A}(s) \exp(-is\alpha)$, $-\infty < \alpha < \infty$, die Transferfunktion des Filters $\{\mathbf{A}(s), s \in \mathbb{Z}\}$ und $*$ die komplexe Konjugation und Transposition bezeichnet.

Für die Schätzung der Spektraldichte einer Zeitreihe der Länge T existieren verschiedene Verfahren (Brillinger, 1975). Direkte Spektraldichteschätzer beruhen auf einer geeigneten Glättung der Periodogramm-Matrizen

$$\mathbf{I}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha) = (2\pi T)^{-1} \tilde{\mathbf{X}}(\alpha) \tilde{\mathbf{X}}^*(\alpha),$$

wobei $\tilde{\mathbf{X}}(\alpha) = \sum_{t=1}^T \mathbf{X}(t) \exp(-it\alpha)$ die Fouriertransformierte der Zeitreihe $\mathbf{X}(t)$ bezeichnet. Für $s, j \in \mathbb{Z}$ ist eine Möglichkeit die Bildung gleitender Mittel über $(2m+1)$ Periodogramm-Matrizen benachbarter Fourierfrequenzen, d. h.

$$\hat{\mathbf{f}}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha) = \begin{cases} (2m+1)^{-1} \sum_{j=-m}^m \mathbf{I}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}\left(\frac{2\pi(s+j)}{T}\right), \\ \quad \text{falls } \alpha \not\equiv 0 \pmod{\pi} \text{ und } (2\pi s - \pi)/T < \alpha \leq (2\pi s + \pi)/T, \\ (2m)^{-1} \sum_{j=1}^m \left\{ \mathbf{I}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}\left(\alpha + \frac{2\pi j}{T}\right) + \mathbf{I}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}\left(\alpha - \frac{2\pi j}{T}\right) \right\}, \\ \quad \text{falls } \alpha \equiv 0 \pmod{2\pi} \text{ oder } \alpha = \pm\pi, \pm 3\pi, \dots \text{ und } T \text{ gerade,} \\ (2m)^{-1} \sum_{j=1}^m \left\{ \mathbf{I}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}\left(\alpha - \frac{\pi}{T} + \frac{2\pi j}{T}\right) + \mathbf{I}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}\left(\alpha + \frac{\pi}{T} - \frac{2\pi j}{T}\right) \right\}, \\ \quad \text{falls } \alpha = \pm\pi, \pm 3\pi, \dots \text{ und } T \text{ ungerade,} \end{cases}$$

wobei $m \rightarrow \infty$ und $m/T \rightarrow 0$ für $T \rightarrow \infty$. Für wachsendes m reduziert sich dabei die asymptotische Varianz des Spektraldichteschätzers, während sich der Bias erhöht.

Eine Alternative sind indirekte Spektraldichteschätzer, die über die Summe geeignet gewichteter Autokovarianzmatrizen berechnet werden

$$\hat{\mathbf{f}}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha_j) = (2\pi)^{-1} \sum_{|s| \leq M} w(s/M) \hat{\mathbf{\Gamma}}_{\mathbf{X}}(s) \exp(-is\alpha_j),$$

wobei $\alpha_j = 2\pi j/(2M+1)$, $j = 0, 1, \dots, 2M$ und $w(x)$ eine gerade, in x stückweise stetige Funktion mit $w(0) = 1$, $|w(x)| \leq 1 \forall x$ und $w(x) = 0$ für $|x| > 1$ ist, vgl. Brockwell und Davis (1991, Kapitel 10.4). Obwohl $M = T$ möglich ist, ist es sinnvoll, M so zu wählen, dass $M \rightarrow \infty$ und $M/T \rightarrow 0$ für $T \rightarrow \infty$. Unter diesen Bedingungen kann gezeigt werden, dass dieser Schätzer für $\mathbf{f}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\cdot)$ im quadratischen Mittel konsistent ist.

In beiden Fällen zeigt Brillinger (1975, Kapitel 7.3 und 7.4) für die Schätzer $\hat{\mathbf{f}}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha_j)$ an den Frequenzen α_j , $j = 1, \dots, J$ die asymptotische Unabhängigkeit, falls $\alpha_h \pm \alpha_j \not\equiv 0 \pmod{2\pi}$, $1 \leq h < j \leq J$.

Auch für die Schätzung im Frequenzbereich existieren robuste Verfahren. Kleiner und Martin (1979) nutzen spektralanalytische Methoden zur Schätzung der AR-Parameter. Tatum und Hurvich (1993a,b) und Choy (2001) behandeln die Filterung bzw. Erkennung von Ausreißern in univariaten Zeitreihen.

Die bisher genannten Ansätze zur Erkennung von Ausreißern in Zeitreihen befassen sich im wesentlichen mit der retrospektiven Analyse von Zeitreihen. In der Intensivmedizin ist jedoch die automatische Online-Erkennung von Artefakten von Interesse. Motiviert durch diese Fragestellung entwickelt Bauer (1997) eine Kontrollkarte zum Monitoring autokorrelierter Daten (vgl. auch Bauer, Gather und Imhoff, 1998; Imhoff, Bauer, Gather und Löhlein, 1998; Gather, Bauer und Fried, 2002). Diese online-fähige Phasenraumkarte beruht auf einer Phasenraumdarstellung der Zeitreihe und nutzt multivariate Ausreißer-Identifizierer (Davies und Gather, 1993; Becker, 1996; Becker und Gather, 1999) zur Erkennung von Artefakten. Eine Erweiterung dieser Prozedur auf multivariate Zeitreihen mit moderater Dimension k ist durch die Wahl höherdimensionaler Phasenräume möglich. Bei zunehmender Dimension der multivariaten Zeitreihen unterliegt sie jedoch dem Fluch der hohen Dimension (Friedman, 1994).

3 VERFAHREN ZUR DIMENSIONSREDUKTION FÜR MULTIVARIATE ZEITREIHEN

Beobachtet werde eine Realisierung eines k -dimensionalen stochastischen Prozesses. Als direkte Verallgemeinerung univariater ARMA-Modelle können die Abhängigkeiten zwischen den Variablen durch ein vektorielles ARMA-Modell (2.5) beschrieben werden (Box, Jenkins und Reinsel, 1994). Bei dieser Modellierung kommt nun erschwerend hinzu, dass für einen vektoriellen Prozess $\mathbf{X}(t)$ möglicherweise verschiedene ARMA-Prozess-Darstellungen existieren und die Parametermatrizen nicht unbedingt identifizierbar sind (Hannan, 1970). Zur geeigneten Beschreibung eines multivariaten Systems wird in Abhängigkeit von der Anzahl k der Komponenten einer multivariaten Zeitreihe und der Modellordnung schnell eine große Anzahl von Parametern benötigt. Die Schätzer dieser Parameter sind zudem oft hoch korreliert (Tiao und Tsay, 1989).

Mit dem Ziel, die große Zahl von Parametern deutlich zu reduzieren und sparsamere vektorielle ARMA-Darstellungen zu finden, wurde daher zunächst das Auffinden sogenannter vereinfachender Strukturen (*engl. simplifying structures*) verfolgt. Diese lassen möglicherweise neue Erkenntnisse über die Abhängigkeitsstrukturen des betrachteten Prozesses zu und können die Interpretation erheblich vereinfachen.

Während Quenouille (1968) zur Konstruktion von Variablen mit einfacheren Eigenschaften die Eigenvektoren der Parametermatrizen ausnutzt, erweitern Box und Tiao (1977) in einer grundlegenden Arbeit Techniken der Hauptkomponentenanalyse auf den Zeitreihenkontext. Hier sind nicht die Linearkombinationen mit maximaler Varianz von Interesse, sondern die Bestimmung derjenigen Linearkombinationen mit maximaler oder minimaler Vorhersagbarkeit. Erstmals wird in dieser Arbeit die Idee der Kointegration, dass Linearkombinationen einer nichtstationären Zeitreihe stationär sein können, diskutiert. Gesucht wird eine lineare Transformation, die die resultierenden Linearkombinationen des Prozesses gemäß ihrer „Vorhersagbarkeit“ ordnet, wobei die ersten Komponenten häufig nahezu nichtstationär sind und die letzten $k - r$ Komponenten nahezu weißes Rauschen darstellen. Unter der Annahme, dass eine stationäre Zeitreihe $\mathbf{X}(t)$ einem $\text{AR}(p)$ -Modell folgt, wird eine Zerlegung in Ein-Schritt-Vorhersage und Vorhersagefehler $\mathbf{X}(t) = \hat{\mathbf{X}}^{(1)}(t-1) + \boldsymbol{\varepsilon}(t)$ betrachtet. Wegen der Unkorreliertheit dieser Terme gilt für die Kovarianz $\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(0) = \boldsymbol{\Gamma}_{\hat{\mathbf{X}}}^{(1)}(0) + \boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(0)$, wobei $\boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(0) = \text{E}[\boldsymbol{\varepsilon}(t)\boldsymbol{\varepsilon}^\top(t)]$ und $\boldsymbol{\Gamma}_{\hat{\mathbf{X}}}^{(1)}(0) = \text{E}[(\hat{\mathbf{X}}^{(1)}(t-1) - \boldsymbol{\mu})(\hat{\mathbf{X}}^{(1)}(t-1) - \boldsymbol{\mu})^\top]$.

Die Richtungen mit maximaler Vorhersagbarkeit ergeben sich damit als Vektoren \mathbf{v}_j , $j = 1, \dots, k$, die sukzessive

$$\lambda = \frac{\mathbf{v}^\top \mathbf{\Gamma}_{\hat{\mathbf{X}}}(0) \mathbf{v}}{\mathbf{v}^\top \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(0) \mathbf{v}}$$

maximieren. Das Problem ist äquivalent zur Eigenvektorbestimmung von $\mathbf{\Gamma}_{\boldsymbol{\varepsilon}}^{-1}(0) \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(0)$, vgl. Galeano und Peña (2000). Die gesuchten Linearkombinationen sind im Fall von unkorrelierten Vorhersagefehlern mit gleicher Varianz, $\mathbf{\Gamma}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(0) = \sigma^2 \mathbf{I}$, gerade die Hauptkomponenten. Der Ansatz von Box und Tiao (1977) entspricht somit einer kanonischen Korrelationsanalyse zwischen aktuellen $\mathbf{X}(t)$ und vorangegangenen Variablen $\mathbf{X}^*(t) = (\mathbf{X}^\top(t-1), \dots, \mathbf{X}^\top(t-p))$, wobei allgemein eine Spektralzerlegung der Matrix $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}^{-1}(0) \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}\mathbf{X}^*}(p) \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}^*}^{-1}(0) \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}\mathbf{X}^*}^\top(p)$ erforderlich ist. Dabei gibt die Anzahl der kanonischen Korrelationen, die Null sind, die Anzahl der Linearkombinationen an, die weißem Rauschen entsprechen.

Viele weitere Ansätze zur Aufdeckung einfacher Strukturen beruhen auf Techniken der kanonischen Korrelationsanalyse. So erzielen Tiao und Tsay (1989) eine Parameterreduktion für vektorielle ARMA-Prozesse mit Hilfe von sogenannten Skalarkomponentenmodellen (SCM), vgl. auch Tiao und Box (1981).

Velu, Reinsel und Wichern (1986), Ahn und Reinsel (1988) und Reinsel und Velu (1998) diskutieren eine Parameterreduktion durch eine Analyse von vektoriellen AR-Modellen, deren Koeffizientenmatrizen $\Phi(j)$ von reduziertem Rang sind (*engl. (nested) reduced-rank AR models*). Die Modelle mit rangreduzierten Koeffizientenmatrizen werden auch als „Daten-reduzierende“ Verfahren für multivariate Zeitreihen interpretiert.

Ein multivariater Prozess $\mathbf{X}(t)$ folge dem speziellen vektoriellen AR(p)-Modell

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{i=0}^{p_2} \sum_{j=0}^{p_1} \mathbf{A}(i) \mathbf{C}(j) \mathbf{X}(t-i-j-1) + \boldsymbol{\varepsilon}(t),$$

wobei $\mathbf{A}(i) \in \mathbb{R}^{k \times r}$, $\mathbf{C}(j) \in \mathbb{R}^{r \times k}$, $1 \leq r \leq k$ und $p = p_1 + p_2 + 1$. In Anlehnung an Velu, Reinsel und Wichern (1986) lassen sich in dieser Modellklasse zwei Spezialfälle formulieren. Für $p_1 = p - 1$ und $p_2 = 0$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathbf{X}(t) &= \mathbf{A}(0) \mathbf{C}(0) \mathbf{X}(t-1) + \dots + \mathbf{A}(0) \mathbf{C}(p-1) \mathbf{X}(t-p) + \boldsymbol{\varepsilon}(t) \\ &= \mathbf{A}(0) \mathbf{C}(\mathbf{B}) \mathbf{X}(t-1) + \boldsymbol{\varepsilon}(t). \end{aligned} \tag{3.1}$$

Mit den Normalisierungsbedingungen aus Velu, Reinsel und Wichern (1986) können für dieses autoregressive multivariate Regressionsmodell von reduziertem Rang die Koeffizientenmatrizen für jede positiv definite Matrix $\mathbf{\Gamma}$ über

$$\mathbf{A}(0) = \mathbf{\Gamma}^{-1/2}(0) \mathbf{V}, \quad \mathbf{C} = \mathbf{V}^\top \mathbf{\Gamma}^{1/2}(0) \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}\mathbf{X}^*}^\top(p) \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}^*}^{-1}(0)$$

mit $\mathbf{V} = (\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_r)$, wobei \mathbf{V}_j den zum j -ten Eigenwert gehörenden normalisierten Eigenvektor von $\mathbf{\Gamma}^{1/2}(0) \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}\mathbf{X}^*}^\top(p) \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}^*}^{-1}(0) \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}\mathbf{X}^*}(p) \mathbf{\Gamma}^{1/2}(0)$ bezeichnet, ausgedrückt werden.

Damit besteht wiederum ein direkter Bezug zur kanonischen Korrelationsanalyse von Box und Tiao (1977).

Mit $p_1 = 0$ und $p_2 = p - 1$ lässt sich schreiben

$$\begin{aligned}\mathbf{X}(t) &= \mathbf{A}(0)\mathbf{C}(0)\mathbf{X}(t-1) + \dots + \mathbf{A}(p-1)\mathbf{C}(0)\mathbf{X}(t-p) + \boldsymbol{\varepsilon}(t) \\ &= \mathbf{A}(\mathbf{B})\mathbf{Z}(t-1) + \boldsymbol{\varepsilon}(t),\end{aligned}\tag{3.2}$$

wobei $\mathbf{Z}(t) = \mathbf{C}(0)\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^{r \times 1}$, $r \leq k$. Die Parameterschätzung im Modell (3.2) betrachtet z. B. Reinsel (1983). Die r -dimensionalen Variablen $\mathbf{Z}(t)$ werden auch als zeitverzögerte Indexvariablen, die den Prozess steuern und möglicherweise sinnvoll interpretiert werden können, aufgefasst. Daher wird Modell (3.2) auch als multivariates autoregressives Indexmodell bezeichnet, vgl. auch Sargent und Sims (1977). Wie die Multiplikation der Modellgleichung (3.2) mit $\mathbf{C}(0)$ zeigt, folgen die Indexvariablen $\mathbf{Z}(t)$ ebenfalls einem $\text{AR}(p)$ -Prozess. Problematisch für die Interpretation der künstlichen Variablen $\mathbf{Z}(t)$ hinsichtlich der beobachteten Größen $\mathbf{X}(t)$ ist, dass der Filter $\mathbf{A}(\mathbf{B})$ vollständig mitbetrachtet werden muss.

Die bisher vorgestellten Ansätze zur Parameterreduktion im Rahmen von multivariaten Zeitreihenmodellen werden auch als Methoden zur Datenreduktion verstanden. Strenggenommen ist hier jedoch eine echte Reduktion der Dimension des beobachteten Prozesses im Sinne der Extraktion der wichtigsten Information von Interesse. Dies ermöglichen die im folgenden vorgestellten Verfahren. Die hierbei benötigte Methodik stützt sich wiederholt auf die bisher angesprochenen Ansätze, wie die kanonische Korrelationsanalyse, insbesondere, weil häufig die Findung geeigneter Linearkombinationen angestrebt wird bzw. die Anzahl benötigter Komponenten bestimmt werden muss.

Voraussetzung für die klassischen dimensionsreduzierenden Verfahren ist, dass die Beobachtungen Realisationen von *unabhängigen* Zufallsvariablen aus einer multivariaten Verteilung darstellen. Im Fall von multivariaten Zeitreihen werden k Variablen wiederholt über die Zeit hinweg an der gleichen Untersuchungseinheit erhoben. Durch die zeitliche Anordnung der Beobachtungen finden sich zum Teil starke Abhängigkeiten vor allem zwischen Datenpunkten mit kleinem Zeitabstand, d. h. $\mathbf{X}(t)$ und $\mathbf{X}(t+s)$ sind für kleines s korreliert. Da denkbar ist, dass zeitversetzte Beobachtungen wichtige Information beisteuern, sollen im weiteren Adaptionen der dimensionsreduzierenden Verfahren für den Zeitreihenkontext betrachtet werden. Tatsächlich ist es in dieser Arbeit von Interesse, mit Hilfe geeigneter statistischer Techniken eine geringe Zahl (möglicherweise neuer) relevanter Komponenten zu extrahieren, welche eine beobachtete multivariate Zeitreihe eigentlich treiben. Ganz allgemein können zeitversetzte Beobachtungen über folgende dimensionsreduzierte Darstellung

$$\mathbf{X}(t) - \boldsymbol{\mu} = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \mathbf{L}(s)\boldsymbol{\xi}(t-s) + \boldsymbol{\varepsilon}(t),\tag{3.3}$$

mit einbezogen werden, wobei $\mathbf{L}(s)$, $s \in \mathbb{Z}$, einen Filter mit Matrizen der Dimension $k \times r$ und $\boldsymbol{\xi}(t)$ einen stochastischen Prozess der Dimension r bezeichnen. Die Idee besteht darin,

dass die Variablen $\boldsymbol{\xi}(t)$ die wenigen Komponenten repräsentieren, die mit der relevanten Information behaftet sind. Jedoch stellt sich hier wieder, sogar in größerem Maße als für den Fall unabhängiger Beobachtungen, das Problem der großen Anzahl unbekannter Größen. Lösungsansätze für diese Problematik werden in diesem Kapitel vorgestellt.

Cattell, Cattell und Rhymer (1947) verwenden erstmals Techniken der Faktoranalyse für zeitreihenähnliche Daten, um in psychologischen „Einzel-Objekt-Studien“ Muster in der intraindividuellen Veränderlichkeit im Zeitverlauf aufzudecken. Bei der als P-Technik bezeichneten Faktoranalyse wird die $(T \times k)$ -Datenmatrix analysiert, wobei T die Anzahl betrachteter Zeitpunkte und k die Anzahl der Variablen bezeichnet. Die resultierenden latenten Variablen erklären näherungsweise die (simultane) Kreuzkovarianzmatrix $\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(0) = \text{Cov}[\mathbf{X}(t)]$ eines multivariaten Prozesses $\{\mathbf{X}(t), t \in \mathbb{Z}\}$. Das Verfahren berücksichtigt jedoch nicht eigens die zeitliche Anordnung der Beobachtungen. Anderson (1963) weist meines Wissens erstmals auf diese Problematik hin und diskutiert einige Schwierigkeiten, die bei der Analyse auftreten können, wie z. B. die Annahme der Unabhängigkeit der Fehlerterme. Nesselroade (1994) bemerkt, dass die Nichtbeachtung der Autokorrelationsstruktur einen erheblichen Einfluss auf die Ergebnisse einer Faktoranalyse haben kann. Wird (3.3) als allgemeine Form eines dynamischen Faktormodells für Zeitreihen aufgefasst, so sind eine Reihe starker Annahmen erforderlich.

Wird kein explizites Modell zugrunde gelegt, so ist die Suche der besten r -dimensionalen Approximation $\boldsymbol{\chi}(t) \in \mathbb{R}^k$ von $\mathbf{X}(t)$ unter Berücksichtigung zeitversetzter Beobachtungen von Interesse. Dies ist die Grundidee einer dynamischen Erweiterung der Hauptkomponentenanalyse, die in Abschnitt 3.2 in ihren verschiedenen Formen vorgestellt wird. Neben den zeitgleichen Abhängigkeiten werden hier auch zeitversetzte Abhängigkeiten und Autokorrelationen zwischen den Komponenten des Zufallsvektors mit einbezogen. Dabei wird $\boldsymbol{\xi}(t)$ aus (3.3) als gefilterte Version des Prozesses $\mathbf{X}(t)$ aufgefasst.

In den folgenden Abschnitten werden aus der Literatur bekannte dynamische Varianten der Faktor- und Hauptkomponentenanalyse vorgestellt und diskutiert.

3.1 FAKTORANALYSE FÜR MULTIVARIATE ZEITREIHEN

Ein dimensionsreduzierendes Verfahren für Zeitreihen unter Berücksichtigung serieller Abhängigkeiten ist eine dynamische Faktoranalyse (DFA). Verschiedene faktoranalytische Modellansätze gingen insbesondere aus ökonometrischen (Geweke, 1977) als auch aus psychometrischen (Molenaar, 1985) Fragestellungen hervor. Mit der Reduktion der Dimension bei der Analyse von Input/Output-Variablen in stochastischen Systemen befassen sich auch Priestley, Rao und Tong (1974). Gemeinsam ist den dynamischen Faktoranalysemodellen (DFM) folgender Modellansatz.

Seien die Daten in weiteren Realisationen einer Zeitreihe $\mathbf{X}(t) = (X_1(t), \dots, X_k(t))^T \in \mathbb{R}^k$ der Länge T . Es wird angenommen, dass $\mathbf{X}(t)$ als Summe von Linearkombinationen von $r < k$ latenten Faktorzeitreihen $\boldsymbol{\xi}(t) = (\xi_1(t), \dots, \xi_r(t))^T$ plus einem k -dimensionalen Vektor $\boldsymbol{\varepsilon}(t) = (\varepsilon_1(t), \dots, \varepsilon_k(t))^T$ spezifischer Faktoren beschrieben werden kann. Wie in (3.3) kann ein dynamisches Faktormodell allgemein gemäß

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \mathbf{L}(s) \boldsymbol{\xi}(t-s) + \boldsymbol{\varepsilon}(t), \quad (3.4)$$

dargestellt werden, wobei $\mathbf{L}(s) = \{l_{ij}(s)\}$ eine reelle $k \times r$ -Faktorladungsmatrix zum Zeitlag s bezeichnet. In der Regel wird Kausalität des Filters angenommen, d. h. $\mathbf{L}(s) = \mathbf{0}$ für $s < 0$, um sicherzustellen, dass aktuelle Beobachtungen nur durch vorangegangene und gegenwärtige Einflüsse beschrieben werden. Zusätzlich werden die folgenden Annahmen getroffen, wobei gleichzeitig einige Notation eingeführt wird.

(B.1) Es sei $\{\mathbf{X}(t), t \in \mathbb{T}\}$ ein k -dimensionaler stationärer stochastischer Prozess mit $E[\mathbf{X}(t)] = \mathbf{0}$ und Kreuzkovarianzfunktion $\text{Cov}[\mathbf{X}(t), \mathbf{X}(t+s)] = \boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s) = \{\gamma_{ij}(s)\}$, $s \in \mathbb{Z}$.

(B.2) Es sei $\{\boldsymbol{\xi}(t), t \in \mathbb{T}\}$ eine stationärer r -dimensionaler latenter Faktorprozess mit $E[\boldsymbol{\xi}(t)] = \mathbf{0}$ und Kreuzkovarianzfunktion $\text{Cov}[\boldsymbol{\xi}(t), \boldsymbol{\xi}(t+s)^T] = \boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\xi}}(s)$, $s \in \mathbb{Z}$.

(B.3) Es sei $\{\boldsymbol{\varepsilon}(t), t \in \mathbb{T}\}$ ein stationärer k -dimensionaler stochastischer Prozess der Störterme mit $E[\boldsymbol{\varepsilon}(t)] = \mathbf{0}$ und $\text{Cov}[\boldsymbol{\varepsilon}(t), \boldsymbol{\varepsilon}(t+s)] = \boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(s) = \text{diag}(\psi_1(s), \dots, \psi_k(s))$, d. h. die spezifischen Fehler sind unkorreliert, aber möglicherweise seriell korreliert.

(B.4) Die latenten Prozesse $\{\boldsymbol{\xi}(t), t \in \mathbb{T}\}$ und $\{\boldsymbol{\varepsilon}(t), t \in \mathbb{T}\}$ sind für alle Zeitabstände $s \in \mathbb{Z}$ unkorreliert.

Mit den Annahmen **(B.1)** – **(B.4)** gilt für die Auto- und Kreuzkovarianzmatrizen $\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s)$ zum Zeitlag s , $s \in \mathbb{Z}$,

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s) = \sum_{v=-\infty}^{\infty} \sum_{w=-\infty}^{\infty} \mathbf{L}(v) \boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\xi}}(s+w-v) \mathbf{L}(w)^T + \boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(s). \quad (3.5)$$

Es ist (3.5) eine Verallgemeinerung des Fundamentallemmas der Faktoranalyse auf dynamische Faktormodelle. Die Kovarianzstruktur der Beobachtungen wird wiederum auf eine geringere Anzahl gemeinsamer latenter Faktoren zurückgeführt. Wie im klassischen Modell der Faktoranalyse sind weitere Restriktionen notwendig, um Identifikationsprobleme zu vermeiden (Geweke und Singleton, 1981; Molenaar, 1985).

Eine sehr allgemeine Erweiterung des statischen Faktormodells und seiner Annahmen auf Modelle mit einem Faktorladungs-Filter $\{\mathbf{L}(s), s \in \mathbb{Z}\}$ formulieren u. a. Sargent und Sims (1977) und Geweke (1977). Dabei wird im DFM (3.4) mit nicht notwendigerweise kausalem Filter die Annahme (B2) verschärft zu

(B.2*) Es sei $\{\boldsymbol{\xi}(t), t \in \mathbb{T}\}$ r -dimensionales weißes Rauschen mit $E[\boldsymbol{\xi}(t)] = \mathbf{0}$ und Autokovarianzmatrix $\boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\xi}}(0) = \mathbf{I}_r$.

Die Kreuzkorrelation zwischen den Komponenten einer beobachteten Zeitreihe ist nach diesem Modell vollständig auf die Filterung des r -dimensionalen Vektors $\boldsymbol{\xi}(t)$ und nicht auf die spezifischen Komponenten zurückzuführen. Für die Kovarianzfunktion (3.5) gilt in diesem Modell

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \mathbf{L}(j)\mathbf{L}(j-s)^{\top} + \boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(s). \quad (3.6)$$

Mit den Annahmen (B.1), (B.2*), (B.3) und (B.4) ist das DFM bis auf Rotationen der Faktoren identifiziert.

In einem konfirmatorischen DFM erlauben Geweke und Singleton (1981) auch seriell und kreuzkorrelierte Faktorprozesse. Für die Fälle mit unkorrelierten und korrelierten Faktoren geben sie jeweils Bedingungen für die Identifizierbarkeit des Modells an.

Die Darstellung und Analyse eines DFMs ist sowohl im Zeit- als auch im Frequenzbereich möglich. Die wichtigsten in der Literatur diskutierten Ansätze mit den zugehörigen Annahmen werden in den folgenden Abschnitten behandelt. Außerdem werden Verbindungen zwischen den verschiedenen Modellen hergestellt.

3.1.1 DYNAMISCHE FAKTORMODELLE IM FREQUENZBEREICH

Ausgangssituation in diesem Abschnitt ist das allgemeine DFM mit den Annahmen (B.1), (B.2*), (B.3) und (B.4). Eine Schätzung der unbekannten Größen ist im Frequenzbereich durchführbar, da sich für stationäre stochastische Prozesse die in der Kreuzkovarianzfunktion enthaltene Information auf äquivalente Weise über die Spektraldichtefunktion ausdrücken lässt. Durch die Fouriertransformation der Faltung aus (3.6) ergibt sich die einfachere Produktdarstellung

$$\mathbf{f}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha) = \tilde{\mathbf{L}}(\alpha)\tilde{\mathbf{L}}(\alpha)^* + \mathbf{f}_{\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}}(\alpha). \quad (3.7)$$

Das Schätzproblem läuft damit wie im Fall der statischen Faktoranalyse für festes α auf die Anpassung einer Matrix der Gestalt (3.7) an die Spektraldichtematrix hinaus. Da die Schätzer der Spektraldichtematrix an verschiedenen Frequenzen asymptotisch unabhängig sind, ist eine getrennte Parameterschätzung an den einzelnen Frequenzen möglich. Dazu können wiederum ML-Verfahren (Geweke, 1977; Geweke und Singleton, 1981; Molenaar, 1987) oder eine Hauptfaktormethode (Jolliffe, 2002; Shumway und Stoffer, 2000) herangezogen werden. Die Bestimmung der Anzahl der gemeinsamen Faktoren ist in Abhängigkeit vom gewählten Schätzverfahren entweder mit Hilfe von Likelihood-Ratio-Tests oder mit Kriterien möglich, die sich an den Eigenwerten der Spektraldichtematrizen orientieren.

Bemerkung 3.1 (*Identifikationsproblem*)

Analog zum Schätzproblem in der statischen Faktoranalyse liefern im Frequenzbereich Rotationen mit unitären Matrizen $\mathbf{U}(\alpha)$ an jeder Frequenz α beobachtungsäquivalente Modelle. Diese Rotationen entsprechen Phasenverschiebungen im Frequenzbereich. Im Zeitbereich

bedeutet dies eine Zeitverzögerung der als weißes Rauschen angenommenen Faktorkomponenten, d. h. für alle s, t und $j = 1, \dots, k$ wird $\xi_j(t-s)$ durch $\xi_j(t-s-\tau_j)$, $\tau_j \in \mathbb{Z}$ beliebiger Zeitlag, ersetzt. Zur Gewinnung eindeutiger Schätzer sind daher (willkürliche) Restriktionen notwendig. Suffiziente Normalisierungsbedingungen im konfirmatorischen DFM nennen Geweke und Singleton (1981). Weitere Ergebnisse zum Identifikationsproblem, zur Stetigkeit, Konsistenz und Äquivalenz sowie der Minimalität und Optimalität dynamischer Faktormodelle finden sich bei Bloch (1989), Heij, Scherrer und Deistler (1997), Picci und Pinzoni (1986) und Scherrer und Deistler (1998).

Bemerkung 3.2 (*Filter der Faktorladungen im Zeitbereich*)

In der Ökonometrie ist oft die Analyse im Frequenzbereich von Interesse, beispielsweise zur Untersuchung von Konjunkturzyklen. Häufig wird daher keine Rücktransformation in den Zeitbereich vorgenommen. Eine inverse Fouriertransformation der geschätzten Ladungsmatrizen an den verschiedenen Frequenzen liefert zwar Faktorladungsfilter im Zeitbereich, jedoch sind diese nicht notwendigerweise kausal. Durch Rotationen der Ladungsmatrizen an jeder Frequenz stellt Molenaar (1987) die Schätzung kausaler Filter sicher. Dabei wird ausgenutzt, dass es innerhalb einer Klasse stabiler Filter mit dem gleichen Gain-Spektrum einen Filter mit minimaler Phasenverschiebung gibt. Über diese ist aber bekannt, dass sie kausal sind (Robinson und Silvia, 1978).

Ein DFM für Prozesse $\{\mathbf{X}_k(t), k \in \mathbb{N}, t \in \mathbb{Z}\}$ mit steigender Variablenzahl, d. h. $k \rightarrow \infty$, diskutieren Forni, Hallin, Lippi und Reichlin (2000a,b, 2003, 2004). Das Ziel der Analyse ist die Trennung von Einflüssen, die auf gemeinsame Zufallsschocks zurückzuführen sind, d. h. $\mathbf{X}_k(t) = \sum_{s=0}^{\infty} \mathbf{L}_k(s)\boldsymbol{\xi}(t-s)$, und den spezifischen Komponenten $\boldsymbol{\varepsilon}_k(t)$. Die Identifikation des Filters und der Faktorschocks ist weder von Interesse noch möglich. Die $\boldsymbol{\varepsilon}_k(t)$ werden nicht notwendigerweise als orthogonal vorausgesetzt, jedoch sind für jedes k und jede Frequenz α die Beschränktheit der Einträge in der Spektraldichtematrix, eine begrenzte dynamische Kreuzkorrelation der spezifischen Komponenten $\boldsymbol{\varepsilon}_k(t)$ und ein Minimum an Kreuzkorrelation zwischen den gemeinsamen Komponenten $\mathbf{X}_k(t)$ erforderlich. Damit handelt es sich um ein approximatives DFM. Zur Schätzung der gemeinsamen und spezifischen Komponenten wird eine Hauptkomponentenanalyse im Frequenzbereich (Brillinger, 1975) genutzt. Nur für den Spezialfall, dass k -dimensionale Zeitreihen mit den gleichen Merkmalen für M , $M \in \mathbb{Z}$, verschiedene Sektoren vorliegen, gelingt Forni und Reichlin (1996, 1998) zusätzlich die Identifikation und Schätzung der treibenden Faktoren.

Fernández-Macho (1997) erweitert das allgemeine DFM auf nichtstationäre Prozesse. Werden die Ladungsmatrizen des Filters auf die spezielle Form $\mathbf{L}(s) = \mathbf{L}\boldsymbol{\Phi}^s$, mit $\boldsymbol{\Phi} \in \mathbb{R}^{r \times r}$, eingeschränkt, so gilt folgende Formulierung als Zustandsraummodell

$$\begin{aligned}\mathbf{X}(t) &= \mathbf{L}\boldsymbol{\mu}(t) + \boldsymbol{\varepsilon}(t) \quad \text{und} \\ \boldsymbol{\mu}(t) &= \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\mu}(t-1) + \boldsymbol{\eta}(t).\end{aligned}\tag{3.8}$$

Solche Modelle, die die Abhängigkeiten zwischen den Komponenten der beobachteten Zeitreihe und die Dynamik des Faktorprozesses durch zwei Modellgleichungen, also getrennt, beschreiben, werden im folgenden Abschnitt diskutiert. Wird $\Phi = \mathbf{I}_r$ angenommen, ist in dieser Darstellung insbesondere der Random Walk $\boldsymbol{\mu}(t)$ als Vektor der gemeinsamen Faktoren von Interesse. Die Parameterschätzung gelingt mit Hilfe von ML-Verfahren im Frequenzbereich. Im Anschluss kann der Kalman-Filter aufgrund der Zustandsraum-Darstellung zur Extraktion der latenten Faktoren genutzt werden.

3.1.2 DYNAMISCHE FAKTORMODELLE IM ZEITBEREICH

Das allgemeine dynamische Faktormodell (3.4) kann auf eine Modellklasse mit kausalen und endlichen Filtern eingeschränkt werden, d. h. $\mathbf{L}(s) = \mathbf{0}$ für $s < 0$ und $s > m \geq 0$. Molenaar (1985) definiert das DFM

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{s=0}^m \mathbf{L}(s) \boldsymbol{\xi}(t-s) + \boldsymbol{\varepsilon}(t), \quad \forall t, \quad (3.9)$$

wobei m ein fester, aber unbekannter Zeitlag ist. Der auf gemeinsame Einflüsse zurückzuführende Anteil der beobachtbaren Zufallsvariablen lässt sich durch Summen von Linearkombinationen aktueller und einer begrenzten Anzahl vergangener Faktorwerte erklären. Die Kovarianzfunktion aus (3.5) reduziert sich damit zu

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s) = \sum_{v=0}^m \sum_{w=0}^m \mathbf{L}(v) \boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\xi}}(s+w-v) \mathbf{L}^T(w) + \boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(s), \quad \forall s. \quad (3.10)$$

Wird ein Zeitfenster von $w+1$ aufeinanderfolgenden Beobachtungen, $w \geq m$, betrachtet, so kann $\mathbf{X}^{[w]}(t)$, wobei $\mathbf{Y}^{[s]}(t) = (\mathbf{Y}^T(t), \dots, \mathbf{Y}^T(t-s))^T$, über ein strukturelles Gleichungssystem als statisches Faktormodell ausgedrückt werden (zur Wahl von w vgl. Molenaar, 1985):

$$\mathbf{X}^{[w]}(t) = \check{\mathbf{L}} \boldsymbol{\xi}^{[w+m]}(t) + \boldsymbol{\varepsilon}^{[w]}(t),$$

wobei

$$\check{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} \mathbf{L}(0) & \mathbf{L}(1) & \dots & \mathbf{L}(m) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{L}(0) & \dots & \mathbf{L}(m-1) & \mathbf{L}(m) & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & & & \dots & \mathbf{L}(m-1) & \mathbf{L}(m) \end{pmatrix}.$$

Damit ergibt sich für die Kovarianzmatrix $\check{\boldsymbol{\Gamma}}_{\mathbf{X}}$ von $\mathbf{X}^{[w]}(t)$

$$\check{\boldsymbol{\Gamma}}_{\mathbf{X}} = \check{\mathbf{L}} \check{\boldsymbol{\Gamma}}_{\boldsymbol{\xi}} \check{\mathbf{L}}^T + \check{\boldsymbol{\Gamma}}_{\boldsymbol{\varepsilon}}, \quad (3.11)$$

mit

$$\check{\Gamma}_{\mathbf{X}} = \{\Gamma_{\mathbf{X}}(j-k); j, k = 1, \dots, w+1\} = \begin{pmatrix} \Gamma_{\mathbf{X}}(0) & \Gamma_{\mathbf{X}}(-1) & \dots & \Gamma_{\mathbf{X}}(-w) \\ \Gamma_{\mathbf{X}}(1) & \Gamma_{\mathbf{X}}(0) & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \Gamma_{\mathbf{X}}(-1) \\ \Gamma_{\mathbf{X}}(w) & \dots & \dots & \Gamma_{\mathbf{X}}(0) \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

und $\check{\Gamma}_{\boldsymbol{\xi}}$ und $\check{\Gamma}_{\boldsymbol{\varepsilon}}$ analog. Aufgrund der Anordnung der simultanen und zeitverschobenen Kovarianzmatrizen $\Gamma_{\mathbf{X}}(s)$ und der Eigenschaft $\Gamma_{\mathbf{X}}(-s) = \Gamma_{\mathbf{X}}(s)^\top$ ist $\check{\Gamma}_{\mathbf{X}}$ eine quadratische, symmetrische Block-Toeplitz-Matrix.

Wegen der Wold-Darstellung kann ein stationärer stochastischer Prozess $\boldsymbol{\xi}(t)$ als $\text{MA}(\infty)$ -Prozess $\boldsymbol{\xi}(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \mathbf{A}(j)\boldsymbol{\eta}(t-j)$ geschrieben werden, wobei $\boldsymbol{\eta}(t)$ weißes Rauschen bezeichnet. Für (3.9) folgt hierbei

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{s=0}^m \mathbf{L}(s) \sum_{j=0}^{\infty} \mathbf{A}(j)\boldsymbol{\eta}(t-j-s) + \boldsymbol{\varepsilon}(t) = \sum_{w=0}^{\infty} \mathbf{L}^*(w)\boldsymbol{\eta}(t-w) + \boldsymbol{\varepsilon}(t), \quad (3.13)$$

mit $\mathbf{L}^*(w) = \sum_{s=0}^m \mathbf{L}(s)\mathbf{A}(w-s)$ und $\mathbf{A}(w) = \mathbf{0}$ für $w < 0$.

Daher sind wie im statischen Faktormodell weitere Restriktionen nötig, um Identifikationsprobleme zu vermeiden. Für die Kovarianzfunktion des Faktorprozesses unterstellt Molenaar (1985, 1987) $\Gamma_{\boldsymbol{\xi}}(0) = \mathbf{I}_r$ und $\Gamma_{\boldsymbol{\xi}}(s) = \mathbf{0}$ für $s \neq 0$, so dass das Modell bis auf Rotationen der Faktoren identifiziert ist. Damit lässt sich das Modell (3.9) auf das DFM von Geweke (1977) mit unkorrelierten gemeinsamen Faktorschocks zurückführen. Anstelle von (3.11) kann das Gleichungssystem $\check{\Gamma}_{\mathbf{X}} = \check{\mathbf{L}}\check{\mathbf{L}}^\top + \check{\Gamma}_{\boldsymbol{\varepsilon}}$ mit Hilfe von Maximum-Likelihood-Verfahren gelöst werden, jedoch unter dem Vorbehalt, dass die Voraussetzung der Unabhängigkeit der Vektoren $\mathbf{X}^{[w]}(t)$ nicht erfüllt ist. Aufgrund einer Monte-Carlo-Studie vermuten Molenaar und Nesselroade (1998) aber, dass die Pseudo-ML-Methode relativ robust gegenüber Abweichungen von der Unabhängigkeitsannahme ist.

Bei der Schätzung ist die Länge des gewählten Zeitfensters w wichtig. Die Dimension r des Faktorprozesses und die Ordnung m sind in der Regel unbekannt. Für eine Modellwahl vergleichen Wood und Brown (1994) verschiedene Anpassungsmaße, u. a. basierend auf dem AIC bzw. BIC. Eine Schätzung der Faktorzeitreihen selbst gelingt rekursiv mit Hilfe des Kalman-Filters, wie Molenaar (1985) im Anhang skizziert. Molenaar, de Gooijer und Schmitz (1992) erweitern das Modell auf nichtstationäre Zeitreihen, indem sie als Faktoren auch deterministische Trends zulassen.

Das approximative Faktormodell $\mathbf{X}^{[w]}(t) = \mathbf{L}\boldsymbol{\xi}^{[q]}(t) + \boldsymbol{\varepsilon}^{[w]}(t)$ mit $w \geq 0$ und \mathbf{L} eine $k(w+1) \times r(q+1)$ -Faktorladungsmatrix von Stock und Watson (1998, 2002) ist mit (3.9) verwandt, wobei geringfügig von Null verschiedene Kreuzkorrelationen zwischen den spezifischen Fehlern erlaubt sind. Sofern k und T groß sind, wobei $k > T$ möglich, ergeben sich mittels einer klassischen Hauptkomponentenanalyse asymptotisch effiziente Vorhersagen für einen

vorgegebenen univariaten Zielprozess $Y(t)$. Da jedoch $k(w+1) \geq r(q+1)$ erforderlich ist, können für kleines k und den wichtigen Spezialfall $w = 0$ nur wenige vergangene Einflüsse der Faktoren in den Vektor $\boldsymbol{\xi}^{[q]}(t)$ aufgenommen werden. Für die vorliegende Arbeit ist dieser Ansatz daher weniger interessant.

Die gemeinsamen latenten Faktoren als unabhängige Zufallschocks anzunehmen, ist in der Praxis oft wenig plausibel. Daher rotieren Molenaar und Nesselrode (2001) den Filter $\{\mathbf{L}^*(s), s \in \mathbb{Z}\}$ der Faktorladungen aus (3.13) im Anschluss an die Schätzung möglichst so, dass sich eine MA-Darstellung des Prozesses der gemeinsamen Faktoren ergibt. Mit der theoretischen Motivation dieser leicht eingeschränkten dynamischen Faktormodelle beschäftigen sich Forni, Hallin, Lippi und Reichlin (2003). In der Modellklasse der approximativen allgemeinen dynamischen Faktormodelle werden solche Modelle betrachtet, deren Faktorladungen durch Polynome beschränkter Ordnung dargestellt werden können. Ausgehend von der Darstellung (3.13) wird angenommen, dass sich der Filter $\mathbf{L}^*(\mathbf{B})$ gemäß $\mathbf{L}^*(\mathbf{B}) = \mathbf{L}(\mathbf{B})[\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{B})]^{-1}$, faktorisieren lässt, wobei $\mathbf{L}(\mathbf{B})$ ein $k \times r$ -Polynom der Ordnung m und $\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{B})$ ein $r \times r$ -Polynom der Ordnung p darstellt und alle Wurzeln von $\det(\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{B}))$ außerhalb des Einheitskreises liegen. Damit resultiert die folgende Klasse dynamischer Faktormodelle

$$\begin{aligned} \mathbf{X}(t) &= \sum_{s=0}^m \mathbf{L}(s) \boldsymbol{\xi}(t-s) + \boldsymbol{\varepsilon}(t) \quad \text{mit} \\ \boldsymbol{\xi}(t) &= \sum_{j=1}^p \boldsymbol{\Phi}(j) \boldsymbol{\xi}(t-j) + \boldsymbol{\eta}(t), \end{aligned} \tag{3.14}$$

d. h. der r -dimensionale Prozess der latenten Faktoren folgt einem $\text{AR}(p)$ -Modell, und die Beobachtungen lassen sich durch die Anwendung eines endlichen Filters auf diesen Faktorprozess darstellen. Die Idee besteht darin, dass die Einflüsse zeitverzögerter Faktoren auf die Variablen durch endliche Filter beschrieben werden können, während die Dynamik des Faktorprozesses getrennt davon im \mathbb{R}^r modelliert wird.

Aus Modell (3.9) bzw. (3.14) ergibt sich für $m = 0$ als Spezialfall eine wichtige Modellklasse, die im weiteren diskutiert wird. Der Filter der Ladungsmatrizen in (3.4) ist hierbei auf Linearkombinationen gegenwärtiger Faktoren beschränkt, d. h. $\mathbf{L}(0) = \mathbf{L}$ und $\mathbf{L}(s) = \mathbf{0}$ sonst. Dies ist eine einfache und naheliegende Verallgemeinerung des klassischen Faktormodells auf Zeitreihen

$$\mathbf{X}(t) = \mathbf{L} \boldsymbol{\xi}(t) + \boldsymbol{\varepsilon}(t). \tag{3.15}$$

Die Kovarianzfunktion (3.5) vereinfacht sich zu

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s) = \mathbf{L} \boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\xi}}(s) \mathbf{L}^{\top} + \boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\varepsilon}}(s) \quad \forall s.$$

Modell (3.15) wird mit unterschiedlichen Annahmen von Peña und Box (1987) sowie Bánkövi, Veliczky und Ziermann (1979) und Márkus und Kovács (1997) diskutiert. Engle und Watson

(1981) betrachten die zugehörige Zustandsraum-Darstellung (3.8) unter möglichem Einbezug exogener Variablen, während Aguilar, Huerta, Prado und West (1998) und Aguilar und West (2000) für die Faktoren auch AR-Prozesse mit zeitveränderlichen Parametern zulassen und einen Bayes'schen Zugang wählen. Genauer betrachtet wird (3.15) hier nur mit den Annahmen von Peña und Box (1987), da dieses Modell im weiteren Verlauf der Arbeit noch von Interesse ist.

(PB.2) Der Faktorprozess $\boldsymbol{\xi}(t) \in \mathbb{R}^r$ folge einem stationären ARMA(p_ξ, q_ξ)-Modell, wobei die charakteristischen Gleichungen der Koeffizientenfilter nur Lösungen außerhalb des Einheitskreises besitzen.

(PB.3) Der Prozess der spezifischen Komponenten $\boldsymbol{\varepsilon}(t)$ sei weißes Rauschen und habe die Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Gamma}_\varepsilon$ von vollem Rang k .

Die gemeinsame dynamische Struktur wird hierbei vollständig durch einen r -dimensionalen Faktorprozess erfasst, während die Abhängigkeiten zwischen den beobachteten Zeitreihen statisch beschrieben werden.

Im Spezialfall mit r unabhängigen Faktoren und diagonalen Koeffizientenmatrizen (Peña und Box, 1987) vereinfacht sich die Kreuzkovarianz für Zeitlags $s \neq 0$ zu

$$\boldsymbol{\Gamma}_\mathbf{X}(s) = \mathbf{L}\boldsymbol{\Gamma}_\xi(s)\mathbf{L}^\top \quad \text{mit} \quad rk(\boldsymbol{\Gamma}_\mathbf{X}(s)) = r.$$

Ist zusätzlich die Kovarianzmatrix des r -dimensionalen weißen Rauschens des Faktorprozesses diagonal, so folgt, dass die Matrizen $\boldsymbol{\Gamma}_\xi(s)$ diagonal sind und damit (i) die Matrizen $\boldsymbol{\Gamma}_\mathbf{X}(s)$ für $s \neq 0$ symmetrisch sind und (ii) die Spalten von \mathbf{L} Eigenvektoren und die Diagonalelemente von $\boldsymbol{\Gamma}_\xi(s)$ die zugehörigen Eigenwerte von $\boldsymbol{\Gamma}_\mathbf{X}(s)$ sind. Diese Eigenschaften können zur Parameterschätzung ausgenutzt werden. Da das Modell in dieser Form nicht identifizierbar ist, wird zusätzlich die (willkürliche) Restriktion $\mathbf{L}^\top \mathbf{L} = \mathbf{I}$ verwendet.

Im Modell mit abhängigen Faktoren wird eine ähnliche Argumentation über eine Spektralzerlegung der Kreuzkovarianzmatrizen mit niedrigen Zeitlags verwendet. Falls der Faktorprozess, entgegen der Annahmen, nicht stationär ist, sind die Eigenwerte und Eigenvektoren der empirischen Autokovarianzmatrizen geringer Zeitlags denen der Kovarianzmatrix zum Zeitlag 0 sehr ähnlich (Tiao und Tsay, 1989). Die Schätzprozedur führt in diesem Fall zu ähnlichen Ergebnissen wie eine statische Hauptkomponentenanalyse.

Das Peña-Box-Modell lässt sich einfach erweitern, indem für den spezifischen Fehler $\boldsymbol{\varepsilon}(t)$ anstelle von weißem Rauschen univariate stationäre ARMA-Prozesse zugelassen werden. Peña und Poncela (2000) erlauben in diesem DFM zusätzlich nichtstationäre ARIMA-Prozesse für den gemeinsamen Faktorprozess $\boldsymbol{\xi}(t)$. Die Prozedur der Faktormodellbildung nutzt wiederum Eigenwerte und -vektoren der generalisierten empirischen Kovarianzmatrizen $\hat{\boldsymbol{\Gamma}}_\mathbf{X}(s) = T^{-2d} \sum (\mathbf{X}(t-s) - \bar{\mathbf{X}})(\mathbf{X}(t) - \bar{\mathbf{X}})^\top$, wobei d die Integrationsordnung bezeichnet. Zur Gewinnung einer geeigneten Startschätzung für die Ladungsmatrix $\mathbf{L}(0)$ schlagen Peña und Box (1987) vor, Repräsentanten der ersten r Eigenvektoren der geschätzten Kreuzkovarianzmatrizen $\hat{\boldsymbol{\Gamma}}_\mathbf{X}(s)$, $s = 1, \dots, s^*$, der multivariaten Zeitreihe zu wählen. Unter den Modellannahmen sind diese Eigenvektoren der Kovarianzmatrizen zu den verschiedenen Zeit-

lags identisch. Wie die repräsentativen Eigenvektoren in der Praxis gewählt werden, wird in der Literatur nicht behandelt.

Da die Eigenvektoren der Autokovarianzmatrizen für größere Zeitlags immer weniger stabil sind, erweist es sich als sinnvoll, für die Schätzung Zeitlags von bis zu etwa $s^* = 5$ zu berücksichtigen. Bei der Schätzung der Ladungsmatrix ist zu bedenken, dass die Eigenvektoren nur bis auf die Multiplikation mit dem Faktor -1 eindeutig sind. Außerdem kann sich die Position der Eigenvektoren für unterschiedliche Zeitlags ändern, falls die Reihenfolge der zugehörigen Eigenwerte aufgrund ähnlicher Größe nicht eindeutig ist.

Im folgenden wird daher eine Prozedur zur Schätzung der Ladungsmatrix vorgeschlagen, die mit diesen Schwierigkeiten umgehen kann:

1. Schätze zunächst für jeden Zeitlag $s = 1, \dots, s^*$ eine Kreuzkovarianzmatrix $\hat{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s)$ der Zeitreihe $\mathbf{X}(t)$.
2. Bestimme für jede der Matrizen $\hat{\Gamma}_{\mathbf{X}}(s)$, $s = 1, \dots, s^*$, die Eigenvektoren, die zu den r größten Eigenwerten gehören und fasse diese in den Matrizen $\hat{\beta}_{(r)}^s$, $s = 1, \dots, s^*$, zusammen.
3. Schätze aus den s^* Basen $\hat{\beta}_{(r)}^s$, $s = 1, \dots, s^*$, eine Basis $\hat{\beta}_{(r)}^{cs}$ des durchschnittlichen r -dimensionalen Unterraums mittels (2.4), vgl. Krzanowski (1979). Die resultierenden Basisvektoren können als die gesuchten Repräsentanten der Eigenvektoren aufgefasst werden, d. h. $\hat{\mathbf{L}}(0) = \hat{\beta}_{(r)}^{cs}$.

Ein Vorteil besteht darin, dass dieses Verfahren für die Spalten der Ladungsmatrix wie gewünscht direkt orthonormale Vektoren liefert.

Anschließend an diese Startschätzungen kann das Modell als Zustandsraummodell (3.8) dargestellt werden, um die Parameter mit ML-Verfahren und dem EM-Algorithmus effizient zu schätzen (Engle und Watson, 1981). Um die Interpretation gefundener Faktoren zu vereinfachen, rotieren Gather, Fried, Lanius und Imhoff (2001) die geschätzten Ladungsmatrizen gemäß des VARIMAX-Kriteriums.

Die Einfachheit des DFMs von Peña und Box (1987) hat den Nachteil, dass nicht beliebig komplexe Abhängigkeitsstrukturen zwischen Faktoren und beobachteten Zeitreihen beschrieben werden können.

Bemerkung 3.3 (*Relation zum allgemeinen dynamischen Faktormodell*)

Im Modell von Peña und Box (1987) kann ein stationärer Faktorprozess durch seine Wold-Darstellung $\boldsymbol{\xi}(t) = \sum_{s=0}^{\infty} \mathbf{A}(s)\boldsymbol{\eta}(t-s)$, wobei $\mathbf{A}(\cdot)$ $r \times r$ -Matrizen sind und $\boldsymbol{\eta}(t)$ r -dimensionales weißes Rauschen ist, ersetzt werden, d. h.

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{s=0}^{\infty} \mathbf{L}\mathbf{A}(s)\boldsymbol{\eta}(t-s) + \boldsymbol{\varepsilon}(t) = \sum_{s=0}^{\infty} \check{\mathbf{L}}(s)\boldsymbol{\eta}(t-s) + \boldsymbol{\varepsilon}(t).$$

Peña und Poncela (2000, 2002) und Galeano und Peña (2000) argumentieren, dass das einfache Modell aus (3.15) somit auch komplexe Abhängigkeiten zwischen den Faktoren und der beobachteten Zeitreihe erfassen kann. Verglichen mit dem allgemeinen DFM von Geweke (1977) ist diese Darstellung jedoch restriktiv, da für alle $s \in \mathbb{Z}$ die Bedingung $\check{\mathbf{L}}(s) = \mathbf{L}\mathbf{A}(s)$ erfüllt sein muss. Das Peña–Box–Modell beschreibt ein DFM, dessen Faktorprozess die gemeinsame Dynamik enthält, während die Abhängigkeiten zwischen den Zeitreihen durch die statische Ladungsmatrix \mathbf{L} erfasst werden.

Bemerkung 3.4 (*Bezug zur kanonischen Korrelationsanalyse*)

Es gelte das dynamische Faktormodell von Peña und Box (1987). Mit der Matrix $\mathbf{L}_\perp \in \mathbb{R}^{(k-r) \times k}$, die den Raum orthogonal zu \mathbf{L} aufspannt, so dass $\mathbf{L}_\perp \mathbf{L} = \mathbf{0}$, folgt $\mathbf{L}_\perp \mathbf{X}(t) = \mathbf{L}_\perp \boldsymbol{\varepsilon}(t)$. Damit sind $k - r$ kanonische Korrelationen zwischen $\mathbf{X}(t)$ und $\mathbf{X}^*(t) = (\mathbf{X}^\top(t - 1), \dots, \mathbf{X}^\top(t - p))$ gleich Null. Diese Beziehung wird von vielen der Tests auf die Anzahl r der gemeinsamen Faktoren genutzt, vgl. auch Peña und Poncela (2002).

In der Literatur werden für Modell (3.15) zahlreiche Erweiterungen behandelt. Quah und Sargent (1993) verallgemeinern das allgemeine DFM auf möglicherweise (ko-)integrierte Zeitreihen mit $k \approx T$ oder $k > T$, indem für die Komponenten des Faktorprozesses orthogonale Random Walks unterstellt werden (Harvey, 1989). Die Parameterschätzung erfolgt im Zeitbereich mit Hilfe von Kleinste-Quadrate-Projektionen und dem EM-Algorithmus.

Stock und Watson (1988) und Gonzalo und Granger (1995) behandeln kointegrierte Zeitreihen (Engle und Granger, 1987) und modellieren die beobachtete Zeitreihe als Summe aus Linearkombination weniger Random Walks mit deterministischen Trends und stationären Komponenten. Ein Test auf die Anzahl gemeinsamer „features“, d. h. gemeinsamen Eigenschaften der Daten wie serielle Korrelation, Trends, Heteroskedastizität oder ähnliches, findet sich auch bei Engle und Kozicki (1993). Escribano und Peña (1994) zeigen, wie sich die Darstellung mit gemeinsamen Trends für kointegrierte Variablen als Spezialfall des DFMs (3.15) auffassen lässt. So entspricht die Anzahl der Kointegrationsbeziehungen zwischen den Komponenten einer k -dimensionalen Zeitreihe gerade k minus der Anzahl der nichtstationären gemeinsamen Faktoren.

Darüber hinaus gibt es auch Erweiterungen auf Zeitreihen mit dynamischer Heteroskedastizität (Diebold und Nerlove, 1989; Demos und Sentana, 1998; Harvey, Ruiz und Sentana, 1992; Sentana, 1998; Sentana und Fiorentini, 2001). Hierzu kann eine Formulierung als Zustandsraummodell mit ARCH-Effekten in den gemeinsamen Faktoren genutzt werden, wobei eine Schätzung über den EM-Algorithmus erfolgen kann.

3.1.3 EM-ALGORITHMUS ZUR SCHÄTZUNG DYNAMISCHER FAKTORMODELLE

Zur Berechnung von ML-Schätzern der Parameter in dynamischen Faktormodellen und zur gleichzeitigen Bestimmung von Schätzwerten der latenten Faktorzeitreihen im Zeitbereich

bietet sich der EM-Algorithmus an. Allgemein ist der EM-Algorithmus (Dempster, Laird und Rubin, 1977; Wu, 1983) ein nützliches Prinzip zur Maximierung der möglicherweise komplizierten Likelihoodfunktion in dynamischen Modellen mit fehlenden bzw. unbeobachteten Variablen. Watson und Engle (1983) diskutieren den EM-Algorithmus u. a. zur Parameterschätzung in dynamischen Faktormodellen, wobei diese in Form eines Zustandsraummodells ausgedrückt werden, d. h.

$$\begin{aligned}\mathbf{X}(t) &= \mathbf{A}\mathbf{Z}(t) + \boldsymbol{\varepsilon}(t) \quad (\text{Beobachtungsgleichung}) \\ \mathbf{Z}(t) &= \boldsymbol{\Phi}\mathbf{Z}(t-1) + \boldsymbol{\eta}(t) \quad (\text{Zustandsgleichung})\end{aligned}\tag{3.16}$$

mit den Annahmen, dass $\boldsymbol{\varepsilon}(t)$ und $\boldsymbol{\eta}(t)$ unabhängig sind mit

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}(t) \\ \boldsymbol{\eta}(t) \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Gamma}_\varepsilon & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\Gamma}_\eta \end{pmatrix}\right) \quad \text{und} \\ \mathbf{Z}(0) \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_0, \boldsymbol{\Omega}_0) \quad (\text{Initialisierung}).$$

Dabei bezeichne $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^k$ beobachtbare Zufallsvektoren und $\mathbf{Z}(t) \in \mathbb{R}^d$ nicht beobachtbare Zustände. Durch die Zustandsgleichung wird die autoregressive Struktur der latenten Faktoren beschrieben, wobei Modelle höherer Ordnung durch eine Erweiterung der Dimension des Zustandvektors erfasst werden. Im folgenden wird davon ausgegangen, dass die unbekannten Modellparameter $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\Phi}, \boldsymbol{\Gamma}_\eta, \mathbf{A}, \boldsymbol{\Gamma}_\varepsilon)$ zeitinvariant sind. Die Likelihoodfunktion der unbekannten Parameter $\boldsymbol{\theta}$ ist gegeben als $-2 \ln L_{\mathbf{X}}(\boldsymbol{\theta}) = \text{const.} + \sum_{t=1}^T (\ln |\boldsymbol{\Sigma}_t| + \boldsymbol{\nu}(t)^\top \boldsymbol{\Sigma}_t^{-1} \boldsymbol{\nu}(t))$, wobei sowohl die Innovationen $\boldsymbol{\nu}(t) = \mathbf{X}(t) - \mathbb{E}[\mathbf{X}(t) | \mathbf{X}(t-1), \dots, \mathbf{X}(1)]$ als auch deren Varianz $\boldsymbol{\Sigma}_t = \text{Var}(\boldsymbol{\nu}(t))$ von $\boldsymbol{\theta}$ abhängen. Wegen der komplizierten Form, in der die Parameter $\boldsymbol{\theta}$ in die Likelihood eingehen, ist deren Schätzung schwierig. Ein Ausweg besteht darin, zunächst anzunehmen, dass zusätzlich zu den beobachtbaren Zufallsvektoren $\underline{\mathbf{X}}_T = \{\mathbf{X}(1), \dots, \mathbf{X}(T)\}$ auch die Zustände $\underline{\mathbf{Z}}_T = \{\mathbf{Z}(0), \dots, \mathbf{Z}(T)\}$ beobachtbar sind. Die gemeinsame Dichte von $\{\underline{\mathbf{Z}}_T, \underline{\mathbf{X}}_T\}$ lautet

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\underline{\mathbf{Z}}_T, \underline{\mathbf{X}}_T) = f_{\boldsymbol{\mu}_0, \boldsymbol{\Omega}_0}(\mathbf{Z}(0)) \prod_{t=1}^T f_{\boldsymbol{\Phi}, \boldsymbol{\Gamma}_\eta}(\mathbf{Z}(t) | \mathbf{Z}(t-1)) \prod_{t=1}^T f_{\mathbf{A}, \boldsymbol{\Gamma}_\varepsilon}(\mathbf{X}(t) | \mathbf{Z}(t)).$$

Die zugehörige Likelihoodfunktion für die vollständig beobachteten Daten ist, bis auf konstante Faktoren, gegeben durch

$$\begin{aligned}-2 \ln L_{\mathbf{X}, \mathbf{Z}}(\boldsymbol{\theta}) &= \text{const.} + \ln |\boldsymbol{\Omega}_0| + (\mathbf{Z}(0) - \boldsymbol{\mu}_0)^\top \boldsymbol{\Omega}_0^{-1} (\mathbf{Z}(0) - \boldsymbol{\mu}_0) \\ &+ \ln |\boldsymbol{\Gamma}_\eta| + \sum_{t=1}^T (\mathbf{Z}(t) - \boldsymbol{\Phi}\mathbf{Z}(t-1))^\top \boldsymbol{\Gamma}_\eta^{-1} (\mathbf{Z}(t) - \boldsymbol{\Phi}\mathbf{Z}(t-1)) \\ &+ \ln |\boldsymbol{\Gamma}_\varepsilon^{-1}| + \sum_{t=1}^T (\mathbf{X}(t) - \mathbf{A}\mathbf{Z}(t))^\top \boldsymbol{\Gamma}_\varepsilon^{-1} (\mathbf{X}(t) - \mathbf{A}\mathbf{Z}(t)).\end{aligned}$$

Für vollständig beobachtete Daten könnten somit einfach ML-Schätzer für $\boldsymbol{\theta}$ hergeleitet werden. Zur Bestimmung der ML-Schätzer für $\boldsymbol{\theta}$ auf Basis der unvollständigen, aber beobachtbaren Zufallsvektoren $\underline{\mathbf{X}}_T$ eignet sich der EM-Algorithmus. Bei diesem zweischrittigen iterativen Verfahren ist sukzessive die bedingte Erwartung der Likelihood der vollständigen Daten bis zur Konvergenz zu maximieren. Zunächst sind eine Initialisierung für $\boldsymbol{\mu}_0$ und $\boldsymbol{\Omega}_0$ und Startwerte $\boldsymbol{\theta}^{(0)}$ für $\boldsymbol{\theta}$ festzulegen. In der j -ten Iteration werden im E-Schritt (Erwartung), bedingt auf den Beobachtungen und den Parametern $\boldsymbol{\theta}^{(j-1)}$, Schätzer der benötigten suffizienten Statistiken berechnet, wobei die Funktion $Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}^{(j-1)}) = \mathbb{E}\{-2 \ln L_{\mathbf{X}, \mathbf{Z}}(\boldsymbol{\theta})|\underline{\mathbf{X}}_T, \boldsymbol{\theta}^{(j-1)}\}$ ausgewertet wird. Zur Berechnung der bedingten Erwartung und der Schätzwerte für die Zustände bietet sich der Kalman-Filter und -Glätter (vgl. Anhang A) an.

Im M-Schritt (Maximierung) werden die geschätzten Werte für die Zustände als beobachtet aufgefasst. Aus der Maximierung der Likelihood für die vollständigen Daten, d. h. der Minimierung der Funktion $Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}^{(j-1)})$, resultiert der aktuelle Parameterschätzer $\boldsymbol{\theta}^{(j)}$. Dabei lautet die bedingte Erwartung in der j -ten Iteration (vgl. auch Shumway und Stoffer, 2000)

$$\begin{aligned} Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}^{(j-1)}) = & \ln |\boldsymbol{\Omega}_0| + \text{tr} \{ \boldsymbol{\Omega}_0^{-1} (\boldsymbol{\Omega}(0|T) + (\mathbf{Z}(0|T) - \boldsymbol{\mu}_0)(\mathbf{Z}(0|T) - \boldsymbol{\mu}_0)^\top) \} \\ & + \ln |\boldsymbol{\Gamma}_\eta| + \text{tr} \{ \boldsymbol{\Gamma}_\eta^{-1} (\mathbf{S}_t(0) - \mathbf{S}_t(1)\boldsymbol{\Phi}^\top - \boldsymbol{\Phi}\mathbf{S}_t^\top(1) + \boldsymbol{\Phi}\mathbf{S}_{t-1}(0)\boldsymbol{\Phi}^\top) \} \\ & + \ln |\boldsymbol{\Gamma}_\epsilon| + \text{tr} \left\{ \boldsymbol{\Gamma}_\epsilon^{-1} \sum_{t=1}^T ((\mathbf{X}(t) - \mathbf{A}\mathbf{Z}(t|T))(\mathbf{X}(t) - \mathbf{A}\mathbf{Z}(t|T))^\top + \mathbf{A}\boldsymbol{\Omega}(t|T)\mathbf{A}^\top) \right\} \end{aligned} \quad (3.17)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_t(0) &= \sum_{t=1}^T (\mathbf{Z}(t|T)\mathbf{Z}(t|T)^\top + \boldsymbol{\Omega}(t|T)) \\ \mathbf{S}_t(1) &= \sum_{t=1}^T (\mathbf{Z}(t|T)\mathbf{Z}(t-1|T)^\top + \boldsymbol{\Omega}(t, t-1|T)) \\ \mathbf{S}_{t-1}(0) &= \sum_{t=1}^T (\mathbf{Z}(t-1|T)\mathbf{Z}(t-1|T)^\top + \boldsymbol{\Omega}(t-1|T)). \end{aligned}$$

Diese Funktion zerfällt in Summanden, die für die Parameter $(\boldsymbol{\Phi}, \boldsymbol{\Gamma}_\eta)$ sowie $(\mathbf{A}, \boldsymbol{\Gamma}_\epsilon)$ getrennt voneinander minimiert werden können. Dabei genügen einfache multivariate lineare Regressionen, so dass

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Phi}^{(j)} &= \mathbf{S}_t(1)\mathbf{S}_t^{-1}(0) \\ \boldsymbol{\Gamma}_\eta^{(j)} &= T^{-1}(\mathbf{S}_t(0) - \mathbf{S}_t(1)\mathbf{S}_{t-1}(0)\mathbf{S}_t^\top(1)) \\ \mathbf{A}^{(j)} &= (\mathbf{S}_t^{-1}(0) \underline{\mathbf{Z}}_{t|T}^\top \underline{\mathbf{X}}_T)^\top \\ \boldsymbol{\Gamma}_\epsilon^{(j)} &= T^{-1} \sum_{t=1}^T \left((\mathbf{X}(t) - \mathbf{A}^{(j)}\mathbf{Z}(t|T))(\mathbf{X}(t) - \mathbf{A}^{(j)}\mathbf{Z}(t|T))^\top + \mathbf{A}^{(j)}\boldsymbol{\Omega}(t|T)\mathbf{A}^{(j)} \right) \end{aligned}$$

Der Wert der Likelihoodfunktion $L_{\mathbf{X}}(\boldsymbol{\theta})$ wächst monoton mit jeder Iteration, und das Verfahren konvergiert gegen ein lokales Maximum (Dempster, Laird und Rubin, 1977; Wu, 1983).

Zur Findung des globalen Maximums ist es ratsam, verschiedene Initialisierungen und Startwerte zu wählen und die Iterationen zu wiederholen. Der EM-Algorithmus wurde hier nur für zeitinvariante Parameter vorgestellt. Es existieren auch allgemeinere Formen für Modelle, in denen die Matrizen in $\boldsymbol{\theta}$ von der Zeit abhängen.

Das dynamische Faktormodell ist zur Schätzung der Parameter zuerst als Zustandsraummodell zu formulieren. Für das relativ allgemeine DFM aus (3.14) lautet die Beobachtungsgleichung mit $c = \max\{m + 1, p\}$ dann

$$\mathbf{X}(t) = [\mathbf{L}(0)\mathbf{L}(1) \dots \mathbf{L}(c-1)] \begin{bmatrix} \boldsymbol{\xi}(t) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\xi}(t-c+1) \end{bmatrix} + \boldsymbol{\varepsilon}(t).$$

Der Zustandsvektor $\mathbf{Z}(t) = (\boldsymbol{\xi}^\top(t), \dots, \boldsymbol{\xi}^\top(t-c+1))^\top \in \mathbb{R}^d$ enthält die Werte der Faktorzeitreihen von c aufeinanderfolgenden Zeitpunkten mit $d = cr$. Die Matrix \mathbf{A} lautet $\mathbf{A} = [\mathbf{L}(0)\mathbf{L}(1) \dots \mathbf{L}(c-1)]$ mit $\mathbf{L}(m+1) = \dots = \mathbf{L}(c-1) = \mathbf{0}$. Die Zustandsgleichung ist gegeben durch

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\xi}(t) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\xi}(t-c+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Phi}(1) & \boldsymbol{\Phi}(2) & \dots & \boldsymbol{\Phi}(p) & \mathbf{0}_{r \times (c-p)r} \\ & \mathbf{I}_{(c-1)r} & & & \mathbf{0}_{(c-1)r \times r} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\xi}(t-1) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\xi}(t-c) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{\eta}(t) \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}.$$

3.2 HAUPTKOMPONENTENANALYSE FÜR MULTIVARIATE ZEITREIHEN

Um für einen stochastischen Prozess $\mathbf{X}(t)$ eine Darstellung (3.3) mit wenigen latenten Komponenten zu finden, wurden bisher modellbasierte Ansätze betrachtet. Ist indessen die beste r -dimensionale Approximation $\boldsymbol{\chi}(t)$ von $\mathbf{X}(t)$ im Sinne von (2.2) von Interesse, so liefert die statische Hauptkomponentenanalyse aus Abschnitt 2.1.1 die Lösung zu diesem Minimierungsproblem. Die serielle Anordnung der Beobachtungen und damit deren zeitliche Abhängigkeit wird hierbei nicht berücksichtigt, deskriptive Aussagen sind aber immer noch möglich. Statistische Schlüsse, für die zusätzlich eine multivariate Normalverteilung benötigt wird, können in der Regel nicht gezogen werden (Jolliffe, 2002). Im Fall von stark autokorrelierten Beobachtungen nimmt zudem die effektive Stichprobengröße deutlich ab.

Erweiterungen der Techniken der Hauptkomponentenanalyse auf autokorrelierte Beobachtungen stammen aus unterschiedlichen Anwendungsbereichen mit jeweils eigener Zielsetzung. Verallgemeinerungen für Daten in Form von (Wachstums-)Kurven oder Funktionen („principal curves“) sind in dieser Arbeit weniger von Interesse. Hier wird das gleiche Merkmal zu vergleichbaren Zeitpunkten (bezüglich einer Referenz) an k verschiedenen Untersuchungseinheiten beobachtet. Adaptionen der Hauptkomponentenanalyse auf multivariate Zeitreihen werden im folgenden vorgestellt.

Motiviert durch Fragestellungen aus der Klimatologie existiert eine Vielzahl von Erweiterungen der Hauptkomponentenanalyse auf komplexe Raum–Zeit–Prozesse (Jolliffe, 2002). Dabei wird sowohl die zeitliche als auch die räumliche Korrelation zwischen den Beobachtungen berücksichtigt, weniger mit dem Ziel, die Dimension zu reduzieren, als vielmehr Muster oder Signale mit maßgeblichen Periodizitäten oder interessante räumliche Muster zu entdecken. Auf eine ausführlichere Diskussion wird daher, zugunsten eines kurzen Überblicks mit Querverbindungen zu ähnlichen Ansätzen, verzichtet.

Ein ursprünglich für die Analyse univariater Zeitreihen gedachtes Verfahren ist die Singularspektrumanalyse (SSA; Danilov, 1997; Golyandina, Nekrutin und Zhigljavsky, 2001). Diese Methode versucht, sich überlagernde Prozesse zu trennen, wobei anstelle eines univariaten Signals möglichenfalls mehrere Signale mit unterschiedlichen dominanten Periodizitäten extrahiert werden. Dabei erfolgt eine Spektralzerlegung der Kovarianz der sogenannten Trajektionsmatrix, deren Spalten die zeitversetzten Beobachtungen eines Datenfensters der univariaten Zeitreihe enthalten. Die Erweiterung dieses Verfahrens auf multivariate Zeitreihen, die Multichannel SSA (Plaut und Vautard, 1994), auch „extended empirical orthogonal function analysis“, ermöglicht die Entdeckung verschiedenartiger räumlicher oszillierender Muster mit gleichen aber auch unterschiedlichen Perioden. Wegen der oft sehr hohen Dimension der zugehörigen Block–Toeplitz–Matrix der Autokovarianzmatrizen wird alternativ eine MSSA von wenigen statischen Hauptkomponenten der multivariaten Zeitreihe vorgeschlagen.

Auch die modellbasierte „principal oscillation pattern analysis“ zielt auf die Erkennung räumlicher Oszillationsmuster ab (Hasselmann, 1988). Unter der Annahme, dass ein Prozess $\mathbf{X}(t)$ einem AR(1)–Modell folgt, wird eine Spektralzerlegung der Koeffizientenmatrix $\Phi = \Gamma_{\mathbf{X}}(1)\Gamma_{\mathbf{X}}^{-1}(0)$ des AR–Modells vorgenommen. Eine graphische Analyse der reellen und imaginären Anteile der resultierenden Eigenvektoren gibt Aufschluss über die räumliche Struktur.

In einer grundlegenden Arbeit verallgemeinert Brillinger (1975) die Idee, die beste r –dimensionale Approximation der Daten zu suchen, auf den Zeitreihenkontext. In der Darstellung (3.3) werden die unbekannten Komponenten $\xi(t)$ als gefilterte Version des Prozesses $\mathbf{X}(t)$ aufgefasst. Dieser Ansatz wird in Abschnitt 3.2.1 genauer vorgestellt und diskutiert.

Techniken der Hauptkomponentenanalyse werden auch in der multivariaten statistischen Prozesskontrolle eingesetzt und für die Überwachung dynamischer Prozesse auf autokorrelierte Beobachtungen erweitert. Insbesondere in der Situation des Online–Monitorings sind diese Ansätze interessant, da sie die Kontrolle der Prozesse in Echtzeit mit statistischen Verfahren zur Dimensionsreduktion verbinden. Einen Überblick über bestehende Verfahren und die zusätzlichen Probleme in der Online–Situation gibt Abschnitt 3.2.2.

3.2.1 BRILLINGERS HAUPTKOMPONENTENANALYSE IM FREQUENZBEREICH

Brillingers (1975) Hauptkomponentenanalyse für Zeitreihen im Frequenzbereich approximiert eine stationäre multivariate Zeitreihe durch eine gefilterte Version ihrer selbst, wobei der Filter von geringerem Rang ist als die ursprüngliche Zeitreihe. Während eine klassische Hauptkomponentenanalyse, angewendet auf Zeitreihen, Hauptkomponenten liefert, die Linearkombinationen von zum gleichen Zeitpunkt gemessenen Variablen sind, konstruiert Brillinger die Hauptkomponentenreihen $\boldsymbol{\xi}(t) \in \mathbb{R}^r$ durch eine geeignete Filterung der gesamten Zeitreihe $\mathbf{X}(t)$ wie folgt

$$\boldsymbol{\xi}(t) = \sum_s \mathbf{B}(s) \mathbf{X}(t-s), \quad t = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.18)$$

Das Ziel ist die Minimierung des Approximationsfehlers

$$\boldsymbol{\epsilon}(t) = \mathbf{X}(t) - \sum_s \mathbf{C}(s) \boldsymbol{\xi}(t-s) = \mathbf{X}(t) - \boldsymbol{\chi}(t), \quad t = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

wobei $\{\mathbf{B}(s), s \in \mathbb{Z}\}$ und $\{\mathbf{C}(s), s \in \mathbb{Z}\}$ jeweils $r \times k$ - bzw. $k \times r$ -dimensionale Filter darstellen. Die in (3.18) definierten Hauptkomponentenreihen stellen Summen von Linearkombinationen aus vergangenen, derzeitigen und *zukünftigen* Beobachtungen der Zeitreihe dar, da keine Kausalität des Filters $\{\mathbf{B}(s), s \in \mathbb{Z}\}$ gefordert wird. Eine Lösung des Minimierungsproblems liefert der folgende Satz (Brillinger, 1975):

Satz 3.1 *Bezeichne $\boldsymbol{\mu}_\mathbf{X}$ den Erwartungswert einer k -dimensionalen stationären Zeitreihe $\mathbf{X}(t)$ mit absolut summierbarer Autokovarianzfunktion und der zugehörigen Spektraldichtefunktion $\mathbf{f}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha)$, $-\infty < \alpha < \infty$. Dann wird der erwartete quadratische Approximationsfehler*

$$\min_{\{\mathbf{B}(s)\}, \{\mathbf{C}(s)\}} \mathbb{E} \left[\left(\mathbf{X}(t) - \sum_s \mathbf{C}(s) \boldsymbol{\xi}(t-s) \right)^* \left(\mathbf{X}(t) - \sum_s \mathbf{C}(s) \boldsymbol{\xi}(t-s) \right) \right], \quad (3.19)$$

minimiert durch

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_\boldsymbol{\xi} &= \boldsymbol{\mu}_\mathbf{X} - \left(\sum_s \mathbf{C}(s) \right) \left(\sum_u \mathbf{B}(u) \right) \boldsymbol{\mu}_\mathbf{X}, \\ \mathbf{B}(s) &= (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} \tilde{\mathbf{B}}(\alpha) \exp(is\alpha) d\alpha, \\ \mathbf{C}(s) &= (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} \tilde{\mathbf{C}}(\alpha) \exp(is\alpha) d\alpha, \end{aligned} \quad (3.20)$$

wobei

$$\tilde{\mathbf{B}}(\alpha) = \begin{bmatrix} \mathbf{l}_1(\alpha)^* \\ \vdots \\ \mathbf{l}_r(\alpha)^* \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{C}}(\alpha) = [\mathbf{l}_1(\alpha), \dots, \mathbf{l}_r(\alpha)] = \tilde{\mathbf{B}}(\alpha)^*.$$

Dabei bezeichnet $\mathbf{l}_j(\alpha)$ einen normierten (dynamischen) Eigenvektor, der zum j -ten (dynamischen) Eigenwert $\lambda_j(\alpha)$ der Spektraldichtematrix $\mathbf{f}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha)$, $\alpha \in [0, 2\pi]$ gehört, wobei $\lambda_1(\alpha) \geq \lambda_2(\alpha) \geq \dots \geq \lambda_k(\alpha) \geq 0$ und \mathbf{q}^* für das komplex Konjugierte und Transponierte zu $\mathbf{q} \in \mathbb{C}^k$ steht. Es ist $\mu_{\boldsymbol{\xi}}$ der Erwartungswert von $\boldsymbol{\xi}(t)$.

Beweis siehe Brillinger (1975). □

Über die dynamischen Eigenwerte ausgedrückt, beträgt das Minimum von (3.19)

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\epsilon}(t)^\top \boldsymbol{\epsilon}(t)] = \int_0^{2\pi} \sum_{j=r+1}^k \lambda_j(\alpha) d\alpha. \quad (3.21)$$

Mit dem Filter aus (3.20) resultiert die Hauptkomponentenreihe $\boldsymbol{\xi}(t)$ mit Spektraldichtefunktion $\mathbf{f}_{\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}}(\alpha) = \text{diag}(\lambda_1(\alpha), \dots, \lambda_r(\alpha))$, $\alpha \in [0, 2\pi]$. Daraus folgt, dass $\boldsymbol{\xi}_i(t)$ und $\boldsymbol{\xi}_j(t)$ für $i \neq j$ an allen Frequenzen Kohärenz 0 haben und damit die Unkorreliertheit der Hauptkomponentenreihen an allen Zeitlags. Grundsätzlich ist Brillingers Hauptkomponentenanalyse für Zeitreihen im Frequenzbereich äquivalent zur Durchführung einer klassischen Hauptkomponentenanalyse an jeder einzelnen Frequenz für festes r .

Bemerkung 3.5 (Verwandte Techniken)

- (i) Zur Analyse von Raum–Zeit–Prozessen wird häufig die „Hilbert empirical orthogonal functions analysis“, eine Hauptkomponentenanalyse einer Hilbert–transformierten Zeitreihe $\mathbf{Y}(t) = \mathbf{X}(t) + i\mathbf{X}^H(t)$ mit $\mathbf{X}^H(t) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{2}{(2s+1)\pi} (\mathbf{X}(t+2s+1) - \mathbf{X}(t-2s-1))$ genutzt. Eine Hauptkomponentenanalyse an jeder einzelnen Frequenzkomponente der Hilbert–transformierten Zeitreihe liefert die Eigenwerte und Eigenvektoren der Spektraldichtematrix an den entsprechenden Frequenzen. Daher kann das Verfahren auch als über alle Frequenzen gemittelte Hauptkomponentenanalyse im Frequenzbereich interpretiert werden (Horel, 1984).
- (ii) Die „multitaper frequency domain singular value decomposition“ ist eine Hauptkomponentenanalyse im Frequenzbereich, bei der unterschiedlich getaperte Fouriertransformierte der k Zeitreihen über eine Singulärwertzerlegung analysiert werden (Mann und Park, 1999). So können insbesondere unregelmäßige Oszillationen isoliert werden.
- (iii) Um zu untersuchen, ob und welche von k Zeitreihen gemeinsame Signale besitzen, löst Stoffer (1999) das Eigenvektorproblem $\mathbf{f}_{\mathbf{X}\mathbf{X}}(\alpha)\mathbf{b}(\alpha) = \lambda(\alpha)\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(0)\mathbf{b}(\alpha)$ unter der Nebenbedingung $\mathbf{b}^*(\alpha)\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(0)\mathbf{b}(\alpha) = 1$. Das ist eine Verallgemeinerung der Hauptkomponentenanalyse im Frequenzbereich mit der Kovarianzmatrix $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(0)$ als Metrik.

In der Praxis müssen die Filter $\{\mathbf{B}(s) \mid s \in \mathbb{Z}\}$ und $\{\mathbf{C}(s) \mid s \in \mathbb{Z}\}$ aus den beobachteten Zeitreihendaten $\mathbf{x}(t)$, $t = 1, \dots, T$, für einen endlichen Beobachtungszeitraum geschätzt werden. Dann liefern Eigenwert–Eigenvektor–Zerlegungen der geschätzten Spektraldichtematrizen an jeder Fourierfrequenz Schätzer für die dynamischen Eigenwerte $\lambda(\alpha)$ und die Transferfunktion $\tilde{\mathbf{B}}(\alpha)$. Eine ausführlichere Darstellung des Verfahrens sowie die asymptotischen Eigenschaften der Schätzer finden sich in Brillinger (1975).

Jeder der (standardisierten) komplexen Eigenvektoren der Spektraldichtematrizen ist bis auf die Multiplikation mit einem Faktor $v_j(\alpha)$ definiert, mit $v_j(\alpha) \in \mathbb{C}$ und Modulus $|v_j(\alpha)| = 1$. Im Vergleich zur klassischen Hauptkomponentenanalyse kann damit an jeder Frequenz jeder Eigenvektor im komplexen Raum rotiert werden. Da die resultierenden Hauptkomponentenfilter von der Wahl der Eigenvektoren an jeder Frequenz abhängen, stehen demnach für die Hauptkomponententransformation unendlich viele Filter zur Verfügung, die jeweils unterschiedliche Hauptkomponenten liefern. Dies ist nicht problematisch, sofern das Interesse allein auf der Approximation $\mathbf{x}(t) = \sum_s \mathbf{C}(s)\boldsymbol{\xi}(t-s)$ oder den dynamischen Eigenwerten liegt. Komplikationen entstehen jedoch bei der Interpretation der dynamischen Hauptkomponentenreihen (Brillinger, 1975, Kapitel 9.5; Lanius und Gather, 2003).

3.2.2 DYNAMISCHE HAUPTKOMPONENTENANALYSE IN DER PROZESSKONTROLLE

Die simultane Anwendung mehrerer Kontrollkarten aus der univariaten Prozesskontrolle wie CUSUM-, EWMA- oder Shewhart-Karten auf die einzelnen Variablen führt beim Monitoring multivariater, oft hoch korrelierter Prozesse häufig zu einer steigenden Anzahl unerwünschter Fehlalarme. Infolge des zunehmenden Aufkommens *dynamischer, multivariater* Daten, die einer Prozesskontrolle bedürfen, sind hier Erweiterungen sowohl auf multivariate, als auch auf autokorrelierte Beobachtungen erforderlich. Eine Verallgemeinerung der Shewhart-Kontrollkarte auf multivariate Prozesse erfolgte beruhend auf der T^2 -Statistik (Hotelling, 1947). Jackson (1959) drückt die T^2 -Statistik gleichwertig über die Hauptkomponenten aus, um mit Hilfe der unkorrelierten Komponenten schnell die Ursache für einen Alarm identifizieren zu können. Eine Alternative ist das Monitoring der ersten r Hauptkomponenten durch eine T^2 -Kontrollkarte, verbunden mit der zusätzlichen Überwachung der Approximationsfehler (Jackson und Mudholkar, 1979). Die Kontrolle der Summe der quadrierten Rekonstruktionsfehler $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) = \mathbf{X}(t) - \mathbf{x}(t)$ aus einer statischen Hauptkomponentenanalyse erfolgt dabei mit der sogenannten Q-Karte.

Diese Techniken der multivariaten statistischen Prozesskontrolle und insbesondere die Herleitung der Alarmgrenzen der Kontrollkarten wurden unter der Annahme unabhängiger Beobachtungen entwickelt. Da eine statische Hauptkomponentenanalyse auch für autokorrelierte Beobachtungen den Approximationsfehler aus (2.2) minimiert, wird sie auch im Monitoring dynamischer Prozesse eingesetzt. Eine theoretische Rechtfertigung dafür liefern Wise, Ricker, Veltkamp und Kowalski (1990) unter der Modellannahme, dass die Beobachtungen sich aus Linearkombinationen weniger Zustände und unkorrelierten Fehlern beschreiben lassen, wobei die Zustände einem AR(1)-Modell folgen. Da seriell unkorrelierte Fehler unterstellt werden, ist unter diesem Modell die Q-Karte für die Approximationsfehler nutzbar.

Im allgemeinen wird eine klassische Hauptkomponentenanalyse angewendet auf dynamische Prozesse jedoch nur eine statische Approximation darstellen und nicht die wahren Zusammenhänge zwischen den Variablen erfassen. Die resultierenden Hauptkomponenten sind autokorreliert und möglicherweise zu verschiedenen Zeitlags kreuzkorreliert. Obwohl den statisch

gewonnenen Hauptkomponenten ein dynamisches Modell unterstellt werden kann, wird der Raum der Approximationsfehler weiterhin von Vektoren aufgespannt, die aus der statischen Analyse stammen (Ku, Storer und Georgakis, 1995). Damit sind für starke Autokorrelationen die Kontrollgrenzen der T^2 -Karte und der Q-Karte nicht mehr gültig und müssen angepasst werden.

Bei der multivariaten Kontrolle dynamischer Prozesse sind vor allem zwei Aspekte zu unterscheiden. Hinsichtlich der Entwicklung geeigneter Kontrollkarten sind Verallgemeinerungen der Hauptkomponentenanalyse auf autokorrelierte Beobachtungen von Interesse. Diese Verfahren werden im ersten Teil dieses Abschnitts diskutiert. Zum anderen ist das Ziel häufig eine Echtzeitüberwachung der interessierenden Prozesse, bei der eine zeitinvariante Approximation durch die Hauptkomponenten die aktuelle Information nicht angemessen erfasst. Folglich wird eine dynamische Hauptkomponentenanalyse im Sinne einer beweglichen Online-Methode angestrebt.

Hauptkomponentenanalyse für autokorrelierte Beobachtungen

Ku, Storer und Georgakis (1995) nutzen Techniken aus der Systemidentifikation, um eine Hauptkomponentenanalyse auf autokorrelierte Daten zu adaptieren. Analog zur multivariaten SSA wird die durch zeitverzögerte Beobachtungen erweiterte Datenmatrix der Vektoren $\mathbf{X}^{[w]}(t) = (\mathbf{X}^T(t), \dots, \mathbf{X}^T(t-w))^T$ analysiert. Eine klassische Hauptkomponentenanalyse erfolgt beruhend auf der Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{\Gamma}}_{\mathbf{X}}$ von $\mathbf{X}^{[w]}(t)$, vgl. auch (3.12). Das Verfahren unterscheidet sich von der MSSA deutlich in der Anzahl w der berücksichtigten zeitverzögerten Beobachtungen und in der Zielsetzung. Obwohl der Ansatz einem AR-Modell nahe steht, liegt das Bestreben nicht auf der korrekten Bestimmung des multivariaten Zeitreihenmodells, sondern auf der Entwicklung einer brauchbaren multivariaten Kontrollkarte. Die Anzahl extrahierter Hauptkomponenten bestimmen Ku, Storer und Georgakis (1995) über eine Prozedur, die Art und Stärke der statischen und der dynamischen Zusammenhänge zwischen den Variablen berücksichtigt. Die Q-Karte für die Approximationsfehler kann bei korrekter Wahl der Anzahl relevanter Linearkombinationen wie im statischen Fall eingesetzt werden. Bei der T^2 -Karte müssen für starke Autokorrelationen die Kontrollgrenzen adjustiert werden.

Ein anderer Zugang kombiniert Techniken der Hauptkomponenten- und der Wavelet-Analyse (Bakshi, 1998) und nutzt aus, dass Wavelets autokorrelierte Beobachtungen approximativ de-korrelieren, während die Hauptkomponenten die Korrelation zwischen den Variablen behandeln. Für verschiedene Skalen werden Hauptkomponentenanalysen der Wavelet-Koeffizienten durchgeführt, wobei mit den interessantesten Skalen ein Multi-Skalen-Hauptkomponentenanalyse-Modell entwickelt wird.

Für die Überwachung der zu kontrollierenden Prozesse verlangen alle diese Ansätze eine geeignete Bestimmung der Hauptkomponenten und Approximationsfehler. Beim Monitoring

technischer oder industrieller (Fertigungs-)Prozesse liegt oft Vorwissen über die Zielwerte oder die Zusammenhänge zwischen den Variablen vor, oder aber die Richtungen der Hauptkomponenten können verlässlich aus sauberen Referenzdaten geschätzt werden. In dieser Situation sind die überwachten Linearkombinationen der Variablen also von Beginn des Monitorings an fest und möglicherweise für den Anwender sogar gut zu interpretieren. Änderungen in der T^2 - oder Q -Statistik, die eine Überschreitung der festen Alarmgrenzen nach sich ziehen, zeigen an, dass der Prozess außer Kontrolle gerät.

Ist für einen Prozess eine beschränkte Anzahl möglicher Störungen bekannt, kann diese Information zur Aufdeckung der Ursache eines Alarms genutzt werden (Ku, Storer und Georgakis, 1995). Dazu werden Beobachtungen des Prozesses unter dem Normalzustand und den verschiedenen Störungszuständen simuliert. Für die Daten unter den unterschiedlichen Bedingungen werden jeweils die Richtungen der Hauptkomponenten geschätzt. Aktuell aufgezeichnete Beobachtungen werden auf die Unterräume aller dieser Hauptkomponentenmodelle projiziert. Die Ursache einer unter dem Normalzustand diagnostizierten Störung kann dann über die Bedingungen derjenigen Q -Karte, die anzeigt, dass der Prozess unter Kontrolle ist, identifiziert werden. Wenn Störungen auftreten, die vorab in der Simulation nicht berücksichtigt wurden, oder die eine bekannte Störung beispielsweise aufgrund starken Rauschens nur schwach ausgeprägt ist, ist eine Identifikation nicht möglich.

Hauptkomponentenanalyse bei Prozessen mit veränderlicher Struktur

Neben der Lage und der Variabilität kann sich auch die Abhängigkeitsstruktur eines dynamischen Prozesses verändern. Hinsichtlich langsamer, natürlicher Änderungen der Struktur von Prozessen kann eine Approximation mittels einer zeitinvarianten Hauptkomponentenanalyse zu Fehlalarmen führen (Li, Yue, Valle-Cervantes und Qin, 2000), und der Anteil der erklärten Varianz kann lokal deutlich geringer ausfallen. Bei einer dynamischen Korrelationsstruktur ist davon auszugehen, dass sich die durch die Hauptkomponenten beschriebenen Linearkombinationen mit der größten Variabilität mit fortschreitender Zeit ändern. Deswegen wird die Hauptkomponentenanalyse in diesem Abschnitt dahingehend erweitert, dass eine dynamische Approximation mit zeitveränderlicher Lage, Variabilität und Korrelation zugelassen wird.

Naheliegender ist hierbei die Einführung eines Datenfensters, das die Beobachtungen von $w + 1$ aufeinanderfolgenden Zeitpunkten $t, t + 1, \dots, t + w$ enthält. In jedem Zeitfenster $W_t = \{t, t + 1, \dots, t + w\}$, $t = 1, \dots, T - w$, wird, statisch oder auf Basis der erweiterten Datenmatrix, die lokal beste r_t -dimensionale Approximation gesucht, wobei $1 \leq r_t \leq k$ für alle t (Kano, Hasebe, Hashimoto und Ohno, 2001). Anstelle eines gleitenden Zeitfensters kann alternativ eine rekursive Aktualisierung der Eigenvektoren einer statischen Hauptkomponentenanalyse vorgenommen werden. Qin, Li und Yue (1999) sowie Li, Yue, Valle-Cervantes und Qin (2000) vergleichen Techniken für eine Aktualisierung der Schätzer hinsichtlich deren algorithmischer Komplexität. Neu hinzukommende Beobachtungen fließen stärker in die Analysen ein, wenn vergangene Beobachtungen exponentiell heruntergewichtet werden. Eine

Überwachung des Prozesses erfolgt hierbei über T^2 - und Q -Karten mit variierenden Kontrollgrenzen. Dabei ist ebenfalls ein verzögertes gleitendes Fenster (*delayed moving window*) denkbar (Daumer und Neiß, 2001). Fehlende Beobachtungen oder einzelne Beobachtungen, die außerhalb der Kontrollgrenzen liegen und klar als Messfehler identifiziert werden können, werden dabei durch Rekonstruktionsalgorithmen ersetzt.

Für die Analyse von Prozessen mit Drift verbindet Wold (1994) Techniken der Hauptkomponentenanalyse und des multivariaten exponentiellen Glättens (EWMA), wobei die Schätzung mit jeder neu hinzukommenden Beobachtung aktualisiert wird. Unter der Annahme, dass die Kreuzkorrelationsstruktur in den Daten und damit auch die Hauptkomponenten stabil sind, ergibt sich eine autoregressive Autokorrelationsstruktur. Basierend auf den aktuellen Hauptkomponenten werden zunächst Ein-Schritt-Vorhersagen gewonnen. In einem zweiten Schritt werden die „Ladungen“ über EWMA-Techniken aktualisiert.

Ein inhärentes Problem bei einer gleitenden oder rekursiven Hauptkomponentenanalyse ist sowohl die Zentrierung als auch die Skalierung der Beobachtungen. Beim Monitoring industrieller Prozesse ist typischerweise ein Vektor mit Sollwerten $\boldsymbol{\mu}_{Ziel}$ bekannt, oder es kann ein Stichprobenmittelwert aus Referenzdaten bestimmt werden. Um Abweichungen von diesem Zielwert aufzudecken, werden die Beobachtungen mit diesem Wert zentriert. Zur Skalierung können gegebenenfalls bekannte Sollgrößen oder Stichproben-Langzeitwerte zusammen mit zusätzlichen Gewichtungsfaktoren genutzt werden. Weichen die Variablen um den Vektor $\boldsymbol{\delta}$ von dem Zielwert ab, d. h. $E[\mathbf{X}(t)] = \boldsymbol{\mu}_{Ziel} + \boldsymbol{\delta}$, lautet der erwartete mittlere quadratische Fehler für N Beobachtungen $E[(\mathbf{X}(t) - \boldsymbol{\mu}_{Ziel})(\mathbf{X}(t) - \boldsymbol{\mu}_{Ziel})^T] = \boldsymbol{\Gamma}_X(0) + \frac{N}{N-1}\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\delta}^T$ (Sparks, Adolphson und Phatak, 1997). Dies ermöglicht zwar die Erkennung von Niveauänderungen, jedoch liefert eine Hauptkomponentenanalyse dieser Matrix möglicherweise nicht mehr die Richtungen mit der größten Variabilität der Daten sondern Eigenvektoren, die die Richtung der Abweichung der Punkte von dem Zielwert beschreiben.

Wenn kein Sollwert vorgegeben ist oder langsame Lageänderungen erlaubt sind, die nicht zu Alarmsituationen führen sollen, können die Beobachtungen bei einer gleitenden oder rekursiven Hauptkomponentenanalyse mit lokalen, möglicherweise gewichteten gleitenden Mitteln und Standardabweichungen zentriert und skaliert werden. Die Approximation des Prozesses wird damit lokal verbessert.

Änderungen in der Korrelationsstruktur wirken sich auf die Richtungen der Hauptkomponenten aus. Obwohl Wold (1994) eine stabile Kreuzkorrelationsstruktur unterstellt, können Rotationen der Eigenvektoren sprunghafte Änderungen in den Hauptkomponenten hervorrufen. Eigenwerte, die sich im Zeitverlauf deutlich verändern, können eine Vertauschung der Reihenfolge der Eigenvektoren nach sich ziehen. Die Schätzung der neuen Eigenvektoren über eine exponentielle Gewichtung aktueller und vorangegangener Eigenvektoren vermeidet Rotationen (Wold, 1994). Stabilität wird durch einen adjustierbaren Ausgleichsparameter erzielt, der Unterschiede zwischen vergangenen und aktuellen Schätzungen gering hält.

Liegt das Interesse nur auf den Werten der T^2 - und Q -Statistiken und nicht auf den Hauptkomponentenscores $\hat{\xi}(t)$, ist die Änderung der Hauptkomponentenrichtungen unerheblich. So nutzen Li, Yue, Valle-Cervantes und Qin (2000) in jedem Schritt ein geeignetes Kriterium, um die Anzahl r_t der extrahierten Hauptkomponenten neu zu bestimmen und somit eine optimale Erklärungsgüte sicherzustellen.

Während diese Ansätze die Art der Richtungsänderung vernachlässigen, überwachen Kano, Hasebe, Hashimoto und Ohno (2001) zusätzlich gerade die Änderungen der linearen Zusammenhänge zwischen den Variablen. Dazu entwickeln sie eine Kontrollkarte, die auf einer Distanz zwischen zwei Unterräumen gleicher Dimension beruht. Für die Unterräume \mathcal{G}_A und \mathcal{G}_B , die von den Spalten der Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{B} aufgespannt werden, ist diese Distanz die Spektralnrm der orthogonalen Projektoren auf die Unterräume, d. h. $gap(\mathcal{G}_A, \mathcal{G}_B) = \|\mathbf{A}(\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top - \mathbf{B}(\mathbf{B}^\top \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^\top\|_2$ (Golub und Van Loan, 1983). Dieser Abstand ist als der maximale Winkel zwischen Vektoren der beiden Unterräume zu interpretieren. Alternativ kann anstelle der Spektralnrm auch die Frobenius-Norm genutzt werden (Crone und Crosby, 1995). Der von den aktuellen Hauptkomponenten aufgespannte r -dimensionale Unterraum wird in jedem Schritt mit dem Unterraum, der über die Hauptkomponenten für Referenzdaten bestimmt wurde, verglichen. Um Autokorrelationen zwischen den Beobachtungen gerecht zu werden, ist hierbei auch der Vergleich der Unterräume möglich, die aus einer dynamischen Hauptkomponentenanalyse der erweiterten Datenmatrix resultieren.

Während die Online-Approximation gegenüber einer zeitinvarianten Hauptkomponentenanalyse die Beobachtungen lokal besser erklärt, ist die Ursache für einen Alarm oft schwerer zu entdecken. Die Linearkombinationen einer zeitinvarianten Hauptkomponentenanalyse sind bekannt, so dass die Hauptkomponentenscores $\hat{\xi}(t)$ oft wichtige Hinweise auf die Herkunft der Störung geben können. Bei einer Online-Hauptkomponentenanalyse ist zur Interpretation der Hauptkomponenten zusätzlich ein Monitoring der Gewichte der Linearkombinationen nötig. Sparks, Adolphson und Phatak (1997) überwachen einen multivariaten Prozess in Echtzeit mittels zweidimensionaler dynamischer Gabriel Biplots. Multivariate Tests überprüfen zusätzlich in jedem Schritt Abweichungen vom Sollwert μ_{Ziel} , die Kovarianzen zwischen den Variablen und den Anteil erklärter Variabilität, an die sich gegebenenfalls univariate Tests zur Aufdeckung der Ursache anschließen. Da die Kovarianzmatrix durch Niveauänderungen deutlich aufgebläht werden kann, wird in dieser Situation ein gepoolter Schätzer verwendet, um die Verzerrung zu verringern. Anhand der Längen und Ausrichtung der Vektoren und der Muster der auf die ersten zwei Hauptkomponenten projizierten Beobachtungspunkte können Ursachen für einen Alarm graphisch erfasst werden. Für mehr als zwei Hauptkomponenten wird dieser Ansatz jedoch sehr aufwendig, da sehr viele verschiedene Größen überwacht werden müssen.

3.3 WEITERE DIMENSIONSREDUZIERENDE VERFAHREN FÜR AUTOKORRELIERTE BEOBACHTUNGEN

In diesem Abschnitt werden weitere Methoden vorgestellt, um aus autokorrelierten multivariaten Daten wenige Komponenten zu extrahieren. Diesen Verfahren, so wie auch der Hauptkomponentenanalyse, ist das Prinzip gemeinsam, jeweils nach einer optimalen Transformation der Daten zu suchen im Sinne eines zu definierenden Kriteriums. Das Kriterium kann eine bestimmte Art der Dimensionsreduktion, die Einfachheit oder Interpretierbarkeit der resultierenden Linearkombinationen, den „Interessantheitsgrad“ dieser Komponenten oder ähnliches beschreiben.

In Abschnitt 3.3.1 wird zunächst die Minimum/Maximum Autokorrelations–Faktoranalyse (Switzer und Green, 1984) vorgestellt, die auf die Erfassung der räumlichen oder auch zeitlichen Abhängigkeiten abzielt. Unter der Überschrift „Kontinuum–Faktormodelle“ werden in Abschnitt 3.3.2 Lösungen von Optimierungsproblemen vorgestellt, die viele der bisher behandelten Methoden als Spezialfälle enthalten. Im Anschluss wird mit der Independent Component Analysis ein Verfahren betrachtet, dass insbesondere zur Trennung verschiedener vermischter Signale geeignet ist.

3.3.1 MINIMUM/MAXIMUM AUTOKORRELATIONS–FAKTORANALYSE

Die Minimum/Maximum Autokorrelations–Faktoranalyse (MAFA) transformiert die Daten orthogonal, wobei anstelle der Varianz eine Autokorrelation zwischen Linearkombinationen der Beobachtungen minimiert bzw. maximiert wird. Diese Technik wurde ursprünglich zur Analyse räumlicher Daten vorgeschlagen (Switzer und Green, 1984; Switzer, 1985), aber von Shapiro und Switzer (1989), auch Solow (1994), zur Analyse multivariater Zeitreihen genutzt. Die Idee besteht darin, dass Komponenten mit starker Autokorrelation viel Information über ein unbekanntes unterliegendes Signal enthalten und relativ glatt sind, während die schwächer autokorrelierten Komponenten vornehmlich Rauschen beschreiben.

Definition 3.1 (*Minimum/Maximum Autokorrelations–Faktoren*)

Eine Linearkombination $Z_1(t) = \mathbf{a}_1^\top \mathbf{X}(t)$ eines Zufallsvektors $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^k$ mit $\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}$ so, dass $\text{Corr}[\mathbf{a}^\top \mathbf{X}(t), \mathbf{a}^\top \mathbf{X}(t+s)]$ für ein festes $s \in \mathbb{N}$ minimal ist unter der Nebenbedingung $\mathbf{a}^\top \mathbf{a} = 1$, heißt erster Minimum/Maximum Autokorrelations–Faktor von $\mathbf{X}(t)$. Ein j –ter Minimum/Maximum Autokorrelations–Faktor $Z_j = \mathbf{a}_j^\top \mathbf{X}(t)$, $j = 2, \dots, k$, von $\mathbf{X}(t)$ ist definiert über die Lösung $\mathbf{a}_j = \mathbf{a}$ des Optimierungsproblems

$$\min_{\mathbf{a}} \text{Corr}[\mathbf{a}^\top \mathbf{X}(t), \mathbf{a}^\top \mathbf{X}(t+s)]$$

unter der Nebenbedingung $\text{Corr}[\mathbf{a}^\top \mathbf{X}(t), \mathbf{a}_i^\top \mathbf{X}(t)] = 0$, $i < j$.

Eine Lösung für dieses Optimierungsproblem liefert der folgende Satz:

Satz 3.2 Sei $\mathbf{X}^{(s)}(t) = \mathbf{X}(t) - \mathbf{X}(t+s)$ die Differenz einer stationären Zeitreihe $\mathbf{X}(t)$ zum Zeitlag s und bezeichne $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}^{(s)}} = \text{Var}[(\mathbf{X}(t) - \mathbf{X}(t+s))] \in \mathbb{R}^{k \times k}$ deren Kovarianzmatrix. Es seien $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_k$ die geordneten Eigenwerte von $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}^{-1}(0)\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}^{(s)}}$ und $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k$ eine Basis zugehöriger Eigenvektoren. Dann sind Minimum/Maximum Autokorrelations-Faktoren aus Definition (3.1) gegeben durch

$$Z_j(t) = \mathbf{e}_j^\top \mathbf{X}(t), \quad j = 1, \dots, k,$$

d. h. $\mathbf{a}_j = \mathbf{e}_j$, $j = 1, \dots, k$. Dabei gilt

$$\text{Corr}[Z_j(t), Z_j(t+s)] = 1 - \lambda_j/2 \quad \forall j = 1, \dots, k.$$

Beweis (vgl. auch Shapiro und Switzer, 1989)

Es gilt für die Kovarianz

$$\text{Cov}[\mathbf{a}^\top \mathbf{X}(t), \mathbf{a}^\top \mathbf{X}(t+s)] = \mathbf{a}^\top \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}^{(s)}} \mathbf{a} = \frac{1}{2} \mathbf{a}^\top (\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}^{(s)}} + \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}^{(-s)}}) \mathbf{a} = \mathbf{a}^\top (\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(0) - \frac{1}{2} \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}^{(s)}}) \mathbf{a}.$$

Für die sukzessive Minimierung der Korrelation

$$\text{Corr}[\mathbf{a}^\top \mathbf{X}(t), \mathbf{a}^\top \mathbf{X}(t+s)] = 1 - \frac{1}{2} \frac{\mathbf{a}^\top \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}^{(s)}} \mathbf{a}}{\mathbf{a}^\top \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(0) \mathbf{a}}$$

ist somit das generalisierte Eigenwertproblem $(\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}^{(s)}} - \lambda \mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(0))\mathbf{x} = 0$ zu lösen. \square

Die Minimum/Maximum Autokorrelations-Faktoren $Z_1(t), \dots, Z_k(t)$ sind so angeordnet, dass $Z_1(t)$ die minimale und $Z_k(t)$ die maximale Autokorrelation besitzt. Mit dem Ziel, Trends zu extrahieren, betrachten Shapiro und Switzer (1989) bei der Analyse multivariater *nichtstationärer* Zeitreihen ausschließlich Autokorrelationen zum Zeitlag $s = 1$ zur Bestimmung der Maximum Autokorrelations-Faktoren. Zu ihrer Identifikation wird dabei gefordert, dass sie Varianz 1 besitzen und positiv mit der Zeit korreliert sind. Eine vorteilhafte Eigenschaft besteht in der Invarianz der Minimum/Maximum Autokorrelations-Faktoranalyse gegenüber linearen Transformationen der multivariaten Zeitreihe. Für eine annähernd symmetrische Autokovarianzmatrix $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{X}}(1)$ entspricht die Minimum/Maximum Autokorrelations-Faktoranalyse approximativ der kanonischen Korrelationsanalyse eines VAR(1)-Modells von Box und Tiao (1977). Badcock, Bailey und Krzanowski (2001) bestimmen Autokorrelations-Faktoren für verschiedene Zeitlags s , um die resultierenden Komponenten zur univariaten Prozesskontrolle einsetzen zu können.

3.3.2 KONTINUUM-FAKTORANALYSE

Kontinuum-Faktormodelle (*engl. continuum factor models*; Sjöstedt, 1996; Sjösted und Barrlund, 1997) zielen darauf ab, ausgehend von einem AR(p)-Modell eine Darstellung als multivariates Indexmodell (3.2) zu finden, so dass die r Komponenten $\mathbf{Z}(t) = \mathbf{C}(0)\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^r$ die wichtigste zur Vorhersage benötigte Information enthalten. Die gesuchten Linearkombinationen werden aus einem stetigen Spektrum linearer Transformationen ausgewählt. Zur

Schätzung der Matrix $\mathbf{C}(0)$ wird gefordert, dass die resultierenden Komponenten unkorreliert sind und ein hohes Ausmaß an Vorhersagekraft besitzen. Die Matrizen des Filters $\mathbf{A}(\mathbf{B})$ können anschließend über einen Kleinst-Quadrat-Ansatz bestimmt werden.

Unter der Nebenbedingung, dass die Zeilenvektoren $\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_r$ von $\mathbf{C}(0)$ orthonormal sind, löst Sjöstedt (1996) sukzessive das Problem der Maximierung von

$$Q_1(\mathbf{c}) = |\text{Cov}[\mathbf{c}^\top \mathbf{X}(t+1), \mathbf{c}^\top \mathbf{X}(t)]| \times (\text{Var}[\mathbf{c}^\top \mathbf{X}(t)])^{(\gamma-1)} \quad (3.22)$$

oder alternativ dazu das ähnliche, aber nicht äquivalente, Problem der Maximierung von

$$Q_2(\mathbf{c}) = \max_{\text{Var}[\mathbf{d}^\top \mathbf{X}(t+1)]=1} (\text{Cov}[\mathbf{d}^\top \mathbf{X}(t+1), \mathbf{c}^\top \mathbf{X}(t)])^2 \times (\text{Var}[\mathbf{c}^\top \mathbf{X}(t)])^{(\gamma-1)} \quad (3.23)$$

für ein gegebenes $0 \leq \gamma \leq \infty$. Das Kriterium (3.23) ist gegenüber Kriterium (3.22) flexibler, da die beliebige Wahl von d mehr Freiheit bei der Schätzung der Faktoren erlaubt. So wird mittels (3.23) eine Steuerung der Faktoren in vorgegebene Richtungen, d. h. eine gezielte Gewichtung der Zeitreihen, ermöglicht. Der Parameter γ wird so gewählt, dass ein Maß für den Vorhersagefehler minimiert wird.

Von Interesse sind Kontinuum-Faktormodelle hier deswegen, weil sie abhängig von der Wahl von γ einige der bereits diskutierten Spezialfälle enthalten. Für $\gamma = 0$ ergibt sich mit Kriterium Q_1 die Minimum/Maximum Autokorrelations-Faktoranalyse und mit Kriterium Q_2 eine kanonische Korrelationsanalyse. Für $\gamma = 1$ wird mit Kriterium Q_1 sukzessive die Autokovarianz maximiert und mit Kriterium Q_2 die Kovarianz zwischen Linearkombinationen der Gegenwart und der Zukunft. Für $\gamma = \infty$ entsprechen die resultierenden Komponenten mit beiden Kriterien den klassischen Hauptkomponenten. Für den Fall, dass das Modell von Peña und Box (1987) aus (3.15) mit $\mathbf{\Gamma}_\epsilon(0) = \sigma^2 \mathbf{I}_k$ gilt, sind die r Minimum/Maximum Autokorrelations- bzw. Autokovarianz-Faktoren mit der stärksten Autokorrelation bzw. Autokovarianz und die ersten r Hauptkomponenten jeweils Permutationen der durch $\hat{\mathbf{L}}^\top \mathbf{X}(t)$ geschätzten r Faktoren.

3.3.3 INDEPENDENT COMPONENT ANALYSE

Die Independent Component Analyse (ICA, z.B. Hyvärinen und Oja, 2000) strebt die Isolierung der ursprünglichen, unabhängigen, aber unbekannten Signale aus einer Sequenz multivariater Beobachtungen an. Dazu wird angenommen, dass sich beobachtete Variablen $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^k$ als Linearkombinationen von r , $r \leq k$, unabhängigen Signalen $\boldsymbol{\xi}(t)$ schreiben lassen, d. h. $\mathbf{X}(t) = \mathbf{A}\boldsymbol{\xi}(t)$, wobei $\mathbb{E}[\mathbf{X}(t)] = \mathbb{E}[\boldsymbol{\xi}(t)] = \mathbf{0}$ und \mathbf{A} unbekannt. Im Unterschied zum statistischen Faktormodell entspricht die Dimension des Signalvektors dabei oft der Dimension des Beobachtungsvektors, d. h. $k = r$. Weil die Lösung des Isolierungs-Problems bereits schwierig ist, wird in der Regel der Einfachheit halber auf die Modellierung eines Beobachtungsfehlers verzichtet. Um die Annahmen so allgemein wie möglich zu halten, wird den Variablen keine (serielle) Unabhängigkeit und keine vorgegebene Verteilung unterstellt.

Die definierende Aufgabe der ICA besteht darin, mit der Matrix \mathbf{U} eine lineare Transformation $\mathbf{Y}(t) = \mathbf{U}\mathbf{X}(t)$ derart zu finden, dass die einzelnen Komponenten $Y_i(\cdot), i = 1, \dots, r$, so unabhängig wie möglich sind im Sinne der Maximierung oder Minimierung einer Kriteriumsfunktion $F(Y_1, \dots, Y_r)$, die die stochastische Unabhängigkeit misst. Dabei soll $\mathbf{Y}(t)$ eine gute Schätzung des Signalvektors $\boldsymbol{\xi}(t)$ darstellen, wobei die Reihenfolge der Elemente in $\mathbf{Y}(t)$ permutiert werden kann. Die Restriktionen, dass die r Signale $\xi_1(\cdot), \dots, \xi_r(\cdot)$ stochastisch unabhängig sind und dass alle $\xi_i(\cdot)$ bis auf höchstens ein Signal nicht normalverteilt sind (Comon, 1994), garantieren die Identifizierbarkeit der Signale. Wegen der beliebigen Skalierung wird zusätzlich gefordert, dass die Signale mit $\mathbb{E}[\boldsymbol{\xi}^2(t)] = 1$ normiert sind.

Mit einer zunächst eher heuristischen Begründung über den zentralen Grenzwertsatz zeigen Hyvärinen und Oja (2000), dass sich Schätzer für die unabhängigen Signale finden lassen, falls die Vektoren \mathbf{u} gesucht werden, die ein Maß für die Nicht-Normalverteiltetheit der Linearkombination $\mathbf{u}^\top \mathbf{X}(t)$ maximieren. Ein klassisches Maß für die Nicht-Normalverteiltetheit einer Zufallsvariablen ist die Kurtosis $\kappa(Y) = \mathbb{E}[Y^4] - 3(\mathbb{E}[Y^2])^2$, die für eine normalverteilte Variable den Wert Null annimmt. Da die Kurtosis sehr anfällig gegenüber Ausreißern ist, wird alternativ auch die Negentropie oder eine geeignete Approximationen maximiert oder das Mutual Information Kriterium minimiert.

Die Independent Component Analyse ist damit als eine Methode zur Trennung gemischter Signale nicht ausdrücklich zur Dimensionsreduktion vorgesehen. Für den Fall, in dem die interessantesten Richtungen genau den Linearkombinationen der Variablen entsprechen, deren Verteilung im Sinne eines geeigneten Abstandsmaßes stark von einer Normalverteilung abweicht, kann das Verfahren als eine Variante von Projection-Pursuit aufgefasst werden. Hierbei können dann auch nur wenige unabhängige Komponenten isoliert werden. Dabei wird angenommen, dass der zu diesen Komponenten orthogonale Unterraum nur normalverteiltes Rauschen enthält.

Wie bei der Hauptkomponentenanalyse werden Informationen über die seriellen Abhängigkeiten nicht berücksichtigt, jedoch werden sie durch die schwachen Annahmen auch nicht ausgeschlossen.

4 DIMENSIONSREDUKTION FÜR VARIABLEN AUS DER INTENSIVMEDIZIN

In den vorangegangenen Kapiteln wurden einige statistische Verfahren vorgestellt, die zur Bearbeitung der Fragestellung dienen können. Das vorliegende Kapitel beschäftigt sich nun mit vorhandenen intensivmedizinischen Patientendaten. In einem ersten Schritt werden die vorliegenden Daten aus dem Online-Monitoring der Intensivmedizin in Abschnitt 4.1 vorgestellt und deskriptiv erforscht. Basierend auf den hier erkennbaren Zusammenhängen werden einige der hämodynamischen Variablen für die weiteren Analysen ausgewählt.

In Abschnitt 4.2 werden die Daten mit Hilfe der klassischen statischen Verfahren der Dimensionsreduktion aus den Kapiteln 2.1.1 und 2.1.2 retrospektiv analysiert. Die explorativ aufzufassenden Ergebnisse ermöglichen ein besseres Verständnis der Strukturen in den multivariaten Zeitreihen. Zusätzlich wird untersucht, ob eine statische Dimensionsreduktion in einem gleitenden Zeitfenster eine Lösung für das Problem der Extraktion weniger Komponenten in Echtzeit darstellen kann.

Aufgrund der erwarteten hohen Autokorrelationen zwischen den Beobachtungen ist es sinnvoll, diese seriellen Abhängigkeiten bei einer Dimensionsreduktion angemessen zu berücksichtigen. Dadurch wird ein besserer Einblick in die datenerzeugenden Mechanismen ermöglicht. Abschnitt 4.3 beschäftigt sich daher mit der Anwendung dynamischer Verfahren der Dimensionsreduktion auf die intensivmedizinischen Daten. Insbesondere wird ein geeigneter Ansatz zur Modellierung der vorliegenden Zeitreihen gesucht. Die Ausnutzung des hierbei erworbenen Wissens soll schließlich die Findung passender dimensionsreduzierender Methoden für die Daten erlauben.

In Abschnitt 4.4 werden die Möglichkeiten der in Kapitel 3.3 vorgestellten Verfahren zur Dimensionsreduktion für autokorrelierte Daten hinsichtlich der Analyse der hämodynamischen Zeitreihen untersucht.

Eine Zusammenfassung aus diesen Ansätzen der Datenanalyse erfolgt in Abschnitt 4.5. Die gewonnenen Erkenntnisse werden dazu genutzt, Lösungsmöglichkeiten für die Bearbeitung der Fragestellung dieser Arbeit aufzuzeigen.

4.1 DESKRIPTIVE ANALYSE DER INTENSIVMEDIZINISCHEN DATEN

Seit 1992 wird auf der Chirurgischen Intensivstation des Klinikums Dortmund ein Klinisches Informationssystem (Clinical Information System, CIS) eingesetzt, das eine vollständige elektronische Führung der „Patientenkurve“ am Intensivbett in Echtzeit ermöglicht. Dabei werden intensivmedizinische Vitalparameter, d. h. Kreislauf-, Beatmungs- und Laborwerte, aufgezeichnet. In einer Datenbank stehen die Rohdaten für die kontinuierlich gemessenen Variablen, so wie sie vom Patientenmonitor geliefert werden, im Minutentakt zur Verfügung. Zum größten Teil werden die Daten verlässlich und korrekt erfasst. Die Bewältigung des Bündels von Patientenkurven bietet einen hohen Schwierigkeitsgrad.

Die optimale Behandlung des Herz-Kreislaufsystems ist Grundlage jeder postoperativen Intensivtherapie, da eine hinreichende Durchströmung die Voraussetzung der regelgerechten Funktion der Organe ist. Daher konzentrieren sich die Untersuchungen in dieser Arbeit zunächst ausschließlich auf die Analyse von Variablen des hämodynamischen Systems.

Die Aufnahme der Patienten in die Datenbank erfolgte mit der Einschränkung, dass nur Patienten berücksichtigt wurden, die zu irgendeinem Zeitpunkt ihrer Behandlung einen Pulmonalkatheter (PAC) hatten. Es liegen auch nur Beobachtungen für die Zeiträume vor, in denen der Pulmonalkatheter Werte aufzeichnet. Zu den hier betrachteten 11 Variablen des hämodynamischen Systems gehören der diastolische, der mittlere und der systolische arterielle Blutdruck (in mmHg; APD, APM und APS), der diastolische, der mittlere und der systolische pulmonalarterielle Blutdruck (in mmHg; PAPD, PAPM und PAPS), der zentralvenöse Blutdruck (in mmHg; CVP), die Herzfrequenz und der Puls (in Schlägen pro Minute; HR und Puls), die Bluttemperatur (in °C; Temp) und die Sauerstoffsättigung (in %; SaO₂). Sämtliche Patienten werden zumindest zeitweise mit Intensiv-Beatmungsgeräten beatmet oder bei der Atmung durch Geräte unterstützt, die die Sauerstoffkonzentration in der Atemluft erhöhen. In Abbildung 4.1 ist exemplarisch eine multivariate Zeitreihe der genannten 11 Vitalparameter eines Intensivpatienten über einen Zeitraum von 24 Stunden dargestellt. Die einzelnen Kurven zeigen deutliche Muster, wie Auf- und Abwärtstrends, plötzliche Niveauänderungen sowie Messartefakte. Insgesamt werden die Messwerte durch ein wechselnd starkes Rauschen überlagert. Wegen der vielen großen Ausreißer in den physiologischen Daten werden zur Analyse der Daten robuste statistische Verfahren benötigt.

Für die Untersuchungen in dieser Arbeit standen insgesamt Daten von 377 verschiedenen Patienten zur Verfügung, wobei für die Analysen nur Datensätze ausgewählt wurden, die die folgenden Bedingungen erfüllen:

- Wenn für sämtliche Variablen des hämodynamischen Systems über einen Zeitraum von mehr als 20 Minuten keine Beobachtungen vorliegen, wird der Datensatz des Patienten aufgesplittet, und nur die längste zusammenhängende Sequenz wird weiter verwendet.

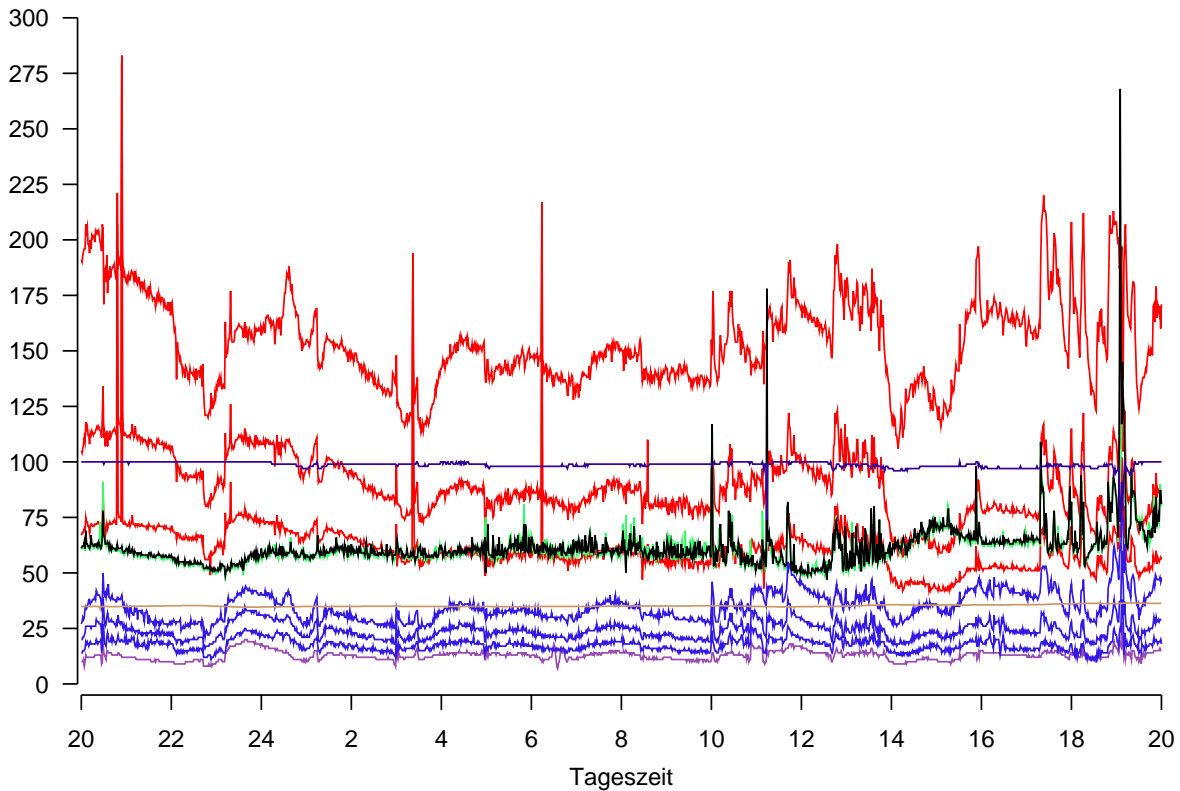


Abbildung 4.1: Zeitreihe der 11 Variablen des hämodynamischen Systems eines Intensivpatienten: arterielle Drücke (rot), Sauerstoffsättigung (dunkelblau), Herzfrequenz (schwarz), Puls (grün), Bluttemperatur (beige), pulmonalarterielle Drücke (blau) und zentralvenöser Blutdruck (violett)

- Fehlende Beobachtungen treten für jede Variable höchstens über einen Zeitraum von 200 Minuten auf.
- Für jede Variable ist der Anteil fehlender Werte kleiner als 40%.
- Es liegen Beobachtungen für einen Zeitraum von mindestens 300 Minuten vor.

Den genannten Kriterien genügen insgesamt 332 der vorliegenden Zeitreihen. Dieses Patientenkollektiv ist die Grundlage der weiteren Untersuchungen. Es umfasst insgesamt Beobachtungen für 867 862 Minuten (knapp 603 Tage), wobei die Zeitreihen im Mittel eine Länge von 2614 Minuten, d. h. ca. 43.5 Stunden, haben, bei einem Minimum (Maximum) von 302 (7063) Minuten. Der Anteil fehlender Beobachtungen beträgt für die einzelnen Variablen im Mittel über die Patienten zwischen 1 – 2%, maximal 7% für die Blutdrücke und etwas mehr für die anderen Variablen. Fehlende Werte wurden basierend auf den folgenden Kriterien ersetzt:

- Fehlende Werte für entweder Herzfrequenz oder Puls werden jeweils durch eine *Least Trimmed Squares* (LTS)–Regression (Rousseeuw, 1985) auf die Beobachtungen der anderen Variablen ersetzt.

- Fehlende Beobachtungen für weniger als 10 aufeinanderfolgende Minuten werden durch eine robuste Regressionsschätzung mit dem *Repeated Median* (RM) basierend auf den 20 nächstgelegenen Beobachtungen (bei wiederholt auftretenden Lücken nicht unbedingt die 10 vorigen bzw. nachfolgenden Beobachtungen) ersetzt.
- Fehlende Beobachtungen für mehr als 10 aufeinanderfolgende Minuten werden durch eine robuste Regressionsschätzung mit dem RM basierend auf den 10 vorhergehenden und den 10 nachfolgenden Beobachtungen ersetzt.
- Ersetzte Beobachtungen werden in den Regressionsschätzungen zur Ersetzung nachfolgender Beobachtungen weiterverwendet.

Die meisten Patienten erhalten, neben weiteren medizinischen Interventionen, kontinuierlich medikamentöse Infusionen zur Stützung der Herz-Kreislauffunktion. Von den 332 Patienten bekommen im Laufe ihrer Liegezeit 144 Noradrenalin zur Erhöhung des arteriellen Blutdrucks, 126 Adrenalin und 322 Dobutamin zur Erhöhung der Herzfrequenz, 328 Dopamin zur Verbesserung der Nierenfunktion, 200 Nitroglycerin und 77 Adalat zur Senkung des arteriellen Blutdrucks.

Mit Hilfe der demographischen Variablen lässt sich das ausgewählte Patientenkollektiv wie folgt charakterisieren: Es handelt sich um 224 männliche und 108 weibliche Patienten mit einem mittleren Alter von ca. 64 (± 11) Jahren, wobei in Klammern die zugehörige Standardabweichung angegeben wird. Die mittlere Körpergröße der männlichen Patienten beträgt 175 (± 8) cm, der weiblichen Patienten 163 (± 7) cm, das mittlere Körpergewicht der männlichen Patienten beträgt 79 (± 16) kg, der weiblichen Patienten 69 (± 14) kg. Weiter ist bekannt, dass 185 Patienten anschließend in die Chirurgie-Abteilung und 31 Patienten in andere Abteilungen verlegt wurden, 116 Patienten sind verstorben.

Für die 332 Zeitreihen wurde jeweils der Median jeder einzelnen der 11 betrachteten hämodynamischen Variablen über den Beobachtungszeitraum hinweg bestimmt. Abhängig von der physischen Verfassung der verschiedenen Patienten gibt es Unterschiede im Niveau der gemessenen Vitalparameter. Tabelle 4.1 gibt einen Überblick über das Patientenmittel und einige Quantile der Mediane der hämodynamischen Variablen. Gegenüber einem gesunden Menschen aus der betroffenen Altersgruppe sind Herzfrequenz und Puls der meisten Patienten leicht erhöht, einhergehend mit einem leicht erniedrigten arteriellen Blutdruck. Bei den vorwiegend maschinell beatmeten Patienten verhindert der künstlich im Thorax erzeugte positive Druck nach Abschluss der Ausatmung einen Kollaps der Lungenbläschen. Dieser positive PEEP-Druck bewirkt, dass der pulmonalarterielle Blutdruck und der zentralvenöse Blutdruck für die meisten Patienten etwas höher sind als bei einem normal atmenden Menschen. Zu beachten ist, dass Herzfrequenz und Puls im allgemeinen die gleiche Größe messen, aber durchaus unterschiedliche Werte annehmen können. Beispielsweise kann bedingt durch Rhythmusstörungen, wie Vorhofflimmern oder absolute Arrhythmien, ein Pulsdefizit entstehen.

Variable	Min	10%–Q.	25%–Q.	Median	Mittel	75%–Q.	90%–Q.	Max
APD	40.0	55.0	60.0	65.0	65.1	70.0	74.9	95.0
APM	61.0	77.0	83.0	89.0	89.4	95.0	102.0	125.0
APS	89.0	122.0	132.0	143.5	143.4	155.0	164.0	187.0
CVP	1.0	8.0	11.0	14.0	14.8	18.0	22.0	31.0
HR	60.0	72.0	83.0	94.0	95.0	106.3	119.9	144.0
PAPD	7.0	14.0	17.0	21.0	21.4	25.3	30.0	38.0
PAPM	14.0	20.1	24.0	28.0	28.6	33.0	38.0	48.0
PAPS	21.0	29.0	33.0	38.0	38.7	44.0	49.0	66.0
Temp	33.4	36.4	36.8	37.1	37.2	37.5	38.1	40.2
Puls	61.0	73.0	83.0	94.5	95.6	106.0	120.0	143.0
SaO2	93.0	97.0	97.0	98.0	98.1	99.0	100.0	100.0

Tabelle 4.1: *Einige Quantile und das Patientenmittel aus den Medianen der hämodynamischen Variablen für 322 Patienten*

Zusätzlich zum globalen Niveau wurde für jeden Patienten als robustes Maß für die Variabilität jeder einzelnen Variable die mediane absolute Abweichung vom Median (MAD) bestimmt. In Tabelle 4.2 sind einige Kenngrößen der MADs für die 332 Patienten zusammengefasst. Auffällig ist, dass für jeweils einen Patienten die Variabilität für den zentralvenösen Blutdruck bzw. die Herzfrequenz als 0 geschätzt wird, ebenso wie für mehrere Patienten (knapp 20%) bei der Sauerstoffsättigung. Diese Schätzung ist darauf zurückzuführen, dass mindestens die Hälfte aller Beobachtungen dieser Variablen den gleichen Wert annehmen.

Die Sauerstoffsättigung ist eine essentielle Größe, die die medizinischen Pflegekräfte zur Überwachung des Atmungssystems der Patienten unbedingt benötigen. Bei der geplanten Dimensionsreduktion darf in keinem Fall Information über diese Variable verloren gehen. Eine Betrachtung der Korrelation der Sauerstoffsättigung zu den anderen Variablen zeigt außerdem keine linearen Abhängigkeiten, höchstens findet sich in den Schätzungen die Tatsache wieder, dass die Sauerstoffsättigung zusammen mit dem Puls gemessen wird. Außerdem stellen Gather, Imhoff und Fried (2002) einen künstlichen Zusammenhang zur Bluttemperatur fest, der auf eine fehlerhafte Messung der Beobachtungen zurückzuführen ist. Die folgenden Betrachtungen beschränken sich daher ausschließlich auf die zehn übrigen hämodynamischen Variablen.

Vorwiegend univariate Analysen dieser intensivmedizinischen Daten beziehen sich auf die Beschreibung stationärer physiologischer Prozesse und die Beurteilung von Interventionseffekten mittels ARIMA-Modellen (Imhoff, Bauer, Gather und Löhlein, 1997) sowie die Unterscheidung von Ausreißermustern und Niveauänderungen mittels der Phasenraumkar-

Variable	Min	10%–Q.	25%–Q.	Median	Mittel	75%–Q.	90%–Q.	Max
APD	1.48	4.45	4.45	5.93	6.47	7.41	8.90	13.34
APM	2.97	5.93	7.41	8.90	9.88	11.86	14.83	21.03
APS	5.93	10.38	13.34	16.31	17.62	20.76	25.20	42.25
CVP	0.00	1.48	2.97	2.97	3.11	4.45	4.45	8.90
HR	0.00	4.45	5.93	8.90	9.89	11.86	16.25	29.65
PAPD	1.48	2.97	2.97	2.97	3.86	4.45	5.93	10.38
PAPM	1.48	2.97	2.97	4.45	4.31	4.45	5.93	10.38
PAPS	1.48	4.11	4.45	5.93	6.15	7.41	8.90	19.27
Temp	0.07	0.15	0.30	0.44	0.47	0.59	0.74	1.63
Puls	1.48	4.45	5.93	8.90	9.82	11.86	16.31	29.65
SaO2	0.00	0.00	1.48	1.48	1.39	1.48	2.97	5.93

Tabelle 4.2: *Einige Quantile und das Patientenmittel aus den medianen absoluten Abweichungen vom Median der hämodynamischen Variablen für 322 Patienten*

te (Gather, Bauer und Fried, 2002). Außerdem untersuchen Fried und Imhoff (2004) die Online-Erkennung langsamer Trends und, unter anderem, Davies, Fried und Gather (2004) die Online-Extraktion univariater Signale.

In dieser Arbeit werden die Beobachtungen der hämodynamischen Variablen stets als multivariate Zeitreihe aufgefasst. Daher interessiert neben Niveau und Variabilität der einzelnen Variablen insbesondere die Stärke der Abhängigkeiten zwischen den Variablen. Gemäß medizinischem Vorwissen sind hohe Korrelationen zwischen den arteriellen Blutdrücken, zwischen den pulmonalarteriellen Blutdrücken und zwischen Herzfrequenz und Puls zu erwarten. Zu beachten ist dabei, dass sich der mittlere Blutdruck nicht als arithmetisches Mittel des diastolischen und des systolischen Blutdrucks berechnet, sondern durch die Integration der Druckpulskurve über die Zykluszeit bestimmt wird (Thews, Mutschler und Vaupel, 1991). Zur groben Einschätzung der mittleren Korrelation zwischen den Variablen bei den 332 betrachteten Intensivpatienten wurde für diese eine Korrelationsmatrix bestimmt. Für jede Zeitreihe wurde zunächst robust eine Korrelationsmatrix über den MCD-Schätzer aus 90% der Beobachtungen geschätzt. Aus den über die Patienten gepoolten Matrizen resultiert die folgende Schätzung für die Korrelationen:

	APD	APM	APS	CVP	HR	PAPD	PAPM	PAPS	Temp	Puls
APD	1.00	0.93	0.74	0.29	0.05	0.32	0.35	0.29	-0.09	0.04
APM	0.93	1.00	0.88	0.23	0.00	0.29	0.36	0.34	-0.12	0.00
APS	0.74	0.88	1.00	0.14	-0.04	0.21	0.30	0.31	-0.11	-0.04
CVP	0.29	0.23	0.14	1.00	-0.01	0.70	0.70	0.57	-0.03	-0.01
HR	0.05	0.00	-0.04	-0.01	1.00	0.11	0.10	0.02	0.29	0.97
PAPD	0.32	0.29	0.21	0.70	0.11	1.00	0.88	0.64	-0.01	0.11
PAPM	0.35	0.36	0.30	0.70	0.10	0.88	1.00	0.86	-0.05	0.10
PAPS	0.29	0.34	0.31	0.57	0.02	0.64	0.86	1.00	-0.08	0.02
Temp	-0.09	-0.12	-0.11	-0.03	0.29	-0.01	-0.05	-0.08	1.00	0.29
Puls	0.04	0.00	-0.04	-0.01	0.97	0.11	0.10	0.02	0.29	1.00

Die Einträge in dieser Korrelationsmatrix bestätigen die erwarteten hohen positiven Korrelationen unter den arteriellen Drücken sowie Herzfrequenz und Puls. Außerdem sind die intrathorakalen Blutdrücke, d. h. die pulmonalarteriellen Drücke und der zentralvenöse Blutdruck, wie erwartet hoch positiv korreliert. Schwächere positive Korrelationen finden sich zwischen den arteriellen und den intrathorakalen Blutdrücken. Etwas überraschend ist die schwach positive Korrelation zwischen der Bluttemperatur und Herzfrequenz bzw. Puls. Die übrigen hämodynamischen Variablen sind mit der Bluttemperatur kaum korreliert.

Zur Einschätzung der seriellen Zusammenhänge wurde für jede Zeitreihe eine 0.05–getrimmte Autokorrelationsmatrix zum Zeitlag 1 bestimmt. Der gepoolte Schätzer für die 322 Patienten lautet:

	APD	APM	APS	CVP	HR	PAPD	PAPM	PAPS	Temp	Puls
APD	0.93	0.87	0.68	0.28	0.03	0.30	0.33	0.28	-0.10	0.04
APM	0.87	0.94	0.82	0.22	-0.01	0.27	0.34	0.33	-0.12	0.00
APS	0.67	0.82	0.95	0.14	-0.04	0.20	0.28	0.30	-0.11	-0.04
CVP	0.27	0.22	0.14	0.97	0.01	0.68	0.68	0.55	-0.03	0.02
HR	0.04	0.00	-0.04	0.01	0.92	0.11	0.10	0.02	0.28	0.91
PAPD	0.30	0.27	0.20	0.68	0.11	0.91	0.84	0.61	-0.01	0.12
PAPM	0.33	0.34	0.28	0.68	0.10	0.84	0.94	0.82	-0.05	0.11
PAPS	0.28	0.33	0.30	0.54	0.03	0.60	0.82	0.95	-0.07	0.03
Temp	-0.10	-0.13	-0.11	-0.04	0.28	-0.02	-0.05	-0.08	1.00	0.28
Puls	0.04	0.00	-0.04	0.02	0.90	0.12	0.11	0.03	0.28	0.92

Zum Zeitlag 1 sind für alle hämodynamischen Variablen starke Abhängigkeiten zu erkennen. Bei der Analyse der Daten ist damit die Anwendung geeigneter zeitreihenanalytischer Verfahren, die hohe Autokorrelationen zwischen den Beobachtungen berücksichtigen, erforderlich.

Partielle Korrelationsgraphen für multivariate Zeitreihen (Dahlhaus, 2000) berücksichtigen serielle Abhängigkeiten zwischen den Beobachtungen über sämtliche Zeitlags. Eine empirische Analyse der intensivmedizinischen Daten mittels graphischer Modelle für Zeitreihen bestätigt das medizinisch erwartete Abhängigkeitsmuster (Gather, Imhoff und Fried, 2002). Das Problem, das bei der empirischen Analyse mittelstarke Zusammenhänge durch sehr starke Zusammenhänge maskiert werden können, lässt sich durch Modellwahlstrategien basierend auf Graphen–Separationen beheben (Fried und Didelez, 2003). Auch die Anwendung einer dynamischen Variante von Sliced Inverse Regression findet die durch die partiellen Korrelationsgraphen identifizierten starken Zusammenhänge wieder (Becker und Fried, 2001). Die partielle Korrelation zwischen der Bluttemperatur und den anderen hämodynamischen Variablen ist in der Regel verschwindend gering. Im Vergleich zu den anderen Variablen zeigt die Bluttemperatur ein sehr abweichendes Verhalten mit nur sehr langsamen Änderungen und langen Perioden fast konstanter Werte. Da außerdem kaum Abhängigkeiten zu den weiteren hämodynamischen Variablen vorhanden sind, wird die Bluttemperatur in den folgenden Betrachtungen zur Dimensionsreduktion nicht mit berücksichtigt.

In den weiteren Abschnitten dieses Kapitels wird untersucht, ob mit den in Kapitel 3 vorgestellten dimensionsreduzierenden Verfahren eine für den Online–Einsatz am Patientenbett geeignete Reduktion der Anzahl der hämodynamischen Variablen möglich ist.

4.2 STATISCHE DIMENSIONSREDUKTION HÄMODYNAMISCHER VARIABLEN

Gesucht ist eine Methodik zur Reduktion der hämodynamischen Variablen auf wenige Komponenten, die am Patientenbett eingesetzt werden kann. In einem Vorschritt wird in diesem Kapitel zunächst eine retrospektive Analyse der vorliegenden Daten vorgenommen, um einen ersten Eindruck von der Datenstruktur zu gewinnen. Die klassischen statischen dimensionsreduzierenden Verfahren berücksichtigen die starken Autokorrelationen zwischen den Beobachtungen nicht. Unter dem Vorbehalt, dass die Unabhängigkeitsannahme verletzt ist, wird in den folgenden Abschnitten dennoch eine statische Faktor- und Hauptkomponentenanalyse der Patientendaten durchgeführt. Eine statistische Inferenz ist damit nur stark eingeschränkt möglich, da die effektive Stichprobengröße kleiner ausfällt. Basierend auf den Ergebnissen soll im folgenden explorativ untersucht werden, ob eine „gleitende statische Dimensionsreduktion“, d. h. eine in einem kurzen gleitenden Zeitfenster durchgeführte statische Analyse der Daten, eine Lösung für das Problem der Dimensionsreduktion in Echtzeit darstellen kann.

Abschnitt 4.2.1 beschäftigt sich mit der Analyse der vorliegenden Zeitreihen auf Basis eines statischen Faktormodells. In Abschnitt 4.2.2 wird die Struktur der Daten über eine Hauptkomponentenanalyse beschrieben.

Um den Einfluss von Ausreißern in den physiologischen Daten auf die Schätzungen zu beschränken, werden meist robuste Varianten der Verfahren genutzt. Dabei wird, sofern nicht

gesondert genannt, zur Bestimmung der Kovarianz- oder Korrelationsmatrix in diesem Kapitel stets der MCD-Schätzer auf Basis derjenigen optimalen Teilstichprobe, die 90% der Beobachtungen umfasst, genutzt.

4.2.1 STATISCHE VERFAHREN DER FAKTORANALYSE

Für die Untersuchungen in diesem Abschnitt wird angenommen, dass sich die intensivmedizinischen Beobachtungen $\mathbf{x}(t)$ durch ein klassisches orthogonales Faktormodell $\mathbf{X}(t) - \boldsymbol{\mu} = \mathbf{L}\boldsymbol{\xi}(t) + \boldsymbol{\varepsilon}(t)$ beschreiben lassen. Dabei gelten die Annahmen (A.1)–(A.3), wobei $\boldsymbol{\xi}(t)$ und $\boldsymbol{\varepsilon}(t)$ zusätzlich jeweils als seriell unkorreliert aufgefasst werden.

Da die hämodynamischen Variablen auf sehr unterschiedlichen Skalen gemessen werden, erfolgt die Analyse mittels der Korrelationsmatrix. Wegen der Messartefakte und Ausreißer in den Daten wird eine robuste Faktoranalyse basierend auf der MCD-Kovarianzmatrix als Schätzer für $\boldsymbol{\Sigma}$ durchgeführt (Pison, Rousseeuw, Filzmoser und Croux, 2003). Für jeden der 332 Intensivpatienten wird retrospektiv aus der gesamten vorliegenden Zeitreihe eine Korrelationsmatrix über den MCD-Schätzer bestimmt. Gesucht werden jeweils geeignete Matrizen $\hat{\mathbf{L}} \in \mathbb{R}^{k \times r}$ und $\hat{\boldsymbol{\Psi}} \in \mathbb{R}^{k \times k}$, die eine Zerlegung der geschätzten Korrelationsmatrizen in der Form $\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{L}}^\top + \hat{\boldsymbol{\Psi}}$ ermöglichen. Für neun beobachtete hämodynamische Variablen ($k = 9$) ist eine konsistente Schätzung der Parameter nur für $1 \leq r \leq 5 \leq (2k + 1 - \sqrt{(8k + 1)})/2$ latente Faktoren möglich. Da die Anzahl latenter Faktoren unbekannt ist, werden an jede Korrelationsmatrix insgesamt fünf Modelle mit $r = 1, \dots, 5$ Faktoren angepasst. Zur Schätzung werden sowohl das Maximum-Likelihood-Prinzip als auch die Hauptkomponentenmethode verwendet.

Meth.	r	APD	APM	APS	CVP	HR	PAPD	PAPM	PAPS	Puls	gesamt
ML	1	4	48	0	0	9	1	21	0	11	94
ML	2	4	174	1	0	29	0	59	1	22	242
ML	3	1	252	1	1	27	3	151	2	18	285
ML	4	13	252	14	18	41	25	157	44	28	307
ML	5	55	150	63	106	37	67	86	77	25	293
HK	1	2	2	0	0	0	1	9	0	0	14
HK	2	3	54	1	0	4	1	37	0	5	88
HK	3	2	269	2	0	5	2	175	0	6	296
HK	4	2	260	4	0	6	1	132	0	4	291

Tabelle 4.3: Anzahl der Heywood-Fälle bei bestimmter Modellanpassung getrennt nach dem Auftreten in den verschiedenen Variablen und insgesamt bei der Analyse von 332 Datensätzen

Auffällig sind für beide Schätzverfahren und alle angepassten Modelle die hohe Anzahl von Heywood-Fällen, d. h. unzulässigen Lösungen, vgl. Tabelle 4.3. Während bei der ML-Schätzung die betroffenen Einzelrestvarianzen ψ_i durch den Wert $\epsilon = 4 \times 10^{-10}$ nach unten beschränkt werden, treten bei der Hauptkomponentenmethode sogar negative Einzelrestvarianzen auf.

Mit der Zunahme der Anzahl r latenter Faktoren nimmt die Häufigkeit des Auftretens unzulässiger Lösungen stark zu, wobei bei der Hauptkomponentenmethode etwas weniger Heywood-Fälle auftreten als bei der ML-Schätzung. Besonderes betroffen sind der arterielle und der pulmonalarterielle Mitteldruck, sowie Herzfrequenz und Puls. Auch die zulässigen Parameterschätzungen weisen sehr geringe Einzelrestvarianzen auf. Diese Beobachtungen deuten darauf hin, dass die betroffenen beobachteten Variablen oft gänzlich durch die Faktoren erklärt werden. Allerdings ist es schwierig, hieraus eine Regel abzuleiten, zumal für die verschiedenen Patienten recht ungleiche Schätzungen vorliegen.

Statistische Inferenz zur Beurteilung der Anpassungsgüte der Modelle ist für die unzulässigen Lösungen nur bedingt möglich. Für die Parameterschätzungen mit zulässigen Lösungen kann über die Likelihood-Quotienten-Statistik die Nullhypothese, dass die Kovarianzstruktur durch ein Faktormodell mit r Faktoren beschrieben werden kann, überprüft werden. Dieser Test ist für die stark autokorrelierten Daten streng genommen nicht zulässig. Wird die Teststatistik jedoch nur als Indiz für die Güte der Modellanpassung aufgefasst, so muss davon ausgegangen werden, dass ein statisches Faktormodell für die intensivmedizinischen Variablen mit bis zu fünf latenten Faktoren in den meisten Fällen nicht geeignet ist.

Dieselben faktoranalytischen Untersuchungen wurden auch unrobust für die empirischen Korrelationsmatrizen und in einer robusteren Variante für den MCD-Schätzer basierend auf 75% der Beobachtungen durchgeführt. Die Ergebnisse sind in beiden Fällen vergleichbar mit den hier vorgestellten, wobei für die empirischen Korrelationsmatrizen der Anteil der Heywood-Fälle noch größer ausfällt.

Zur Beschreibung der multivariaten Zeitreihen der hämodynamischen Variablen über den gesamten Beobachtungszeitraum ist ein statisches Faktormodell offensichtlich nicht geeignet. Neben den starken Autokorrelationen könnte dieses Ergebnis auch mit der großen Veränderlichkeit des Niveaus und der Variabilität der Variablen über den Beobachtungszeitraum hinweg begründet werden.

Abbildung 4.1 zeigt, dass die intensivmedizinischen Variablen in unterschiedlichen Zeitabschnitten verschiedenartige Muster aufweisen. Gerade die veränderten Abhängigkeiten zwischen den Variablen müssen auch von den wenigen gesuchten Faktoren widergespiegelt werden. Eine naheliegende Möglichkeit besteht darin, ein Zeitfenster über die multivariate Zeitreihe gleiten zu lassen und in jedem Beobachtungsfenster ein aktuelles Faktormodell anzupassen. Diese Idee birgt jedoch einige Probleme:

Für das Online-Monitoring sind vor allem die extrahierten Faktoren von Interesse. Diese können erst im Anschluss an die Parameterschätzung gewonnen werden. So wie sich die geschätzten Ladungen und die Anzahl der latenten Faktoren über die Zeit hinweg ändern können, verändert sich auch die Bedeutung der Faktoren, und eine Interpretation wird schwierig.

In jedem Zeitfenster wird angenommen, dass die Faktoren mit Varianz 1 standardisiert sind. Wenn sich im Verlauf der Datenaufzeichnung die Variabilität der Variablen verändert, ist diese Änderung nicht in den Faktoren abzulesen. Sofern zur Anpassung des Faktormodells die Korrelationsmatrix aus jedem Zeitfenster genutzt wird, ist eine Variabilitätsänderung nicht mehr zu erkennen. Wird die Kovarianzmatrix verwendet, so kann eine Zu- oder Abnahme der Variabilität möglicherweise aus den geschätzten Ladungen abgelesen werden.

Sollten sich für diese Probleme Lösungen finden lassen, dann ist immer noch nicht sichergestellt, dass die Anpassung eines Faktormodells auf der Basis von nur wenigen Beobachtungen eines Zeitfensters immer zulässige Parameterschätzer liefert. Eine Analyse der ersten 120 Beobachtungen der 332 Zeitreihen zeigt ebenso viele Heywood-Fälle wie die Analyse der gesamten Zeitreihen. Damit scheidet eine modellbasierte statische Faktoranalyse zur Online-Extraktion weniger medizinisch sinnvoller Faktoren aus.

4.2.2 STATISCHE VERFAHREN DER HAUPTKOMPONENTENANALYSE

Die klassische Hauptkomponentenanalyse ist ein modellfreies Verfahren, das k -dimensionale Daten so in eine r -dimensionale Hyperebene des \mathbb{R}^k projiziert, dass in dieser Hyperebene möglichst viel Information über die Beobachtungen, gemessen an der Varianz, vorliegt. Die statischen Hauptkomponenten sind einfache Linearkombinationen der zentrierten Beobachtungen, die die Daten, im Sinne der erklärten Varianz, optimal beschreiben.

Bei der retrospektiven Analyse der intensivmedizinischen Variablen liefert eine Hauptkomponentenanalyse Hinweise, wie viele Komponenten nötig sind, um einen Mindestanteil der Gesamtvarianz der Daten zu erklären. Ferner wird im folgenden untersucht, ob sich Projektionsrichtungen finden lassen, die für alle Patienten gemeinsam gut zur Beschreibung der Daten geeignet sind.

In der Praxis betrachtet die medizinische Pflegekraft bisher eine auf der persönlichen Erfahrung beruhende Auswahl der hämodynamischen Variablen, die im allgemeinen aus dem arteriellen und pulmonalarteriellen Mitteldruck und der Herzfrequenz besteht. Diese Variablenselektion ist eine subjektive Dimensionsreduktion und ein Spezialfall einer statischen Projektion der Daten in einen hier dreidimensionalen Unterraum. Für die Mediziner ist es zum einen wichtig, die repräsentativ gewählten Vitalparameter klinisch interpretieren zu können, zum anderen können zur Variablenselektion zunächst nur physiologische Überlegungen herangezogen werden. Diese subjektive Dimensionsreduktion wird im folgenden mit Ansätzen verglichen, die auf statistischen Kriterien basieren. Um den Einfluss von Ausreißern auf die Analysen zu beschränken, wird hierbei eine robuste Hauptkomponentenanalyse basierend auf dem MCD-Funktional verwendet (Croux und Haesbroeck, 2000).

Da die hämodynamischen Variablen auf unterschiedlichen Skalen gemessen werden, ist vorab eine Skalierung notwendig, um ein Übergewicht der Variablen mit der größten Varianz zu vermeiden. In jedem Datensatz des vorliegenden Patientenkollektivs werden die neun hämodynamischen Variablen daher zunächst spezifisch standardisiert. Dazu wird die statische Hauptkomponentenanalyse auf Basis der retrospektiv aus den Daten geschätzten MCD-Korrelationsmatrizen durchgeführt. Hierbei werden die Zeitreihen zunächst für den gesamten Beobachtungszeitraum als stationär angenommen. Die Beobachtungen werden also für jeden Datensatz $i = 1, \dots, 332$, durch einen robust geschätzten Lageparameter $\boldsymbol{\mu}^i$ zentriert. Abweichungen von der patientenspezifischen Lage $\boldsymbol{\mu}^i$ werden der Variabilität zugeschrieben. Von Interesse ist vor allem der Anteil der Gesamtvarianz, den die j -te geschätzte Hauptkomponente $\hat{Y}_j^{(i)}$, $j = 1, \dots, 9$, in jedem Datensatz $i = 1, \dots, 332$ beschreibt. Dazu sind in Abbildung 4.2 für jede Komponente $j = 1, \dots, 9$ Boxplots für die geschätzten Eigenwerte $\hat{\lambda}_j$ der MCD-Korrelationsmatrizen aller untersuchten intensivmedizinischen Datensätze dargestellt.

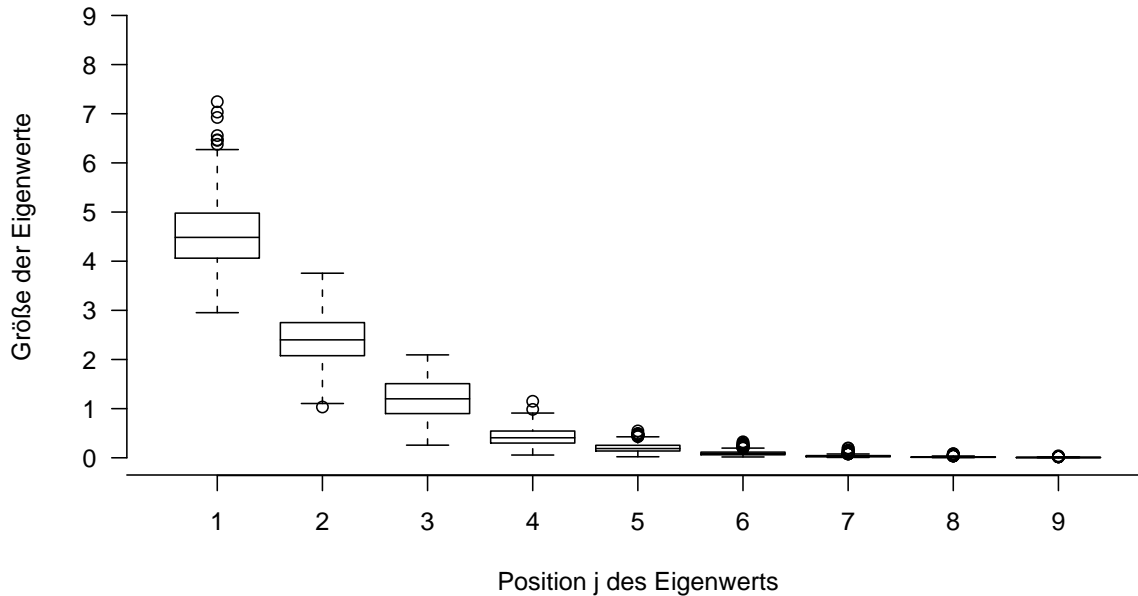


Abbildung 4.2: Boxplots über die Varianzen, die den j -ten Hauptkomponenten zugeschrieben werden

Abbildung 4.2 kann als ein gemeinsamer Scree-Plot für 332 „Populationen“ aufgefasst werden. Offensichtlich beschreiben die ersten drei Hauptkomponenten sukzessive jeweils den Hauptanteil der Varianz der Daten. Für einige Datensätze ist auch die vierte Hauptkomponente nicht zu vernachlässigen. Die übrigen Linearkombinationen steuern in der Regel nur wenig Information bei. Abbildung 4.3 (a) zeigt den Anteil an der Gesamtvariabilität, der jeweils gemeinsam von den ersten r , $r = 1, \dots, 8$, Hauptkomponenten beschrieben wird. Um

für alle untersuchten Datensätze bei einer retrospektiven statischen Analyse mindestens 80% der Varianz der standardisierten Beobachtungen zu beschreiben, genügen drei Hauptkomponenten. Mit vier (fünf) Hauptkomponenten gelingt es stets, mindestens 90% (95%) der Variabilität in den Daten zu erklären.

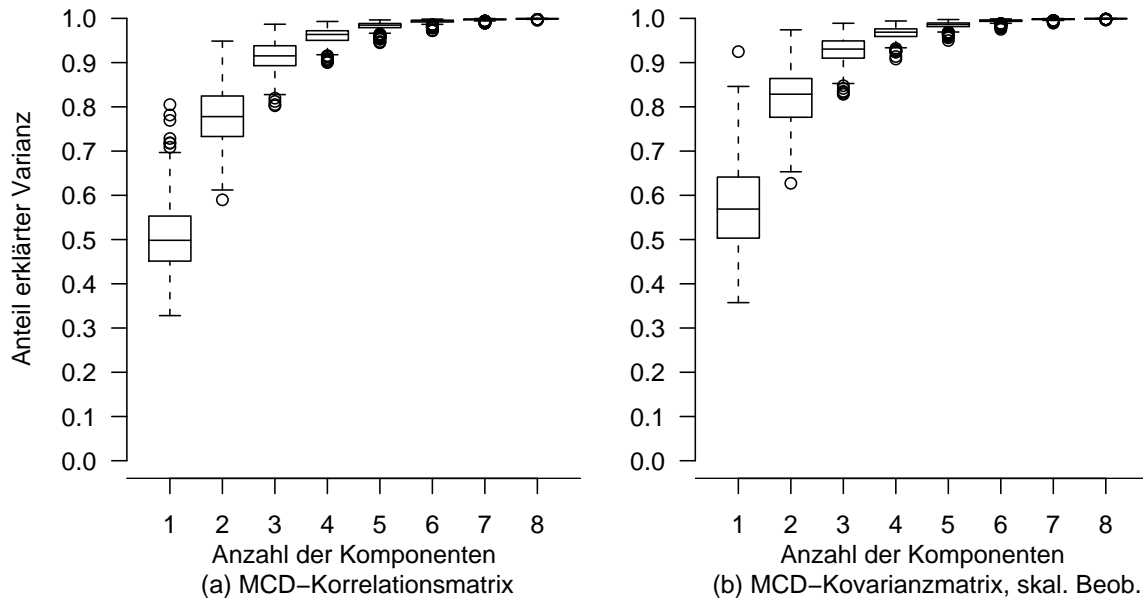


Abbildung 4.3: *Boxplots über den Anteil der Varianz, der von den ersten r -ten Hauptkomponenten erfasst wird*

Da die patientenspezifischen Varianzen der einzelnen hämodynamischen Variablen in der Praxis unbekannt sind, ist eine individuelle Standardisierung der Beobachtungen direkt nach der Messung im Unterschied zur retrospektiven Analyse nicht möglich. Werden die vorliegenden Daten als Referenzdaten aufgefasst, lassen sich Lage und Varianz aus diesem Patientenkollektiv jedoch robust schätzen. Dazu wurde ein Mittel der MCD-Schätzungen für Lage und Skala der hämodynamischen Variablen mit Zielwerten, die ein Mediziner für einen durchschnittlichen beatmeten Intensivpatienten annehmen würde, abgeglichen. Im weiteren werden sämtliche Beobachtungen mit den folgenden Werten für Lage (Standardabweichung) standardisiert: APD: 66 (6.5), APM: 90 (10), APS: 145 (17.5), CVP: 14.5 (3.4), HR: 94 (10.5), PAPD: 21.5 (4), PAPM: 28.5 (4.5), PAPS: 38.5 (6.3), Puls: 94.5 (11). Gemessen auf dieser Skala ist die Gesamtvariabilität für die einzelnen Patienten natürlich unterschiedlich. Da die gewählte Skalierung gemeinsam für alle Patienten gilt, ist hierbei im Gegensatz zur individuellen Skalierung jedoch ein Vergleich von Patienten mit größerer bzw. kleinerer Varianz in verschiedenen Variablen möglich. Diese Information kann Aufschluss darüber geben, wie stabil der Zustand des hämodynamischen System eines Patienten ist. Bei einer robusten Hauptkomponentenanalyse der so skalierten Beobachtungen beschreiben die ersten r

Hauptkomponenten ähnliche Anteile der Gesamtvarianz wie für die Korrelationsmatrizen, vgl. auch Abbildung 4.3 (b).

Die für jeden Patienten optimalen Projektionsrichtungen einer statischen Hauptkomponententransformation können aus den Daten retrospektiv geschätzt werden, sind aber bei Beginn der Datenaufzeichnung nicht bekannt. Von Interesse ist daher, ob für die Daten verschiedener Patienten gemeinsame Hauptkomponenten existieren und wie im Vergleich dazu die in der Praxis genutzte subjektive Variablenauswahl der Mediziner abschneidet.

Gemeinsame Hauptkomponenten für die 332 Datensätze werden zunächst über eine CPC-Transformation (Flury, 1988) bestimmt, vgl. Kapitel 2.1.1. Da bei der Analyse der hämodynamischen Variablen hauptsächlich die ersten drei Hauptkomponenten interessieren, wird im folgenden ein partielles CPC-Modell mit drei gemeinsamen orthogonalen Projektionsrichtungen $\beta_{(3)}^{cpc}$ für alle Datensätze angenommen. Die übrigen sechs Komponenten sind für die einzelnen Datensätze spezifisch. Für die gemeinsamen Hauptkomponenten und deren Beitrag bei der Beschreibung der Gesamtvarianz ist dabei keine Reihenfolge festgelegt.

Basierend auf den MCD-Kovarianzmatrizen der skalierten Beobachtungen werden aus den hämodynamischen Daten mit Hilfe numerischer Verfahren drei gemeinsame Projektionsrichtungen $\hat{\beta}_{(3)}^{cpc}$ geschätzt. Da der verwendete Algorithmus (Phillips, 2000) so implementiert wurde, dass er höchstens mit 256 Matrizen rechnen kann, werden dazu aus den 332 Zeitreihen diejenigen 256 mit den längsten Beobachtungszeiträumen ausgewählt. Die resultierenden gemeinsamen Projektionsrichtungen $\hat{\beta}_{(3)}^{cpc}$ sind in Tabelle 4.4 (a) dargestellt.

Variable	(a) CPC(3)-Modell						(b) repräsentativer Unterraum					
	$\hat{\beta}_{(3)}^{cpc}$			Varimax-rot.			$\hat{\beta}_{(3)}^{cs}$			Varimax-rot.		
APD	0.30	0.48	0.06	0.03	0.57	0.05	0.37	0.38	0.14	0.02	0.55	0.03
APM	0.29	0.52	0.01	0.00	0.60	0.00	0.39	0.43	0.12	0.01	0.59	-0.00
APS	0.25	0.51	-0.04	-0.03	0.57	-0.05	0.37	0.45	0.11	-0.02	0.59	-0.02
CVP	0.42	-0.26	-0.06	0.49	-0.03	-0.04	0.33	-0.29	-0.16	0.46	-0.03	-0.07
HR	0.01	-0.02	0.73	-0.00	0.00	0.73	0.01	-0.21	0.70	-0.01	0.00	0.72
PAPD	0.45	-0.26	0.03	0.52	-0.01	0.05	0.38	-0.35	-0.06	0.52	-0.02	0.05
PAPM	0.47	-0.25	0.01	0.53	0.01	0.03	0.42	-0.33	-0.07	0.54	0.02	0.04
PAPS	0.41	-0.20	-0.05	0.46	0.02	-0.04	0.39	-0.27	-0.11	0.48	0.03	-0.02
Puls	0.01	-0.09	0.67	-0.00	0.00	0.68	0.01	-0.20	0.65	-0.00	-0.00	0.68

Tabelle 4.4: Geschätzte gemeinsame Projektionsrichtungen $\hat{\beta}_{(3)}^{cpc}$ aus (a) CPC(3)-Modell für 256 Datensätze und geschätzte Projektionsrichtungen $\hat{\beta}_{(3)}^{cs}$ des (b) mittleren dreidimensionalen Unterraums basierend auf einer robusten Hauptkomponentenanalyse der 332 Datensätze und Projektionsrichtungen nach Varimax-Rotation

Die Ladungen des Hauptkomponentenvektors $\hat{\beta}_1^{cpc}$ beschreiben ein gewichtetes Mittel aller gemessenen Blutdrücke, während der Vektor $\hat{\beta}_2^{cpc}$ eine Differenz aus einem gewichteten Mittel der arteriellen Drücke und einem gewichteten Mittel der intrathorakalen Drücke darstellt. Die dritte Komponente ist hauptsächlich ein gewichtetes Mittel von Herzfrequenz und Puls. Nach einer Varimax-Rotation der Matrix $\hat{\beta}_{(3)}^{cpc}$ lassen sich die Richtungen für den Mediziner noch besser interpretieren, die Linearkombinationen beschreiben nämlich jeweils ein gewichtetes Mittel der arteriellen und der intrathorakalen Blutdrücke sowie von Herzfrequenz und Puls. Die Ladungsstruktur der rotierten Hauptkomponenten legt drei einfache Block-Komponenten, so wie sie bei einer SC-Analyse (*engl. simple component*, Rousson und Gasser, 2004) gesucht werden, nahe. Durch die Rotation ändert sich der aufgespannte dreidimensionale Unterraum nicht, jedoch sind die rotierten Hauptkomponenten im allgemeinen korreliert.

Anstelle der Aufgabe, maximal unkorrelierte gemeinsame Komponenten zu finden, kann daher auch der Unterraum, der die spezifischen Unterräume der ersten drei Hauptkomponenten der 332 Datensätze bestmöglich repräsentiert, gesucht werden (Krzanowski, 1979), vgl. Kapitel 2.1.1. Dazu wird aus den robust geschätzten Hauptkomponentenrichtungen für die 332 Datensätze gemäß (2.4) eine Orthonormalbasis $\beta_{(3)}^{cs}$ des zugehörigen durchschnittlichen dreidimensionalen Unterraums geschätzt. Zusammen mit der Varimax-rotierten Lösung ist die geschätzte Matrix $\hat{\beta}_{(3)}^{cs}$ in Tabelle 4.4 (b) dargestellt. Die Vektoren sind offensichtlich sehr ähnlich zu den Projektionsrichtungen der gemeinsamen Hauptkomponenten $\beta_{(3)}^{cpc}$ geschätzt aus nur 256 Datensätzen. Mit der Metrik aus (2.3) lässt sich der Abstand der Unterräume, die aus den Vektoren aus Tabelle 4.4 (a) und (b) aufgespannt werden, bestimmen. Dieser kann hier maximal einen Wert von $\sqrt{3} \approx 1.73$ annehmen. Tatsächlich ist der Abstand mit $\mathbb{D}(\mathcal{G}_{\beta_{(3)}^{cpc}}, \mathcal{G}_{\beta_{(3)}^{cs}}) = 0.07$ sehr klein. Die mittels verschiedener Verfahren und zum Teil unterschiedlichen Daten gefunden Projektionsrichtungen sind damit offensichtlich außerordentlich stabil.

Außerdem lassen sich die Abstände der durch die ersten drei spezifischen Hauptkomponenten aufgespannten Unterräume der 332 untersuchten Datensätze zu dem gemeinsamen Unterraum angeben. Der Median dieser Abstände beträgt 0.48, bei einem Minimum von 0.18 und einem Maximum von 1.1. Der mittlere Wert dieser Abstände ist damit recht klein (zur Interpretation der Werte der Metrik vgl. auch Anhang B) bei einer verhältnismäßig großen Streuung. Da die Werte der Metrik zwischen den Unterräumen nicht einfach zu interpretieren sind, sind in Abbildung 4.4 die sukzessive kleinsten Winkel zwischen den Basisvektoren der spezifischen Unterräume und dem durchschnittlichen Unterraum dargestellt. Insgesamt sind zumindest jeweils für zwei Projektionsrichtungen die entsprechend kleinsten Winkel zum durchschnittlichen Unterraum sehr gering. Für etwa die Hälfte aller Datensätze gibt es jedoch in einer Richtung größere Abweichungen vom durchschnittlichen Unterraum. Dabei ist die abweichende Richtung für die 332 Datensätze verschieden. Die Daten eines Großteils der Patienten werden durch eine Projektion in den mittleren Unterraum also recht gut beschrieben, allerdings ist die Streuung ziemlich groß.

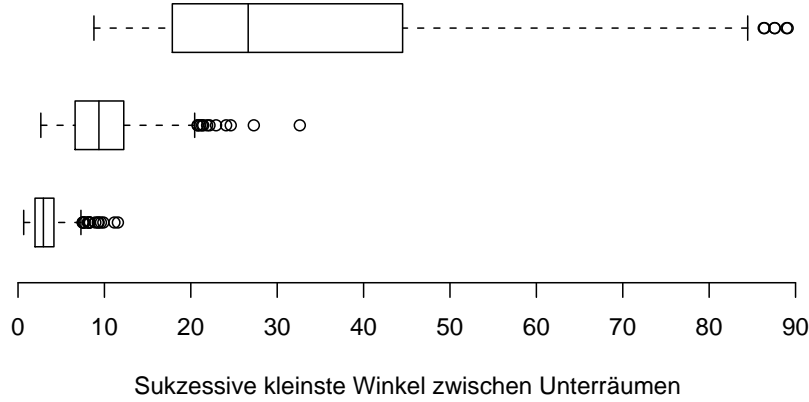


Abbildung 4.4: *Boxplots der sukzessive kleinsten Winkel der Basisvektoren der dreidimensionalen Unterräume basierend auf der Hauptkomponentenanalyse der 332 Datensätze hämodynamischer Variablen zu den Basisvektoren des zugehörigen durchschnittlichen Unterrums*

Wie in Abschnitt 3.2.2 können die aus dem Patientenkollektiv geschätzten Varimax-rotierten gemeinsamen Hauptkomponentenrichtungen $\beta_{(3)}^{cs}$ für eine Online-Analyse als Referenz-Projektionsrichtungen aufgefasst werden. Dazu ist von Interesse, ob diese Linearkombinationen genügend Information, d. h. hier Varianz, aus den Daten jedes einzelnen Patienten beschreiben. Gleichzeitig wird untersucht, wie groß der Anteil an der Gesamtvarianz der Daten ist, der von einer in der Praxis üblichen subjektiven Variablenselektion (VS) des Mediziners erfasst wird. Dazu werden drei Variablen ausgewählt, nämlich der arterielle und der pulmonalarterielle Mitteldruck und die Herzfrequenz.

Zur Beurteilung der Erklärungsgüte ist ein geeignetes Kriterium notwendig (Gervini und Rousson, 2004). Hier wird die Güte einer linearen Regression der beobachteten Variablen auf die jeweils ausgewählten Linearkombinationen der Variablen betrachtet (*BLP*, *best linear prediction*), d. h.

$$\text{BLP}(\beta_{(r)}, \Sigma) = \frac{\text{tr}(\Sigma \beta_{(r)} (\beta_{(r)}^T \Sigma \beta_{(r)})^{-1} \beta_{(r)}^T \Sigma)}{\text{tr}(\Sigma)}. \quad (4.1)$$

Der Wert des BLP-Kriteriums hängt nur von dem aufgespannten Unterraum und nicht von den Spaltenvektoren selbst ab.

Die Erklärungsgüte der ersten drei Komponenten basierend auf der jeweils spezifischen Hauptkomponententransformation, den gemeinsamen Projektionsrichtungen $\hat{\beta}_{(3)}^{cp}$, den Projektionsrichtungen $\hat{\beta}_{(3)}^{cs}$ des durchschnittlichen Unterrums und der subjektiven Variablenselektion wurde für jeden Datensatz bestimmt. Boxplots für diese Größen sind in Abbildung 4.5 dargestellt.

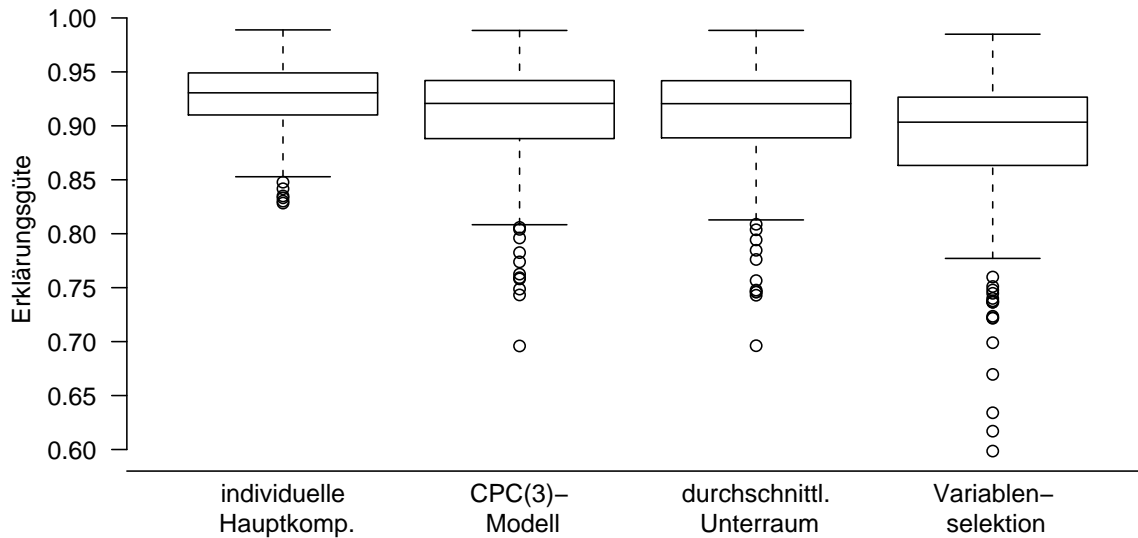


Abbildung 4.5: Boxplots über den Anteil erklärter Varianz bei drei Projektionsrichtungen basierend auf verschiedenen Auswahl-Kriterien

Im Mittel ist der Anteil an der Gesamtvarianz, den die ersten drei gemeinsamen Komponenten beschreiben, nur um knapp 1% geringer als bei den für die einzelnen Kovarianzmatrizen spezifischen optimalen Hauptkomponenten. Allerdings streut die Erklärungsgüte bei der Verwendung gemeinsamer Projektionsrichtungen stärker als bei der individuellen Lösung. Trotz der Subjektivität der Variablenauswahl des Mediziners schneidet dieses Vorgehen für einige Datensätze erstaunlich gut ab. Im Mittel wird mit der Variablenselektion etwa 90% der Variabilität erfasst, wobei hier die Streuung jedoch weiter zunimmt. Nicht für jeden Patienten ist eine Reduktion auf diese drei ausgewählten Variablen geeignet.

Für jeden einzelnen Datensatz ist die spezifische Projektion natürlich die optimale Lösung. Ein direkter Vergleich der Erklärungsgüte bei Verwendung der Projektionsrichtungen $\hat{\beta}_{(3)}^{cs}$ mit der Variablenauswahl des Mediziners für die einzelnen Patienten zeigt, dass in fast allen Fällen die gefundenen gemeinsamen Referenz-Richtungen besser abschneiden als eine Variablenselektion. Eine gemeinsame Skalierung und anschließende Projektion der hämodynamischen Beobachtungen auf die drei gemeinsamen statischen Referenzrichtungen ist somit einer subjektiven Variablenselektion vorzuziehen. Da die Linearkombinationen der gemeinsamen Projektionsrichtungen eine einfache, medizinisch sinnvolle Gestalt haben, sind sie auch für die medizinische Pflegekraft relativ gut zu interpretieren. Die vorangegangenen Analysen führen die Untersuchungen, die Imhoff, Fried, Gather und Lanius (2003) für eine kleine Auswahl an Datensätzen anstrengen, in größerem Umfang fort und bestätigen dabei die dort gefundenen Ergebnisse.

Für die statischen Hauptkomponentenanalysen der vorliegenden Daten über den vollständigen Beobachtungszeitraum wurden die Zeitreihen bisher global als stationär aufgefasst. Das robust geschätzte langfristige Mittel $\hat{\boldsymbol{\mu}}^i$ diente dabei zur Zentrierung der Beobachtungen des i -ten Patienten, $i = 1, \dots, 332$. Sämtliche Abweichungen vom globalen Mittel $\hat{\boldsymbol{\mu}}^i$ fließen so in die Schätzung der statischen Kovarianzstruktur ein.

Bei den vorliegenden Zeitreihen sind die Abweichungen vom langfristigen Mittel jedoch nicht nur zufällig verteilt, sondern größtenteils systematischer Natur. Wie Abbildung 4.1 exemplarisch zeigt, ist das Niveau der einzelnen Variablen stark zeitveränderlich mit Trends und temporären sowie permanenten Niveauänderungen unterschiedlicher Größe.

Werden diese strukturellen Lageänderungen als Fehler aufgefasst, wirkt sich dies stark auf die Schätzung der Kovarianzmatrix aus. So bestimmen hauptsächlich die Niveauänderungen diejenigen Richtungen, die den vermeintlich größten Anteil der Gesamtvarianz beschreiben. Dabei ist es sicherlich auch eine Frage der Interpretation der Daten, inwiefern die Schwankungen um das globale Mittel auf Niveauänderungen oder auf Fehler zurückzuführen sind. Die gefundenen gemeinsamen Hauptkomponenten der hämodynamischen Variablen erfassen genau die systematischen Niveauänderungen der drei Variablengruppen, die die medizinische Pflegekraft üblicherweise durch eine subjektiv ausgewählte, repräsentative Variable überwacht. Da die Linearkombinationen der Variablen mehr Informationen ausnutzen als eine Variablenselektion, können die Daten damit etwas besser beschrieben werden. Eine globale statische Hauptkomponentenanalyse der stark strukturierten hämodynamischen Zeitreihen liefert in Sinne der praktischen Anwendung also eine vernünftige Lösung.

Mit den festen Projektionsrichtungen ist es nicht möglich, Änderungen in der Kovarianzstruktur zu entdecken. Zur Erkennung von veränderten Abhängigkeitsstrukturen führen Kano, Hasebe, Hashimoto und Ohno (2001) lokale Hauptkomponentenanalysen in einem gleitenden Zeitfenster durch. Für jedes Datenfenster wird der Unterraum, der von den lokal optimalen Projektionsrichtungen aufgespannt wird, mit einem festen Referenz-Unterraum verglichen. Dabei wird zur Zentrierung der Beobachtungen ein langfristiges globales Mittel genutzt. Dieser feste Zielwert erschwert es jedoch zu erkennen, ob lokale Projektionsrichtungen von der Referenz abweichen. Wenn das lokale Mittel in etwa mit den Zielwert übereinstimmt, können lokal veränderte Abhängigkeitsstrukturen leicht aufgedeckt werden. Falls das lokale Niveau aber stark vom langfristigen Mittel abweicht, besitzen Linearkombinationen, die die Daten in die Richtung projizieren, in die das lokale Mittel verschoben ist, in der Regel die größte Varianz. Die lokale Lageverschiebung dominiert dann die lokal geschätzten Hauptkomponenten, und Änderungen unter den Abhängigkeiten werden nicht erkannt. Bei lokal stark vom Zielwert abweichendem Niveau ist so beispielsweise eine erhöhte Amplitude der arteriellen Blutdrücke kaum festzustellen.

Bei der Online-Aufzeichnung der Daten ist das langfristige Mittel der Variablen für den einzelnen Patienten unbekannt. Da die Patienten für die verschiedenen Variablen abhängig

von ihrem physiologischen Grundzustand individuell sehr unterschiedliche Optimalwerte haben, ist die Verwendung eines allgemeingültigen Zielvektors nicht adäquat.

Alternativ ist es jedoch denkbar, ein zeitveränderliches Mittel anzunehmen und dies in jedem Zeitfenster neu zu schätzen (Li, Yue, Valle–Cervantes und Qin, 2000). Für die Beobachtungen eines Zeitfensters wird dabei ein konstantes Niveau vorausgesetzt. Durch die Projektion der Daten auf den Unterraum der r ersten lokalen Hauptkomponenten können die Beobachtungen in jedem Zeitfenster im Sinne erklärter Varianz jeweils optimal approximiert werden. Änderungen in der Abhängigkeitsstruktur machen sich in den resultierenden Projektionsrichtungen bemerkbar. Da sich die Interpretation der resultierenden Hauptkomponenten fortlaufend ändern kann, stellt dieser Ansatz für die medizinische Pflegekraft eine große Herausforderung dar und ist für die Praxis nicht wirklich nützlich.

Deshalb lohnt es sich, vorab zu untersuchen, ob die gefundenen Referenzrichtungen $\hat{\beta}_{(3)}^{cs}$ in der Lage sind, die Daten in einem gleitenden Fenster und bei einer Zentrierung mit dem lokalen Niveau ausreichend gut zu beschreiben. Im Vergleich wird jeweils die Erklärungsgüte einer lokal optimalen Approximation mit drei Hauptkomponenten festgehalten.

Für die Untersuchung wird ein gleitendes Zeitfenster mit einer Länge von 60 Minuten über alle Zeitreihen des untersuchten Patientenkollektivs geschoben. Um sicherzugehen, dass Ausreißer in den kleinen Stichproben die Schätzung nicht verzerren, beruht die lokale Hauptkomponentenanalyse jeweils auf dem MCD–Lage- und Kovarianzschätzer, der aus der optimalen Teilstichprobe mit 80% der Beobachtungen bestimmt wird. Für jeden Datensatz wird eine 5–Punkte–Zusammenfassung der Erklärungsgüten aus allen Zeitfenstern angegeben.

Abbildung 4.6 zeigt Boxplots für die 5–Punkte–Zusammenfassungen der Erklärungsgüten, sowohl für den jeweils lokal optimalen dreidimensionalen Unterraum als auch für die Projektion in den durch $\hat{\beta}_{(3)}^{cs}$ aufgespannten Referenzunterraum. Durch die lokal optimalen Approximationen werden mit drei Hauptkomponenten in jedem Zeitfenster und für jeden Datensatz mindestens 64% der Gesamtvarianz des Datenfensters beschrieben. Überwiegend ist die Erklärungsgüte sogar noch viel höher, so dass drei Komponenten offensichtlich lokal ausreichend sind.

In den meisten Fällen beschreiben auch die festen Referenzrichtungen einen durchaus zufriedenstellenden Anteil an der Gesamtvarianz in den untersuchten Zeitfenstern. Dieses erstaunlich gute Abschneiden ist jedoch zum Teil wieder auf systematische Trends und Niveauänderungen zurückzuführen, die die lokal geschätzte Varianz der betroffenen Variablen aufblähen. Bei starken strukturellen Änderungen werden durch die lokalen Hauptkomponenten bei fensterweise konstantem Niveau häufig genau diese Lageänderungen beschrieben. Die systematischen Änderungen lassen sich so auch in einem kurzen Zeitfenster nicht von den Fehlern trennen.

Bei einem Großteil der untersuchten Datensätze ist die Beschreibung der Daten durch die Referenzrichtungen lokal nicht für alle Zeitfenster ausreichend. In diesen Fällen werden unter Umständen wichtige Informationen aus den Daten nicht erfasst.

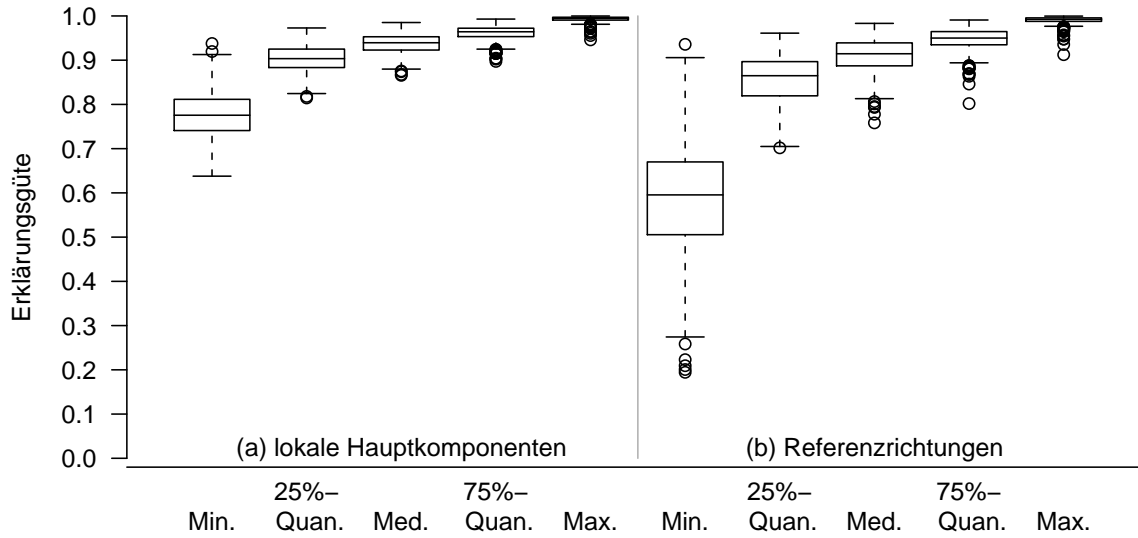


Abbildung 4.6: Boxplots über die 5–Punkte–Zusammenfassungen des Anteils erklärter Varianz für (a) lokale Hauptkomponentenanalysen und (b) feste Referenzrichtungen im gleitenden Fenster von 60 Minuten

Um auszuschließen, dass systematische, strukturelle Lageänderungen die Schätzung der Kovarianzmatrix dominieren, kann eine der folgenden Alternativen verwendet werden.

Eine Möglichkeit besteht darin, das zeitveränderliche Niveau zunächst mit Hilfe von Signal-extraktionsverfahren robust aus den Daten zu schätzen. Dabei wird zu jedem Zeitpunkt $t, t = 1, \dots, T$, angenommen, dass der Zufallsvektor $\mathbf{X}(t)$ den Erwartungswert $\boldsymbol{\mu}(t)$ besitzt. Anschließend werden für jedes $t, t = 1, \dots, T$, die Fehler $\mathbf{X}(t) - \boldsymbol{\mu}(t)$ bestimmt, die zur Schätzung der lokalen Hauptkomponenten genutzt werden. Dieser Ansatz wird der Idee der Hauptkomponentenanalyse stärker gerecht, ist aber keine praktische Lösung für das Problem der Reduktion der Variablen des hämodynamischen Systems auf wenige Komponenten. Im allgemeinen enthalten die Fehler nämlich kaum medizinisch relevante Information zur Beurteilung des Gesundheitszustands des Patienten.

Ein in der Zeitreihenanalyse üblicher Ausweg ist die Differenzierung nicht stationärer Prozesse. Bei der Analyse ökonometrischer Zeitreihen sind integrierte Zeitreihenmodelle häufig gut zur Beschreibung der Daten geeignet. Für die hier vorliegenden hämodynamischen Zeitreihen scheinen die Strukturen, die die Nichtstationarität ausmachen, jedoch vielmehr auf ausgeprägte systematische Trends und Niveauänderungen zurückzugehen. Zusätzlich zeigen die intensivmedizinischen Daten auch längere stationäre Phasen mit nahezu konstantem Niveau überlagert von zufälligem Rauschen. Die Problematik der Nichtstationarität der vorliegenden Zeitreihen wird in Kapitel 4.3.1 weiter diskutiert.

Langfristig ist das zeitliche Mittel für die differenzierten Zeitreihen natürlich Null, in Phasen mit ausgeprägten Trends haben die Differenzen jedoch einen von Null verschiedenen Erwartungswert. Bei einer Online-Hauptkomponentenanalyse in einem gleitenden Fenster besteht hierbei wieder das Problem der Zentrierung der Daten. Zusätzlich muss die Skalierung geeignet angepasst werden. Die größte Schwierigkeit ist letztlich die Interpretation der resultierenden Linearkombinationen der differenzierten Beobachtungen.

Sowohl bei der Differenzierung der Zeitreihen als auch bei der Analyse des Rauschens nach Extraktion der Signale geht die relevante Information über das zeitveränderliche Mittel verloren. Zur Beurteilung des Zustands eines Intensivpatienten sind jedoch vor allem das Niveau, die systematischen strukturellen Veränderungen zwischen den verschiedenen Variablen und die Variabilität dieser Größen als Maß für die Stabilität des Patientenzustands von Interesse.

In der Praxis ist damit ein dimensionsreduzierendes Verfahren nötig, das mittels weniger Komponenten Informationen über die Lage und Lageänderungen einzelner Variablen und auch der Variablen zueinander liefert, verbunden mit einer zusätzlichen Überwachung der Variabilität.

Als eine Verbesserung gegenüber der gängigen Praxis könnte die subjektive Variablenauswahl der medizinischen Pflegekraft durch die Betrachtung der Linearkombinationen gemäß der festen Referenzrichtungen bei patientenspezifischem Zielvektor ersetzt werden.

In diesem Zusammenhang könnten weitere Fortschritte erzielt werden, indem die Zeitreihenstruktur der Daten ausgenutzt wird. Im weiteren wird daher untersucht, inwieweit die dynamischen Varianten dimensionsreduzierender Verfahren die Daten beschreiben und zur geeigneten Reduktion auf wenige Komponenten beitragen können.

4.3 DYNAMISCHE DIMENSIONSREDUKTION HÄMODYNAMISCHER VARIABLEN

Bisher wurden zur Reduktion der Variablen des hämodynamischen Systems im Online-Monitoring nur statische Verfahren betrachtet. Wegen der starken zeitlichen Abhängigkeiten zwischen den Beobachtungen sollten hierzu jedoch geeignete Erweiterungen solcher Methoden auf multivariate Zeitreihen herangezogen werden. In Kapitel 3.1 wurden die Möglichkeiten zahlreicher dynamischer Faktormodelle, die vielfältigen Abhängigkeiten zwischen den Komponenten einer multivariaten Zeitreihe zu erfassen, diskutiert. Außerdem wurden in Kapitel 3.2 Erweiterungen der klassischen Hauptkomponentenanalyse auf Zeitreihendaten vorgestellt.

Im folgenden soll explorativ die Eignung dieser Modelle und Methoden zur Beschreibung der hämodynamischen Zeitreihen untersucht werden. Die Bewertung dieser Verfahren erfolgt vor allem hinsichtlich des Ziels der verbesserten Online-Überwachung des Zustands von Intensivpatienten.

Abschnitt 4.3.1 betreibt die Modellierung der intensivmedizinischen Daten durch dynamische Faktormodelle. In einem ersten Schritt ist es dabei notwendig zu überlegen, durch welche Klasse multivariater Zeitreihenmodelle die vorliegenden Beobachtungen am besten charakterisiert werden können. Daran anschließend können adäquate dynamische Faktormodelle ausgewählt und an die Daten angepasst werden.

Eine möglichst gute Beschreibung der Daten unter Ausnutzung der Information zeitlich versetzter Beobachtungen wird mittels dynamischer Hauptkomponentenverfahren in Abschnitt 4.3.2 untersucht.

4.3.1 DYNAMISCHE VERFAHREN DER FAKTORANALYSE

Zur Modellierung univariater intensivmedizinischer Zeitreihen wurden ARIMA-Modelle bereits erfolgreich genutzt (Imhoff und Bauer, 1997). Für die Modellierung der multivariaten Daten mittels dynamischer Faktormodelle ist gleichfalls zunächst eine geeignete Klasse multivariater Zeitreihenmodelle auszuwählen. In den vorhergehenden Abschnitten wurde bereits angesprochen, dass die vorliegenden hämodynamischen Zeitreihen meist nicht über den gesamten Beobachtungszeitraum hinweg stationär sind. So gibt es neben Phasen, in denen der Zustand des Patienten stabil ist, wiederholt Phasen mit strukturellen Lageänderungen, wie Trends und spontanen Niveauänderungen, als auch Abschnitte mit erhöhter Variabilität.

Beim Vorliegen instationärer Zeitreihen werden klassischerweise die entsprechend differenzierten Daten analysiert. Sofern jede Komponente eines multivariaten Prozesses $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^k$ integriert ist, ist es dennoch möglich, dass m , $1 \leq m < k$, stationäre Linearkombinationen dieser k Komponenten existieren. In einem solchen Kointegrationsfall ist es erforderlich, diese Eigenschaften durch ein Modell (ECM, *error correction model*) angemessen zu erfassen. Ansonsten können bei der Differenzierung der kointegrierten Zeitreihe Informationen über die dynamischen Gleichgewichtsbeziehungen verloren gehen. Für einen kointegrierten Prozess $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^k$ mit Kointegrationsrang m lässt sich folgern, dass der Prozess $k - m$ gemeinsame integrierte Faktoren besitzt (Escribano und Peña, 1994). Für die intensivmedizinischen Zeitreihen scheint der Grundgedanke der Kointegration brauchbar, denn wenn der systolische und der diastolische Blutdruck steigen, dann muss der mittlere Blutdruck binnen kurzem auch steigen.

Hinsichtlich der vorhergehenden Überlegungen wird hier zunächst überprüft, ob die hämodynamischen Beobachtungen univariat und über den gesamten Beobachtungszeitraum durch integrierte Zeitreihenmodelle repräsentiert werden können. Dazu wird für jede Zeitreihe aller 332 Datensätze des Patientenkollektivs explorativ die Hypothese einer Einheitswurzel untersucht. Es werden jeweils die Teststatistiken und p-Werte des Dickey-Fuller-Tests (DF), des erweiterten Dickey-Fuller-Tests (ADF) mit 6 Zeitlags und des Einheitswurzeltests nach Phillips und Perron (1988) bestimmt. Im Gegensatz zu Einheitswurzeltests für Zeitreihen mit Ausreißern sind diese Tests in statistischer Standardsoftware implementiert. Da die Testvor-

aussetzungen für die Daten aufgrund von Ausreißern und Artefakten nur bedingt als erfüllt angenommen werden können, sind die Testergebnisse als rein deskriptiv aufzufassen. Es zeigt sich, dass für alle Tests in mindestens 87% (ADF) – 97% (PP) aller Fälle die Hypothese der Einheitswurzel abgelehnt werden sollte. Für die multivariate Modellierung sind damit auch Modelle, die für den gesamten Beobachtungszeitraum kointegrierte Prozesse annehmen, nicht geeignet.

Trotz der ausgeprägten nicht stationären strukturellen Änderungen in den hämodynamischen Zeitreihen ist dieses Ergebnis durchaus plausibel. Charakteristischerweise können die einzelnen Zeitreihen physiologisch bedingt nur Werte innerhalb bestimmter Intervalle annehmen, ohne dass der Zustand des Patienten lebensbedrohlich wird und Interventionen erfordert. Da durch medikamentöse Maßnahmen zudem das Ziel verfolgt wird, die Patienten künstlich auf einem bestimmten Niveau zu halten, bleibt das langfristige Mittel der Zeitreihen meist konstant. Auch nimmt die Varianz mit der Liegedauer nicht zu, sondern es sind phasenweise veränderliche Varianzen zu beobachten. Letztere Eigenschaft ist für Prozesse mit einer Einheitswurzel nicht typisch.

Bei der Modellierung einzelner kürzerer Zeitabschnitte der univariaten hämodynamischen Zeitreihen finden Imhoff, Bauer, Gather und Fried (2002), dass zur Beschreibung der Daten oft stationäre AR-Modelle niedriger Ordnung ausreichen. Dies gilt insbesondere hinsichtlich der gewünschten Anwendung dieser Modelle im Online-Monitoring. Zur Vereinfachung der Aufgabe in der Echtzeit-Situation ist es von Interesse, innerhalb der Klasse der AR-Modelle eine universelle Modellordnung festzulegen, die bei der Mustererkennung in intensivmedizinischen Zeitreihen sinnvolle Ergebnisse liefert.

Aufgrund der Ergebnisse aus der univariaten Modellierung werden im folgenden auch für die multivariaten Zeitreihen ARMA-Modelle für stationäre Prozesse betrachtet. Trotz Verletzungen der Modellannahmen wird in dieser Modellklasse explorativ untersucht, ob sich dynamische Faktormodelle finden lassen, die für einen Großteil der Daten weitestgehend akzeptabel sind.

Mit dem umfassenden dynamischen Faktormodell aus (3.4) können zeitinvariant beliebig komplexe lineare Zusammenhänge in stationären Zeitreihenmodellen beschrieben werden. Zum einen können zeitlich weit zurückreichende Abhängigkeiten modelliert werden, und zum anderen sind sehr flexible Faktorladungen möglich, so dass der direkte Einfluss beliebiger zeitverzögerter Faktoren auf die Variablen erfasst werden kann. Die Mächtigkeit dieser Modelle erweist sich für die zu lösende Aufgabe der Extraktion weniger Faktoren aus den hämodynamischen Zeitreihen jedoch als unbrauchbar.

Bei der Dimensionsreduktion der Vitalparameter gilt in der Praxis den gemeinsamen Faktoren das Hauptinteresse. Diese Faktoren werden im dynamischen Faktormodell (3.4) aus Identifikationsgründen zunächst als unabhängige Zufallschocks mit konstanter Varianz angenommen. Bei der Modellanpassung besteht sowohl im Frequenz- als auch im Zeitbereich

der erste Schritt jeweils in der Schätzung des Filters der Faktorladungen. Schätzer für die gewünschten Faktoren selbst können erst später gewonnen werden.

Gemäß Bemerkung 3.2 ist bei der Schätzung im Frequenzbereich nicht sichergestellt, dass ein kausaler Filter der Faktorladungen geschätzt wird. Für eine geplante Online-Anwendung ist dies problematisch. Bei der Schätzung im Zeitbereich ergeben sich kausale und endliche Filter, sofern eine Einschränkung auf die Klasse dynamischer Faktormodelle aus (3.9) möglich ist. Dazu muss sich der Filter der Faktorladungen aus (3.4) gemäß (3.13) faktorisieren lassen. Wenn die Ordnung eines Filters der Faktorladungen gegen unendlich geht, ohne dass der Filter in einfachere Elemente zerlegt werden kann, ist eine Interpretation der gemeinsamen Faktoren sehr schwierig. Um die Wirkung der Faktoren zu verstehen, ist es in diesen Fällen notwendig, zusätzlich jeweils den gesamten geschätzten Filter hinzuzuziehen.

Aus Identifikationsgründen wird zudem die Varianz der Faktoren auf 1 festgelegt. Da das Faktormodell skaleninvariant ist, finden sich unterschiedliche Varianzen in getrennt voneinander modellierten Beobachtungszeiträumen einer Zeitreihe nur im Filter der Faktorladungen wieder. Bei der Analyse der Patientendaten ist es jedoch gerade wünschenswert, Phasen unterschiedlicher Variabilität an den gemeinsamen Faktoren erkennen zu können.

In der Situation des Online-Monitorings muss die Schätzung außerdem für neu hinzukommende Beobachtungen ständig aktualisiert werden, um Strukturänderungen zu erfassen. Änderungen im Faktorladungsfilter ziehen schnell Änderungen bei den gemeinsamen Zufallschocks nach sich. Wie Bemerkung 3.1 aufzeigt, sind die Faktorschocks ohne weitere Restriktionen jedoch nicht eindeutig, da bei der Schätzung im Frequenzbereich über Rotationen Phasenverschiebungen herbeigeführt werden können.

Für die retrospektive Modellierung hochdimensionaler stationärer Zeitreihen und eine sorgfältige Analyse der möglicherweise weit zurückreichenden Wechselbeziehungen zwischen den einzelnen Komponenten oder aber zur Trennung der Beobachtungen in gemeinsame und spezifische Komponenten $\chi(t)$ und $\varepsilon(t)$ ist diese umfassende Klasse dynamischer Faktormodelle gut geeignet. Bei der praktischen Anwendung am Patientenbett sind jedoch einfachere Modelle mit Faktoren, die die relevanten Strukturänderungen der Vitalparameter beschreiben, notwendig.

Forni, Hallin, Lippi und Reichlin (2003) modellieren die Einflüsse zeitverzögerter Faktoren auf die beobachteten Variablen durch endliche Filter, wobei die Dynamik des Faktorprozesses getrennt davon im \mathbb{R}^r erfasst wird. Sowohl für den $(k \times r)$ -Filter $\{\mathbf{L}(s), s = 1, \dots, m\}$ der Faktorladungen als auch für den $(r \times r)$ -Filter $\{\Phi(s), s = 1, \dots, p\}$ des invertiblen AR-Prozesses in (3.14) werden endliche Ordnungen m und p angenommen.

Bei der Anpassung eines dynamischen Faktormodells aus (3.14) an eine multivariate stationäre Zeitreihe ist insbesondere die Ordnung m des Faktorladungsfilters von großem Interesse. Ist ein Filter der Ordnung $m > 0$ nötig, resultiert ein möglicherweise relativ komplexes DFM, das für die verschiedenen Zeitlags den direkten Einfluss vergangener Faktorscores auf die beobachteten Variablen beschreibt. Falls zur Beschreibung der Daten ein DFM mit der

Ordnung $m = 0$ genügt, ist das Faktormodell wie in (3.15) statisch, und die gemeinsame Dynamik wird ausschließlich von dem Faktorprozess modelliert (Engle und Watson, 1981; Peña und Box, 1987).

Im folgenden soll explorativ untersucht werden, ob sich die hämodynamischen Online-Monitoring-Daten aus der Intensivmedizin mit einem dynamischen Faktormodell dieser Art geeignet beschreiben lassen. Dabei wird zusätzlich die Annahme getroffen, dass die r Komponenten des Faktorprozesses stochastisch unabhängig sind.

Im dynamischen Faktormodell (3.13), als auch dem Spezialfall mit $m = 0$ aus (3.15), können die unbekannten Modellparameter und Werte für den latenten Faktorprozess mit Hilfe des EM-Algorithmus geschätzt werden. Für die Anpassung dynamischer Faktormodelle an die vorliegenden intensivmedizinischen Zeitreihen werden zunächst Startschätzungen für die Ladungsmatrizen $\hat{L}(0)$ der einzelnen Zeitreihen gesucht. Dazu wird hier die in Kapitel 3.1.2 vorgeschlagene Prozedur genutzt. Aufgrund der vorhandenen Ergebnisse aus der statischen Analyse der Daten werden für den Faktorprozess jeweils $r = 3$ Komponenten gewählt. Für die Schätzung wird die Anzahl der berücksichtigten Zeitlags auf $s^* = 5$ festgelegt, wobei sich die Ergebnisse jedoch kaum von den Schätzungen mit $s^* = 3$ oder $s^* = 4$ unterscheiden.

Es ist bekannt, dass die Eigenwert/Eigenvektor-Strukturen der Autokovarianzmatrix zum Zeitlag 0 und der Autokovarianzmatrizen für niedrige Zeitlags sehr ähnlich sind, falls die gemeinsamen latenten Faktoren nicht stationär sind (Tiao und Tsay, 1989). Dies gilt auch bei der Schätzung mittels generalisierter Autokovarianzmatrizen im Fall von möglicherweise integrierten Faktorprozessen (Peña und Poncela, 2000). Hierbei liefert das Vorgehen nach Peña und Box jeweils ähnliche Ergebnisse wie eine statische Hauptkomponentenanalyse.

Um abzuschätzen, ob und wie stark dies für die nicht stationären intensivmedizinischen Daten zutrifft, wurden die im Peña-Box-Modell geschätzten Ladungsmatrizen mit den individuell geschätzten Hauptkomponentenrichtungen verglichen. Hierzu wurde mittels der Metrik aus (2.3) für jeden Datensatz der Abstand zwischen dem Unterraum der robust geschätzten Projektionsrichtungen der statischen Hauptkomponenten und dem Spaltenraum der Ladungsmatrix bestimmt. Der Median dieser Abstände ist mit 0.23 relativ gering (vgl. Anhang B). Über alle Datensätze betragen die Mediane der sukzessive kleinsten Winkel zwischen den Unterräumen 0.6° , 2.6° und 12.5° . Bei der Analyse der intensivmedizinischen Daten können somit gleichsam die Projektionsrichtungen einer statischen Hauptkomponentenanalyse als Startschätzung für die Ladungsmatrix verwendet werden.

Zu Beginn der Datenaufzeichnung liegen für einen Patienten noch nicht genügend Beobachtungen vor, um eine spezifische Anfangs-Ladungsmatrix zu bestimmen. Für die Daten aller Patienten kann jedoch als gemeinsame Startschätzung der Ladungsmatrix entsprechend die Matrix der gemeinsamen Projektionsrichtungen einer statischen Hauptkomponentenanalyse genutzt werden. Wie in Abschnitt 4.2.2 ist hierbei das Problem der Zentrierung und Skalierung der Beobachtungen und der Schwierigkeit bei der Unterscheidung von Effekten, die auf strukturelle Lageänderungen bzw. Variabilität zurückgehen, zu bedenken.

Bei der Anpassung dynamischer Faktormodelle gemäß (3.13) an die intensivmedizinischen Daten werden im folgenden verschiedene Modellordnungen gewählt. Das Ziel ist, mit Hilfe von Modellwahlkriterien zu erforschen, mit welcher Klasse dynamischer Faktormodelle die Zeitreihen geeignet beschrieben werden können. Zunächst werden die Modelle jeweils gemäß (3.16) als Zustandsraummodell ausgedrückt. Als Modellordnungen werden für den $(k \times r)$ -Faktorladungsfiler $\{\mathbf{L}(s), s = 0, \dots, m\}$ die Werte $m = 0$ (Modell (3.15)) und $m = 1$ gewählt. Für die AR-Prozesse der latenten Faktoren werden die Ordnungen $p = 1, 2, 3$ zugrunde gelegt. Natürlich ist die angenommene Normalverteilung der Fehler bei den intensivmedizinischen Daten aufgrund der vielen Artefakte und Ausreißer kritisch.

Aufgrund der Existenz lokaler Optima der Likelihood werden für die unbekannten Modellparameter verschiedene Startwerte vorgegeben. Allerdings ist die Anzahl der unbekannten Parameter für die neundimensionalen hämodynamischen Zeitreihen bei dreidimensionalen Faktorprozessen schon recht hoch. Als Startschätzung für die Ladungsmatrix $\mathbf{L}(0)$ wird die Matrix der gemeinsamen Projektionsrichtungen aus Tabelle 4.4 vor und nach Rotation und für $\mathbf{L}(1)$ gegebenenfalls die $(k \times r)$ -Nullmatrix gewählt. Zusätzlich werden die Koeffizienten der AR-Prozesse für die latenten Faktoren und die Kovarianzmatrizen der Fehler aus der Beobachtungs- und Zustandsgleichung variiert.

Die Parameterschätzung erfolgt anschließend mit Hilfe des EM-Algorithmus. Die Iteration wird abgebrochen, wenn die relativen Änderungen für sämtliche Schätzwerte und dem Wert der Likelihood kleiner als 0.01 bzw. 0.0001 sind. In Abhängigkeit von der Komplexität des Modells werden bis zum Abbruch im Mittel 300 bis 1300 Iterationen bei einer großen Streuung mit bis zu ca. 2000 Iterationen benötigt.

Die erzielten Werte für die jeweiligen Likelihoodfunktionen ebenso wie die Parameterschätzungen hängen stark von den gewählten Startwerten ab. Dabei ist unter den Startwerten kein Parametersatz auszumachen, der durchgängig für die verschiedenen Datensätze größere Werte für die Likelihood liefert als andere. Es kann nicht angenommen werden, dass das größte gefundene lokale Maximum auch dem globalen Maximum der Likelihoodfunktion entspricht. Die Werte der AIC-/BIC-Kriterien fallen abhängig von der untersuchten Zeitreihe sehr unterschiedlich aus. So ist es auch nicht möglich, tendenziell festzustellen, ob zur Beschreibung der Daten allgemein eher statische oder dynamische Faktormodelle nötig sind.

Überdies sind die Schätzungen für die AR-Koeffizienten der Faktorprozesse für fast alle Zeitreihen derart, dass die Lösungen der zugehörigen charakteristischen Gleichung auf dem Einheitskreis liegen. Dieses Resultat deutet stark darauf hin, dass für die latenten Faktorprozesse integrierte Prozesse angenommen werden sollten. Nach Escribano und Peña (1994) folgt daraus aber, dass die beobachtete multivariate Zeitreihe kointegriert ist. Dies widerspricht jedoch den Ergebnissen aus den Analysen zur Integration der Zeitreihen zu Beginn dieses Abschnitts.

Insgesamt scheinen stationäre dynamische Faktormodelle gemäß (3.13) mit zeitinvarianten Parametern zur globalen Modellierung der intensivmedizinischen Daten nicht geeignet zu

sein. Ebenso wenig wie die Zeitreihen über den gesamten Beobachtungszeitraum als integriert angenommen werden können, können sie global durch stationäre ARMA-Modelle beschrieben werden. Lokal gibt es dagegen sowohl Phasen, in denen die Daten die Hypothese der Einheitswurzel unterstützen, als auch Zeitabschnitte, die als stationär bezeichnet werden können.

Bei der Analyse der intensivmedizinischen Zeitreihen ist es somit schwierig, ein einziges Modell für den gesamten Beobachtungszeitraum anzunehmen. Stattdessen muss – und das entspricht dem Online-Charakter der Daten – lokal jeweils ein geeignetes Modell gefunden werden, das die aktuelle Struktur der Beobachtungen erfasst. Das bedeutet nicht nur, dass die Parameter in der gleichen Modellklasse adaptiv geschätzt werden, sondern möglicherweise ist damit auch eine Änderung der Modellordnung oder des Modelltyps verbunden. In der Praxis ist in der Situation des Online-Monitorings eine sorgfältige Modellsuche und -anpassung aufgrund der vielen Möglichkeiten und der hohen Anzahl an Variablen kaum möglich. Für die vorliegende Problemstellung ist eine solche, gegebenenfalls recht komplexe, Modellierung nur bedingt hilfreich, da zur Beurteilung des Zustands der Patienten wenige einfache Indikatoren von Interesse sind.

Vereinfachend könnte ein universell gewähltes dynamisches Faktormodell in der Online-Situation stets beibehalten werden, verbunden mit einer ständigen Aktualisierung der Parameterschätzungen. Dies erfordert von den medizinischen Pflegekräften allerdings ein hohes Verständnis des jeweils angepassten Modells. Mit einem von der Zeit abhängigen Filter der Ladungsmatrizen ändert sich gleichermaßen die Bedeutung der latenten Faktorzeitreihen, welche wiederum zeitweise sowohl als stationäre oder auch integrierte Prozesse aufgefasst werden müssen. Der Übergang von einem Modell mit stationären zu einem Modell mit integrierten Faktoren stellt dabei eine besondere Schwierigkeit dar. Während eine sorgfältige adaptive Modellierung retrospektiv sicherlich möglich ist, wird bei der Online-Anwendung in der Intensivmedizin ein einfacherer Ansatz benötigt.

Alternativ können instationäre Zeitreihen über Modelle beschrieben werden, die annehmen, dass die Beobachtungen durch eine von der Zeit abhängige deterministische Funktion generiert werden. Dabei wird diese Funktion von einem stationären Prozess überlagert. Auf diese Weise lassen sich die Beobachtungen wiederum lokal gut beschreiben, eine globale Modellierung über den gesamten Beobachtungszeitraum ist meist nicht möglich. Für die Online-Anwendung sind solche Modelle bei der lokalen Beschreibung der Zeitreihen jedoch interessant. So enthält die unbekannte deterministische Funktion gerade die Trends und Lageänderungen, die zur Beurteilung des Zustands eines Patienten relevant sind. Die Schwankungen um dieses Signal und die Artefakte sind medizinisch meist wenig bedeutsam. Eine Möglichkeit zur Gewinnung weniger einfacher Komponenten könnte daher auf diesen Modellansätzen beruhen. Diese Idee wird in Kapitel 5 weiter verfolgt.

4.3.2 DYNAMISCHE VERFAHREN DER HAUPTKOMPONENTENANALYSE

Eine einfache globale Modellierung der vorliegenden Daten mittels statischer oder dynamischer Faktormodelle scheint aufgrund der vorhergehenden Ergebnisse nicht möglich. Jedoch zeigt eine Approximation der Daten mit statischen Hauptkomponenten im Vergleich zu der in der Praxis verwendeten Variablenselektion Vorteile. Während eine statische Hauptkomponentenanalyse angewendet auf Zeitreihen nur die Kovarianzstruktur von k Variablen, die zu den selben Zeitpunkten gemessen werden, auswertet, nutzen dynamische Varianten auch Informationen über die seriellen Abhängigkeiten aus.

Eine Hauptkomponentenanalyse im Frequenzbereich (Brillinger, 1975) berücksichtigt die Beobachtungen zu allen verfügbaren Zeitlags aus Vergangenheit und Zukunft des betrachteten Prozesses. Gesucht wird die beste Approximation der multivariaten Zeitreihe mittels eines Filters von reduziertem Rang.

Für die hämodynamischen Zeitreihen ist die Voraussetzung der globalen Stationarität nicht erfüllt. Allerdings kann explorativ untersucht werden, ob sich die Daten unter Ausnutzung serieller Abhängigkeiten besser beschreiben lassen als durch statische Hauptkomponenten. Der Ansatz ist über die Stichprobenversion des Minimierungsproblems aus (3.19) geometrisch zu rechtfertigen (Lanius und Gather, 2003). So ist der Approximationsfehler (3.21) bei einer Hauptkomponentenanalyse im Frequenzbereich immer höchstens so groß wie derjenige einer statischen Hauptkomponentenanalyse bei der gleichen Anzahl an Komponenten. Retrospektiv wird für die 332 Datensätze des Patientenkollektivs eine Brillinger Hauptkomponentenanalyse im Frequenzbereich durchgeführt. Dazu werden die Beobachtungen der Zeitreihen vorab individuell für jeden Datensatz standardisiert. Die Schätzung der Spektraldichtematrizen erfolgt über einen direkten Spektraldichteschätzer, wobei die Periodogramm-Matrizen mit einem modifizierten, d. h. sukzessive angewendeten, Daniell-Fenster (Bloomfield, 2000) moderat geglättet werden.

Zunächst wird untersucht, wie groß der erklärte Anteil an der Gesamtvarianz an den einzelnen Frequenzen ist. Hierzu können die dynamischen Eigenwerte $\lambda_j(\alpha)$, $j = 1, \dots, k$, $\alpha \in [0, 2\pi]$, an jeder Fourierfrequenz genutzt werden.

Abbildung 4.7 zeigt den über die 332 Datensätze gemittelten, kumulativen Anteil der Varianz, der von den ersten r , $r = 1, \dots, 8$, dynamischen Hauptkomponenten an 200 Fourierfrequenzen $\alpha_i = i\pi/200$, $i = 1, \dots, 200$, erklärt wird, d. h. $\sum_{j=1}^r \lambda_j(\alpha_i) / \sum_{j=1}^9 \lambda_j(\alpha_i)$. Offensichtlich werden an allen Frequenzen ähnliche Anteile der Variabilität erfasst. Mit drei dynamischen Hauptkomponenten werden über die Frequenzen und Datensätze gemittelt knapp 90% der Varianz beschrieben. Damit genügen bei der Analyse im Frequenzbereich drei dynamische Hauptkomponenten zur angemessenen Approximation der hämodynamischen Zeitreihen.

Von Interesse ist vor allem, wie viel besser die Daten durch die dynamischen Hauptkomponenten im Vergleich zu den statischen Komponenten beschrieben werden können. Neben

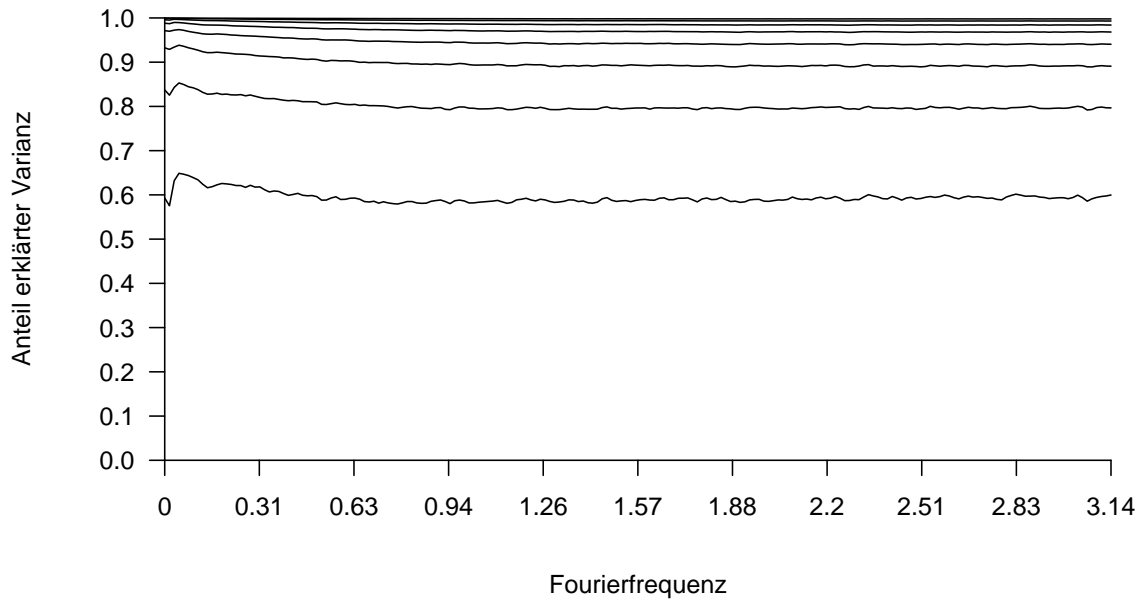


Abbildung 4.7: Kumulativer Anteil der Varianz, der sukzessive von den ersten r , $r = 1, \dots, 8$, dynamischen Hauptkomponenten an jeder Frequenz erklärt wird, gemittelt über 332 analysierte Datensätze

der Betrachtung der einzelnen Frequenzen wird für jeden Datensatz daher der Approximationsfehler, und darüber die Erklärungsgüte, bestimmt. Die Anteile der durch drei dynamische Hauptkomponenten erklärten Varianz sind in Abbildung 4.8 (a) gegen die Erklärungsgüten statischer Hauptkomponenten basierend auf der empirischen Korrelationsmatrix abgetragen. Im Mittel wird durch die Hauptkomponentenanalyse im Frequenzbereich etwa ein Anteil von 5% mehr an der Gesamtvarianz beschrieben.

Allerdings ist die dynamische Hauptkomponentenanalyse von Brillinger (1975) nicht robust, so dass die Schätzung durch Ausreißer empfindlich verzerrt werden kann. In Abbildung 4.8 (b) wurden die Erklärungsgüten daher gegen den Anteil erfasster Varianz einer statischen Hauptkomponentenanalyse basierend auf den MCD(0.9)–Korrelationsmatrizen abgetragen. Dabei schneidet die dynamische Hauptkomponentenanalyse ungefähr genauso gut ab wie die robuste statische Analyse. Dieser Vergleich ist nicht wirklich fair, da sich Gesamtvarianz und die erklärten Anteile bei den beiden Ansätzen unterscheiden. Allerdings wird deutlich, wie stark die Ausreißer die empirische Korrelationsmatrix beeinflussen, so dass merkliche Unterschiede in der Approximationsgüte auftreten. Die Anfälligkeit gegenüber Ausreißern ist ein Grund, die Ergebnisse der dynamischen Hauptkomponentenanalyse vorsichtig zu betrachten.

Wenn die Annahmen erfüllt sind, liefert die Hauptkomponentenanalyse im Frequenzbereich nützliche Ergebnisse, sofern eine theoretische Analyse der dynamischen Eigenwerte

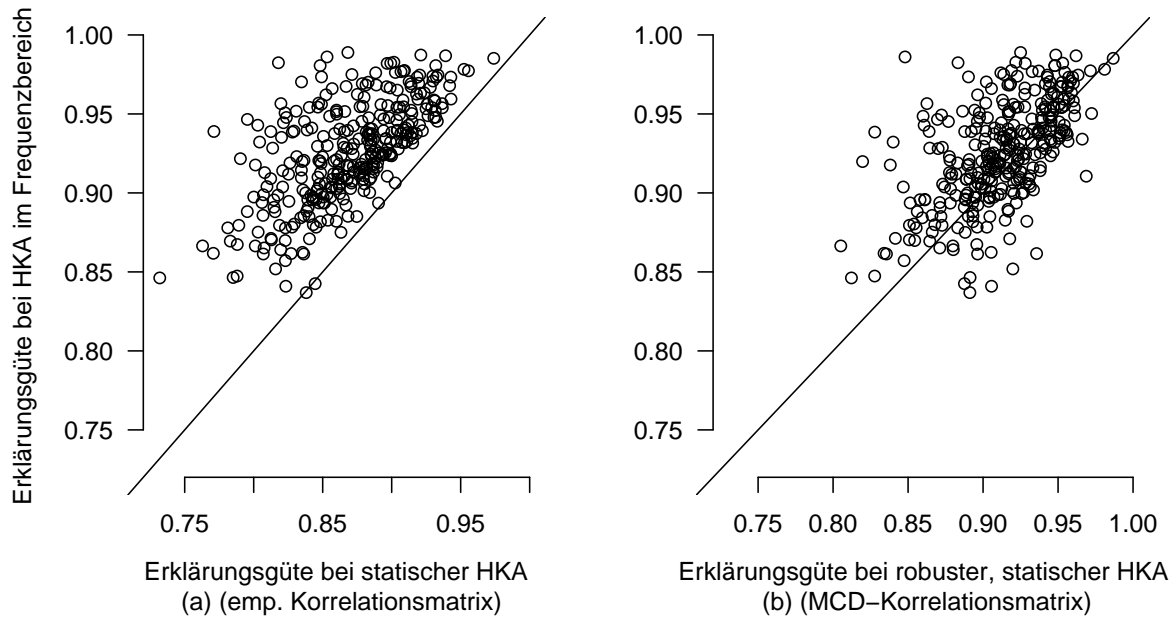


Abbildung 4.8: Erklärungsgüten einer Hauptkomponentenanalyse im Frequenzbereich versus Erklärungsgüten (a) einer statischen Hauptkomponentenanalyse der empirischen Korrelationsmatrizen und (b) einer robusten statischen Hauptkomponentenanalyse (MCD-Korrelationsmatrizen) über die gleichen Datensätze

und -vektoren bzw. die beste niedrigdimensionale Approximation von Interesse sind (Forni, Hallin, Lippi und Reichlin, 2000b). Eine Interpretation der dynamischen Hauptkomponenten ist schwierig, da die dynamischen Eigenvektoren an jeder Fourierfrequenz im komplexen Raum rotiert werden können. Damit verbundene praktische Probleme diskutieren Lanius und Gather (2003). Die Interpretation kann zwar durch kontrollierte Prokrustes-Rotationen verbessert werden, doch ist immer noch der gesamte Filter notwendig, um eine dynamische Hauptkomponente zu verstehen. Eine sinnvolle Online-Anwendung der Methode scheint wegen der erforderlichen hohen Stichprobengröße und die Nichtkausalität der Filter nicht erreichbar. Daher wird hier auch auf eine Robustifizierung des Verfahrens verzichtet.

In der Prozesskontrolle werden zur Bestimmung dynamischer Hauptkomponenten für autokorrelierte Beobachtungen nicht sämtliche Zeitlags mit berücksichtigt. Stattdessen wird eine statische Hauptkomponentenanalyse der durch zeitverzögerte Beobachtungen erweiterten Datenmatrix vorgenommen (Ku, Storer und Georgakis, 1995).

Da für die physiologischen Zeitreihen weder Zielwerte noch Referenz-Projektionsrichtungen für alle Patienten bekannt sind oder sinnvoll festgelegt werden können, ergeben sich hierbei die gleichen Probleme wie bei einer statischen Hauptkomponentenanalyse (vgl. Abschnitt 4.2.2).

Ein weiterer Nachteil dieser dynamischen Hauptkomponenten besteht darin, dass bei den resultierenden Linearkombinationen aktuelle und zeitverzögerte Variablen oft ähnliche Gewichte erhalten. In diesem Fall werden Muster in den beobachteten Variablen häufig geglättet. Beispielsweise wird ein einzelner beobachteter Ausreißer zum Zeitpunkt t^* mit geringerem Gewicht jeweils in die Berechnung der dynamischen Hauptkomponenten an den Zeitpunkten $t^*, t^* + 1, \dots, t^* + w$ einfließen. Somit können sich Ausreißer in diesen Hauptkomponenten in Form von temporären Niveauänderungen und Niveauänderungen in Form von Trends bemerkbar machen.

4.4 WEITERE VERFAHREN ZUR DIMENSIONSREDUKTION

In Kapitel 3.3 wurden ergänzend weitere Verfahren vorgestellt, die dazu geeignet sind, aus autokorrelierten multivariaten Beobachtungen wenige Komponenten zu extrahieren. Diese Methoden suchen jeweils nach einer, in einem gewissen Sinne, bestmöglichen linearen Transformation der Beobachtungen, so dass die resultierenden Linearkombinationen bestimmte Informationen aus den Daten enthalten. Auch für die intensivmedizinischen Daten wurde untersucht, ob mit Hilfe dieser Ansätze ein Erkenntnisgewinn für das Problem der Dimensionsreduktion im Online-Monitoring möglich ist.

Die Minimum/Maximum Autokorrelations-Faktoranalyse ist vor allem deswegen interessant, weil die Maximum Autokorrelations-Faktoren bei nicht stationären multivariaten Zeitreihen dazu neigen, Trends in den Daten zu repräsentieren. Die Erkennung von Trends ist im Online-Monitoring von besonderem Interesse.

Die globale Anwendung der Methode auf die intensivmedizinischen Zeitreihen des vorliegenden Patientenkollektivs zeigt jedoch sehr schwierig zu interpretierende Ergebnisse. Für die einzelnen Datensätze resultieren höchst unterschiedliche Maximum Autokorrelations-Faktoren. Dabei sind die gefundenen Linearkombinationen im Gegensatz zur Hauptkomponentenanalyse häufig keine gewichteten Mittel einiger Variablen, d. h. Block-Komponenten, sondern vielfach Kontraste zwischen verschiedenen Variablen. Oft werden sogar einzelne Variablen mit geringer Variabilität selektiert. Für eine geeignete Analyse ist natürlich problematisch, dass die intensivmedizinischen Variablen meist keine globalen Trends über den gesamten Beobachtungszeitraum aufweisen. Stattdessen machen lokale Auf- und Abwärtstrends die medizinisch relevanten Strukturen aus. Eine lokale Analyse in einem gleitenden Zeitfenster bedeutet jedoch wie zuvor bei der Hauptkomponentenanalyse große Probleme bei der Interpretation.

Entsprechendes gilt ebenso für Kontinuum-Faktormodelle, welche beispielsweise die Hauptkomponentenanalyse oder die Minimum/Maximum Autokorrelations-Faktoranalyse als Spezialfälle enthalten.

Als weitere Alternative bietet sich zur Untersuchung der Daten eine Independent Component Analyse an. Diese verfolgt das Ziel, möglichst unabhängige Signale aus den Daten zu extrahieren. Unter der Annahme, dass die interessanten Signale diejenigen sind, deren Verteilung im Sinne eines geeigneten Kriteriums möglichst stark von einer Normalverteilung abweicht, lassen sich einige Signale als die gesuchten Komponenten zur Überwachung des Patientenzustands auffassen. Eine globale Analyse der hämodynamischen Zeitreihen mit einer Independent Component Analyse zeigt für die einzelnen Patienten individuell sehr unterschiedliche Projektionsrichtungen, die kaum sinnvoll interpretiert werden können. Daher scheint es zweifelhaft, dass dieses Verfahren für den praktischen Einsatz am Patientenbett geeignet ist.

4.5 SCHLUSSFOLGERUNGEN

Das Ziel dieser Arbeit ist, eine Prozedur vorzuschlagen, die online die Extraktion weniger relevanter und interpretierbarer Komponenten aus multivariaten hämodynamischen Zeitreihen im Intensivmonitoring erlaubt. Basierend auf diesen Indikatoren sollen einfache Rückschlüsse auf den Zustand der überwachten Patienten möglich sein. Dazu wurde in diesem Kapitel die Anwendbarkeit von klassischen statischen Verfahren der Dimensionsreduktion als auch den entsprechenden dynamischen Erweiterungen dieser Methoden für Zeitreihen auf die Daten untersucht.

Den verschiedenen Ansätzen ist gemeinsam, dass sie in der Regel eine lineare Transformation der Variablen suchen, die gewisse Informationen aus den Daten gemäß eines vorgegebenen Kriteriums oder im Rahmen eines statistischen Modells passend darstellt.

Gängige Praxis bei der Aufzeichnung vieler Vitalparameter auf der Intensivstation ist bisher die Selektion einiger weniger Variablen durch die medizinische Pflegekraft. In Abschnitt [4.2.2](#) konnte diesbezüglich gezeigt werden, dass eine Projektion der Beobachtungen auf drei universelle gemeinsame Hauptkomponenten in der Lage ist, deutlich mehr Information aus den Daten, im Sinne des Anteils erklärter Varianz, zu erfassen. Die Interpretation dieser Komponenten nach Rotation ist dabei vergleichbar gut wie die Betrachtung einzelner Variablen.

Eine globale Modellierung der intensivmedizinischen Zeitreihen mit Hilfe statischer oder dynamischer Faktormodelle erweist sich als äußerst schwierig. Die Strukturen, die die vorliegenden Daten prägen, deuten darauf hin, dass die Anpassung solcher Modelle nur lokal sinnvolle Ergebnisse liefert. Dies verhindert jedoch die Anwendung der Methoden in der Praxis. So besteht der Ausgangspunkt der Untersuchungen in dieser Arbeit gerade darin, dass die Erfassung des Informationsgehalts einer hochdimensionalen Zeitreihe im Online-Monitoring zu komplex ist. Daher wird eine Vereinfachung hinsichtlich der Darstellung der relevanten Informationen angestrebt. Eine sorgfältige lokale Modellanpassung vervielfacht unter Umständen jedoch die Größen, die zur Bewertung des Patientenzustands ausgewer-

tet werden müssen. Mit der Modellierung der komplexen physiologischen Vorgänge wird die medizinische Pflegekraft daher schnell vor noch größere Probleme bei der Erfassung und Beurteilung des Gesundheitszustands gestellt. Dies kann in der Online-Praxis nicht gewollt sein. Benötigt wird indessen eine Extraktion der wesentlichen Information mit den medizinisch relevanten Strukturen.

Letztendlich wird angestrebt, die resultierenden Komponenten und die geschätzten Parameter zur Alarmgebung am Patientenbett zu nutzen. Ein Ausweg aus der oben genannten Problematik könnte darin bestehen, den Pflegekräften die gegebenenfalls komplexe Modellierung der Zeitreihen vorzuenthalten und den Gesundheitszustand intern auf Basis des angepassten Modells einzuschätzen. Die Pflegekraft würde anschließend nur noch eine einfache Bewertung des Zustands des Patienten verbunden mit Anweisungen für benötigte Interventionen erhalten. Für eine Realisierung eines solchen Ansatzes müssen jedoch zunächst Regeln festgelegt werden, die angeben, welche Modelle mit welchen Parameterschätzungen stabile bzw. alarmrelevante Zustände anzeigen. Allerdings ist sogar schon die Aufstellung einfacher Regeln für die Überwachung einer einzelnen Variablen schwierig. Ein Mediziner wird diese Entscheidung nicht allgemeingültig für alle Patienten oder für einen Patienten für die gesamte Liegedauer treffen können und wollen. Ohne Einbeziehung des medizinischen Wissens wird eine interne Auswertung der lokal angepassten Modelle aber nicht zu realisieren sein. Daher wird dieser Weg in der vorliegenden Arbeit nicht weiterverfolgt.

Eine andere Alternative wurde zum Ende des Abschnitts [4.3.1](#) angedeutet. Die Zeitreihen werden lokal zunächst durch eine deterministische Funktion approximiert. Dabei wird angenommen, dass die medizinisch relevante strukturelle Information in den extrahierten Signalen enthalten ist und die Beobachtungen somit von unbrauchbarem Rauschen und Artefakten befreit werden. Damit wird die Anzahl der überwachten Variablen nicht reduziert, aber wesentliche und überflüssige Informationen werden in diesem Schritt voneinander getrennt. Die resultierenden Signale können nun hinsichtlich ähnlicher Strukturen untersucht werden. Dieser Ansatz wird in Kapitel [5](#) weiterverfolgt.

5 PROZEDUR ZUR ONLINE-EXTRAKTION RELEVANTER SIGNALE

Die Online-Monitoring Daten der hämodynamischen Variablen aus der Intensivmedizin geben Aufschluss über den Zustand des überwachten Patienten. Phasen, in denen der Patient relativ stabil ist und sämtliche Variablen nahezu konstant verlaufen, wechseln sich ab mit Perioden, in denen einige Variablen langsame monotone Trends oder abrupte Niveauänderungen aufweisen. Diese Signale werden überlagert von starkem Rauschen sowie Ausreißern und Artefakten. Von Interesse ist die Extraktion derjenigen klinisch relevanten Änderungen in der Struktur, die dem Pflegepersonal eine verlässliche Beurteilung des Gesundheitszustands des Patienten ermöglichen. Damit verbunden ist die Beseitigung des Rauschens und klinischer Artefakte. In einem ersten Schritt findet somit zwar keine Dimensionsreduktion statt, jedoch werden die Onlineaufzeichnungen durch eine multivariate Signalextraktion auf die wesentlichen Informationen reduziert.

Ein weiteres Ziel im Intensivmonitoring besteht in einer darüber hinausgehenden Komprimierung der extrahierten Signale auf wenige medizinisch relevante Komponenten. Sofern die Datenmatrix vollen Spaltenrang besitzt, geht bei der Reduktion vieler Variablen auf wenige Signale jeweils ein Teil der in den Daten vorhandenen Information verloren. Abhängig vom betrachteten statistischen Verfahren existieren verschiedene Möglichkeiten, einen solchen Informationsverlust zu beschreiben. Bei der Hauptkomponentenanalyse wird dieser üblicherweise über den Anteil nicht erfasster Varianz der Daten ausgedrückt. Im Prinzip muss ein Mediziner angeben, welchen Informationsverlust er zu akzeptieren bereit ist. Viel häufiger werden dazu automatische ad-hoc Kriterien eingesetzt, die einen guten Kompromiss zwischen möglichst großer Dimensionsreduktion und geringem Informationsverlust finden sollen. Im Online-Monitoring in der Intensivmedizin ist das Ziel, für alle Patienten allgemeingültige Aussagen über einen akzeptablen Anteil nicht erfasster Information in den Daten zu formulieren, kaum zu erreichen und möglicherweise auch nicht wirklich zweckmäßig. Leichter sind Forderungen zusammenzustellen, die angeben, welche Information aus den Daten erhalten bleiben sollte. Die vollständige Erfassung und Bewertung der hochdimensionalen intensivmedizinischen Zeitreihen direkt am Patientenbett überfordert einen Menschen – auch einen erfahrenen Mediziner (Miller, 1956). Die aufgezeichneten Vitalparameter enthalten

- essentielle Informationen, auf die die medizinische Pflegekraft nicht verzichten kann,

- von der Situation bzw. dem einzelnen Patienten abhängige wünschenswerte zusätzliche Informationen, aber
- auch überflüssige und unter Umständen irreführende Informationen.

Während jener Phasen, in denen der Zustand eines Patienten relativ stabil ist, könnte das Monitoring-System beispielsweise nur die essentiellen Informationen anzeigen. Zusätzlich sollten strukturelle Änderungen in den aufgezeichneten Variablen zeitnah festgestellt werden. Das Monitoring-System sollte solche Änderungen – auch wenn es sich dabei nicht direkt um alarmrelevante Änderungen handelt – erkennen und die erforderlichen Zusatzinformationen anzeigen. Klinisch irrelevante Artefakte und Ausreißer sind zur Beurteilung des Patienten-zustands unnötig. Ein ideales System liefert nur diejenigen Informationen, die wirklich zur Entscheidungsfindung notwendig sind.

Zusammen mit einem erfahrenen Intensivmediziner wurde ein Forderungskatalog aufgestellt, der eine Aufzählung notwendiger und zusätzlich wünschenswerter Information enthält. Ein Monitoring-System zur Online-Überwachung des hämodynamischen Systems eines Intensivpatienten sollte die folgenden Informationen zur Verfügung stellen:

- (F.1)** Für jeden Vitalparameter muss stets das lokale Niveau abgerufen werden können.
- (F.2)** Für jeden Vitalparameter muss stets die Größe des lokalen Rauschens verfügbar sein.
- (F.3)** Es sollten jederzeit Informationen über den strukturellen Verlauf der lokal extrahierten Signale vorliegen.
- (F.4)** Zusätzlich ist eine angemessene Abstraktion des klinischen Zustandes, wie die Erkennung und Benennung relevanter Muster, wünschenswert.

Die folgenden Abschnitte beschäftigen sich mit einer Online-Extraktion dieser klinisch relevanten Informationen aus hämodynamischen Zeitreihen.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird kurz die Methodik von Davies, Fried und Gather (2004), Fried (2004a,b) und Gather und Fried (2004) zur robusten lokal-linearen Extraktion univariater Signale in verrauschten Zeitreihen vorgestellt.

Im zweiten Abschnitt werden die Erkenntnisse aus der univariaten Signalextraktion für die Online-Gewinnung von Signalen aus multivariaten Zeitreihen ausgenutzt. Dazu werden verschiedene Schätzverfahren im multivariaten Regressionsproblem vorgestellt und im Hinblick auf die Anwendung im Online-Monitoring untersucht. Schließlich wird eine robuste multivariate Regressionsprozedur vorgeschlagen, die für die vorliegenden hämodynamischen Zeitreihen eine Extraktion glatter Signalkomponenten in Echtzeit ermöglicht. Damit können die Informationen gemäß Forderungen **(F.1)** und **(F.2)** gewonnen werden.

Mit der Extraktion von Informationen zur Struktur der Signale gemäß Forderung **(F.3)** beschäftigt sich der dritte Abschnitt dieses Kapitels. Hier werden Lösungsansätze zur Gruppierung von Vitalparametern mit ähnlichem Steigungsverhalten diskutiert.

5.1 ROBUSTE EXTRAKTION UNIVARIATER SIGNALE IN ECHTZEIT

Im folgenden wird zunächst die einfachere Situation betrachtet, dass eine einzelne univariate physiologische Zeitreihe online aufgezeichnet wird. Von Interesse ist hierbei die Echtzeit-Extraktion eines Signals, das die klinisch relevanten Strukturänderungen der intensivmedizinischen Variablen enthält.

Klassische Glättungsverfahren, die eine Zeitreihe in ein glattes Signal sowie in Rauschen und Artefakte aufspalten, sind beispielsweise gleitende Mittelwerte oder gleitende Mediane (Tukey, 1977). Während das gleitende Mittel jedoch extrem anfällig gegenüber Ausreißern ist, approximiert der gleitende Median das Signal oft durch eine Treppenfunktion. Erschwerend kommt hinzu, dass die intensivmedizinischen Zeitreihen häufig Phasen mit anhaltenden langsamen Trends aufweisen. In solchen Trendperioden verliert der gleitende Median an Robustheit (Fried und Gather, 2002).

Daher approximieren Davies, Fried und Gather (2004) das Signal mittels robuster Regressionsverfahren. Den Daten wird dabei lokal in einem gleitenden Fenster jeweils ein linearer Trend angepasst.

Seien dazu mit $x(t)$, $t = 1, \dots, T$, Beobachtungen einer univariaten Zeitreihe der Länge T bezeichnet. Es wird angenommen, dass sich die Beobachtungen durch ein glattes Signal $\mu(t)$ überlagert von einer Mischung aus additivem Rauschen und einem ausreißerzeugendem Prozess zusammensetzen. Für zugehörige Zufallsvariablen $X(t)$, $t = 1, \dots, T$, gelte also

$$X(t) = \mu(t) + \varepsilon(t) + \eta(t), \quad t = 1, \dots, T, \quad (5.1)$$

wobei $\varepsilon(t)$, $t = 1, \dots, T$, unabhängig verteilte Zufallsvariablen mit Erwartungswert $E[\varepsilon(t)] = 0$ und zeitabhängiger Varianz $\text{Var}[\varepsilon(t)] = \sigma^2(t)$ und $\eta(t)$ einen ausreißerzeugenden Prozess darstellen.

Das Ziel ist die Extraktion des Signals $\mu(t)$, welches lokal als linear angenommen wird. Diese Annahme impliziert, dass das Signal $\mu(t + s)$, $s = -w, \dots, w$, in jedem Zeitfenster $\{t - w, \dots, t, \dots, t + w\}$ mit $w + 1 \leq t \leq T - w$ durch eine Gerade approximiert werden kann, d. h.

$$X(t + s) = \mu(t) + \beta(t)s + \varepsilon(s; t) + \eta(s; t), \quad s = -w, \dots, w.$$

In diesem Zeitfenster steht $\mu(t)$ für das Niveau, $\beta(t)$ für die (in jedem Fenster konstante) Steigung und $\varepsilon(s; t)$ für das Rauschen.

In einer Vergleichsstudie arbeiten Davies, Fried und Gather (2004) die Vor- und Nachteile einiger Regressionsfunktionale $T_{reg} = (\tilde{\mu}(t), \tilde{\beta}(t))$ zur Approximation von $\mu(t)$ und $\beta(t)$ bei endlichen Stichprobenumfängen heraus. Wegen der Möglichkeit einer großen Anzahl von Ausreißern und Artefakten in den intensivmedizinischen Daten beschränkt sich der Vergleich auf die hoch-robusten Funktionale der L_1 -Regression T_{L_1} , des *Least Median of Squares* (LMS;

Hampel, 1975; Rousseeuw, 1984) T_{LMS} und des Repeated Medians (RM; Siegel, 1982) T_{RM} . Da die Einflussvariable im Modell (5.1) gleichabständige Zeitpunkte darstellt, sind die Beobachtungen in allgemeiner Lage. In diesem Fall besitzen das LMS- und das RM-Funktional bei einer Stichprobe vom Umfang N jeweils den für Regressions-äquivalente Geradenschätzer optimalen Bruchpunkt von $\lfloor N/2 \rfloor / N$. Hingegen hat das L_1 -Regressionsfunktional nur einen Bruchpunkt von ca. 0.3. Neben der hohen Robustheit sind bei der Online-Signalextraktion kurze Rechenzeiten von großer Wichtigkeit. In dieser Hinsicht ist die L_1 -Regression gegenüber den anderen Verfahren im Vorteil und deshalb interessant. Allerdings entwickeln Bernholt und Fried (2003) einen Algorithmus, mit dessen Hilfe sich der Update des RM in linearer Zeit $O(n)$ bestimmen lässt.

Eine Simulationsstudie zeigt weiter, dass der L_1 -Schätzer bezüglich Bias und MSE bei Vorliegen von Ausreißern gegenüber den anderen beiden Verfahren deutlich im Nachteil ist. Vorteile des LMS gegenüber dem RM bestehen in geringeren Werten für Bias und MSE bei einem Prozentsatz von mehr als 30% Ausreißern in einem Zeitfenster. Insbesondere üben große Ausreißer auf den LMS weniger Einfluss aus, da sie fast vollständig ignoriert werden. Der RM besitzt hingegen neben den kürzeren Rechenzeiten geringere Werte für Varianz und MSE bei wenigen bis mäßig vielen Ausreißern. Wegen seiner Lipschitz-Stetigkeit ist er außerdem relativ unempfindlich gegenüber kleinen Änderungen in den Daten. Genau das ist ein großer Nachteil des LMS, der bei kleinen Änderungen in den Daten zu Instabilitäten neigt (Hettmansperger und Sheather, 1992).

Aufgrund dieser Eigenschaften empfehlen Davies, Gather und Fried (2004) für die intensivmedizinischen Daten den RM zur Signalapproximation. Bei einer Regression gegen die Zeit mit gleichabständigen Zeitpunkten $t + s$, $s = -w, \dots, w$, in einem Zeitfenster lautet das Funktional $T_{RM} = (\tilde{\mu}(t), \tilde{\beta}(t))$ des Repeated Medians

$$\tilde{\beta}(t) = \text{med}_{s \in \{-w, \dots, w\}} \left(\text{med}_{v \neq s, v \in \{-w, \dots, w\}} \frac{x(t+s) - x(t+v)}{s-v} \right), \quad (5.2)$$

$$\tilde{\mu}(t) = \text{med}_{s \in \{-w, \dots, w\}} \left(x(t+s) - \tilde{\beta}(t)s \right). \quad (5.3)$$

Durch die Anwendung des Funktional T_{RM} auf die Beobachtungen eines Zeitfensters mit zentralem Zeitpunkt t werden Niveau und Steigung für diesen Zeitpunkt t approximiert. Die Steigung der Geraden ist dabei der Median von $2w + 1$ lokalen Steigungen. Diese lokalen Steigungen wiederum werden für jeden einzelnen Zeitpunkt über den Median aller paarweisen Steigungen, d. h. der Steigungen der $2w$ Geraden, die durch diesen Punkt und jeden einzelnen weiteren Punkt des Zeitfensters gegeben sind, bestimmt.

Fried (2004a) verbessert den RM zusätzlich durch eine robuste Skalenschätzung in Echtzeit (Gather und Fried, 2003) und die Online-Ersetzung erkannter Ausreißer. Damit erzielt der RM in extremen Ausreißersituationen eine ähnlich hohe Robustheit wie der LMS. Bernholt, Fried, Gather und Wegener (2004), Fried (2004b), Fried, Bernholt und Gather (2004) und Gather und Fried (2004) betrachten zudem Erweiterungen und Modifikationen des RM-

Filters, beispielsweise zur besseren Erkennung des Signals bei spontanen Niveauänderungen. Gather, Schettlinger und Fried (2004) bestätigen die Vor- und Nachteile des RM bei der echten Online-Anwendung ohne Zeitverzögerung auch im Vergleich zur LTS-Regression (Rousseeuw, 1984) und der *Deepest Regression*-Methode (Rousseeuw und Hubert, 1999).

5.2 ROBUSTE EXTRAKTION MULTIVARIATER SIGNALE IN ECHTZEIT

Analog zur Extraktion des klinisch relevanten Signals aus einer univariaten verrauschten Zeitreihe ist bei der Online-Überwachung eines multivariaten Prozesses in der Intensivmedizin die Gewinnung glatter Signale von Interesse.

Da die Variablen zum Teil über die gleiche Messapparatur gemessen werden und somit hoch korreliert sind, wird für die multivariaten Daten zunächst ein geeignetes Modell formuliert. Im zweiten Abschnitt werden verschiedene Möglichkeiten zur Approximation der Signale vorgestellt. Diese werden im dritten Abschnitt im Hinblick auf die Anwendung im Online-Monitoring diskutiert und in Abschnitt 5.2.4 geeignet modifiziert.

5.2.1 MULTIVARIATES MODELL

Das Modell aus (5.1) für univariate Zeitreihen wird in diesem Abschnitt auf multivariate Prozesse übertragen. Dabei wird für Zufallsvariablen $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^k$, $t = 1, \dots, T$, angenommen, dass sich jede der k Komponenten in ein glattes Signal und in Rauschen und Artefakte aufspalten lässt, d. h.

$$\mathbf{X}(t) = \boldsymbol{\mu}(t) + \boldsymbol{\varepsilon}(t) + \boldsymbol{\eta}(t), \quad t = 1, \dots, T. \quad (5.4)$$

Hier enthält $\boldsymbol{\mu}(t) = (\mu_1(t), \dots, \mu_k(t))^\top$, $t = 1, \dots, T$, die k „variablenspezifischen“ Signale und $\boldsymbol{\eta}(t)$ steht wieder für einen ausreißerzeugenden Prozess. Die Fehler $\boldsymbol{\varepsilon}(t) \in \mathbb{R}^k$, $t = 1, \dots, T$, werden als Prozess unabhängig verteilter Zufallsvariablen mit $E[\boldsymbol{\varepsilon}(t)] = 0$ und $\text{Var}[\boldsymbol{\varepsilon}(t)] = \boldsymbol{\Sigma}(t)$ angenommen, wobei $\boldsymbol{\Sigma}(t)$, $t = 1, \dots, T$, nicht notwendigerweise diagonal ist. Dies ist eine realistische Annahme, die zulässt, dass die Fehler $\varepsilon_i(t)$ und $\varepsilon_j(t)$, $i \neq j$, verschiedener Komponenten korreliert sind. In der Praxis ist die Annahme von Korrelationen zwischen den Zielgrößen sinnvoll, da sich Messfehler auf gemeinsam gemessene Vitalparameter oft gleichermaßen auswirken. Klinisch relevante Information ist in diesem Rauschen jedoch in der Regel nicht enthalten.

Wie im univariaten Fall ist das Ziel vorerst die Extraktion des hier k -dimensionalen Signalvektors $\boldsymbol{\mu}(t)$, $t = 1, \dots, T$. Dabei ist es vorteilhaft, die k Zeitreihen nicht komponentenweise zu betrachten, sondern Abhängigkeiten unter den Komponenten zu berücksichtigen. Zur Glättung multivariater Zeitreihen können Erweiterungen der univariaten Verfahren, wie multivariate gleitende Mittelwerte oder Mediane, genutzt werden. Ein hoch robustes Verfahren wird von Koivunen (1996) vorgeschlagen und beruht auf einem gleitenden Lokationsschätzer

des MCD-Funktional. Für Perioden mit ausgeprägten Trends sind diesen Lokationsfiltern jedoch regressionsbasierte Filter vorzuziehen. Daher wird hier, wie im univariaten, jede einzelne Komponente $\mu_j(t)$, $j = 1, \dots, k$, lokal als linear angenommen. Somit kann das Signal $\boldsymbol{\mu}(t+s)$, $s = -w, \dots, w$, in dem Zeitfenster $\{t-w, \dots, t, \dots, t+w\}$ mit $w+1 \leq t \leq T-w$ durch k Geraden approximiert werden. In dem Zeitfenster mit Zentrum t bezeichne $\boldsymbol{\mu}(t) \in \mathbb{R}^k$ den Vektor, dessen Komponenten die k Niveaus und $\boldsymbol{\beta}(t) \in \mathbb{R}^k$ den Vektor, dessen Komponenten die zugehörigen k Steigungen angeben. Dann gilt

$$\mathbf{X}(t+s) = \boldsymbol{\mu}(t) + \boldsymbol{\beta}(t)s + \boldsymbol{\varepsilon}(s;t) + \boldsymbol{\eta}(s;t), \quad s = -w, \dots, w. \quad (5.5)$$

Modell (5.5) entspricht also einem multivariaten Regressionsmodell mit einer univariaten Regressorvariablen, der Zeit, und einer multivariaten k -dimensionalen Zielvariablen. Hierbei folgt zunächst jede Komponente $X_j(t+s)$, $j = 1, \dots, k$, des Zielvektors einem eigenen univariaten Regressionsmodell, wobei der Regressor in allen Modellen identisch ist. Zusätzlich ist es in dem multivariaten Regressionsmodell jedoch möglich, dass die komponentenspezifischen Fehler $\varepsilon_j(s;t)$, $j = 1, \dots, k$, korreliert sind.

Im nächsten Abschnitt werden Verfahren behandelt, mit denen $\boldsymbol{\mu}(t)$ und $\boldsymbol{\beta}(t)$ approximiert werden können.

5.2.2 METHODEN DER MULTIVARIATEN REGRESSION

In diesem Abschnitt werden allgemein verschiedene Verfahren zur Schätzung der unbekannten Parameter in einem multivariaten Regressionsmodell vorgestellt.

Sei ein einem multiplen multivariaten Regressionsmodell

$$\mathbf{y} = \boldsymbol{\alpha} + \mathbf{B}^T \mathbf{x} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

mit Zielvektor $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_k)^T \in \mathbb{R}^k$, Regressoren $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m)^T \in \mathbb{R}^m$, Fehlern $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)^T \in \mathbb{R}^k$ und Regressionskoeffizienten $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^k$ und $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times k}$ die gemeinsame Lage des Vektors $\mathbf{z} = (\mathbf{x}^T, \mathbf{y}^T)^T$ bezeichnet durch $\boldsymbol{\mu}$ und die gemeinsame Kovarianz durch $\boldsymbol{\Sigma}$ mit

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_x \\ \boldsymbol{\mu}_y \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{xx} & \boldsymbol{\Sigma}_{xy} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{yx} & \boldsymbol{\Sigma}_{yy} \end{pmatrix}.$$

Zur Schätzung der unbekannten Regressionsparameter $\boldsymbol{\alpha}$ und \mathbf{B} wird üblicherweise der Kleinste-Quadrate-Ansatz verwendet.

Das Kleinste-Quadrate(KQ)-Funktional $T_{KQ} = (\tilde{\boldsymbol{\alpha}}, \tilde{\mathbf{B}}^T)^T$ ist gegeben durch

$$\tilde{\mathbf{B}} = \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{xx}^{-1} \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{xy} \quad (5.6)$$

$$\tilde{\boldsymbol{\alpha}} = \tilde{\boldsymbol{\mu}}_y - \tilde{\mathbf{B}}^T \tilde{\boldsymbol{\mu}}_x. \quad (5.7)$$

Dabei werden als Schätzer für die Teilvektoren und -matrizen von $\boldsymbol{\mu}$ und $\boldsymbol{\Sigma}$ die entsprechenden Komponenten des arithmetischen Mittels $\tilde{\boldsymbol{\mu}} = \bar{\mathbf{z}}$ und der empirischen Kovarianzmatrix

$\tilde{\Sigma} = \mathbf{S}_z$ genutzt. Das KQ-Funktional liefert im multivariaten Regressionsmodell genau die Regressionskoeffizienten, die sich auch durch k univariate Kleinst-Quadrate-Anpassungen ergeben. Zur Bestimmung der unbekannten Parameter im multivariaten Regressionsmodell ist damit die gesonderte Anpassung eines einfachen univariaten linearen Modells an jede der k Zielvariablen eine naheliegende Möglichkeit. Dies erlaubt für jede Variable eine unmittelbare Interpretation des Einflusses der Regressoren. Jedoch bleiben die Äquivarianzeigenschaften univariater Regressionsverfahren bei der Erweiterung auf das multivariate Regressionsproblem in der Regel nicht erhalten (Ollila, Oja und Koivunen, 2003). In dieser Hinsicht stellt das Kleinst-Quadrate-Funktional T_{KQ} eine Ausnahme dar.

Da physiologische Variablen im Online-Monitoring oft stark fehlerbehaftet sind, ist der ausreißeranfällige KQ-Schätzer nicht zu empfehlen. Im folgenden sind somit vor allem Strategien zur Robustifizierung multivariater Regressionsmethoden von Interesse.

In der Literatur werden zunächst Verallgemeinerungen robuster univariater Regressionsmethoden auf den multivariaten Fall diskutiert. Zu diesen Ansätzen gehören Erweiterungen der L_1 -Regression (Rao, 1988; Bai, Chen, Miao und Rao, 1990), oder der M -Schätzung (Koenker und Portnoy, 1990). Ebenso wie multivariate Lage- und Skalenschätzer häufig nicht äquivariant bezüglich der Gruppe affiner Transformationen im \mathbb{R}^k sind, gilt dies auch für die resultierenden Regressionsprozeduren. Beispielsweise existiert in der Literatur trotz zahlreicher Vorschläge keine kanonische Verallgemeinerung des Medians im \mathbb{R}^k , $k > 1$. Eine naheliegende Definition des Medians einer k -dimensionalen Zufallsstichprobe ist der Vektor der k univariaten Mediane. Dieser Lageschätzer ist zwar äquivariant gegenüber Transformationen der Art $\mathbf{D}\mathbf{y} + \mathbf{a}$, wobei $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ eine Diagonalmatrix und $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^k$ ist, nicht aber gegenüber allgemeinen affinen Transformationen. Aus diesem Grund sind auch die direkten Übertragungen der robusten univariaten Regressionsfunktionale aus Abschnitt 5.1, des *Least Median of Squares* T_{LMS} und des *Repeated Median* T_{RM} , auf das multivariate Regressionsproblem nicht affin äquivariant, wohl aber äquivariant gegenüber Transformationen der Art $\mathbf{D}\mathbf{y} + \mathbf{a}$. Da für die Analyse oft eine Zentrierung oder eine geeignete Skalierung der Daten genügt, scheint es, dass die Äquivarianz gegenüber solchen Transformationen ausreicht und die affine Äquivarianz zur Bestimmung sinnvoller Schätzer nicht benötigt wird. Jedoch zeigt Chakraborty (1999) für das multivariate Regressionsmodell, dass der Verlust affiner Äquivarianz insbesondere bei hohen Korrelationen zwischen den Komponenten des Zielvektors eine verminderte Effizienz der Schätzer bedeutet (vgl. auch Bickel, 1964). Im folgenden werden daher multivariate Schätzfunktionale vorgestellt, die gegenüber der Gruppe affiner Transformationen äquivariant und gleichzeitig robust sind.

Die Robustheit eines Regressionsfunktionals wird hier global anhand des *finite-sample Ersetzungs-Bruchpunkts* (Donoho und Huber, 1983) gemessen. Der finite-sample Bruchpunkt ε_N^* eines Schätzfunktionals T gibt den kleinsten Anteil von Beobachtungen einer Stichprobe $\underline{\mathbf{Z}}_N = \{(\mathbf{x}_i^\top, \mathbf{y}_i^\top)^\top; i = 1, \dots, N\}$ an, der ersetzt werden muss, so dass der Schätzer an

den Rand des zugehörigen Parameterraums geschoben wird. Der finite-sample Ersetzungs-Bruchpunkt eines Schätzers für die Regressionsparameter $T_{reg,N} = (\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}^\top)^\top$ für \underline{Z}_N kann im multiplen multivariaten Regressionsmodell als

$$\varepsilon_N^*(T_{reg,N}, \underline{Z}_N) = \min\{q/N : \sup_{\underline{Z}_{N,q}} \|T_{reg,N}(\underline{Z}_N) - T_{reg,N}(\underline{Z}_{N,q})\| = \infty\} \quad (5.8)$$

definiert werden, wobei das Supremum über alle möglichen Stichproben $\underline{Z}_{N,q}$ gebildet wird, die sich aus \underline{Z}_N durch Ersetzen von genau q Beobachtungen durch beliebige Werte ergeben. Da die Daten in einem Regressionsmodell auf eine bestimmte Weise strukturiert sind, ist es sinnvoll, diese zusätzliche Information mit in die Robustheitsbetrachtungen einzubeziehen (Becker, 2001). So können in Regressionsmodellen mit festem Regressor, wie beispielsweise gleichabständigen Zeitpunkten, Modellabweichungen nur bezüglich der beobachteten Zielgröße auftreten. In diesem Fall bietet es sich an, einen Bruchpunkt des Schätzers für die Regressionsparameter auch nur in Abhängigkeit der Zielgröße zu definieren (Ellis und Morgenthau, 1992; He, Jurečková, Koenker und Portnoy, 1990; Mizera und Müller, 1999; Müller, 1995). Hierbei zeigt Müller (1995), dass der Bruchpunkt regressionsäquivarianter Schätzer der Modellparameter bei festen Designpunkten die gleiche obere Schranke besitzt wie in Modellen mit zufälligem Regressor.

Basierend auf einer Transformations-Retransformations-Technik entwickeln Chakraborty und Chaudhuri (1997), Chakraborty (1999) sowie Chakraborty (2003) multivariate Rang- bzw. Quantilsregressionsverfahren. Die Transformations-Retransformations-Technik stellt dabei sicher, dass die resultierenden Schätzfunktionale affin äquivariant sind. Die Verfahren umfassen auch eine affin äquivalente Version der multivariaten L_1 -Regression. Chakraborty (2003) zeigt, dass diese Schätzer bei Korrelationen zwischen den Komponenten des Zielvektors eine höhere Effizienz besitzen als univariate Regressionsschätzer, wenn sie im multivariaten Regressionsproblem angewendet werden. Bei dem Verfahren gehen zur Konstruktion einer geeigneten Transformationsmatrix $k+m$ Datenpunkte verloren. Dies bedeutet für kleine Stichproben einen Effizienzverlust. Ferner erfordert der Schätzalgorithmus im ersten Schritt eine affin äquivalente Schätzung der unbekannten Kovarianzmatrix der Fehler, wobei die Residuen aus der Modellanpassung jedoch unbekannt sind. Um Maskingeffekte zu vermeiden, sollte die Kovarianzmatrix zusätzlich robust geschätzt werden. Bisher wurde diese Problematik noch nicht weiter untersucht. Auch existieren keine Gesamtaussagen oder Untersuchungen über die Robustheit der vorgeschlagenen Prozedur.

Ein alternativer Ansatz zur Entwicklung robuster multivariater Regressionsverfahren besteht in der Ersetzung der Lage- und Kovarianzfunktionale in (5.6) und (5.7) durch robuste Varianten. Rousseeuw, Van Aelst, Van Driessen und Agulló (2004) zeigen, dass ein Regressionsfunktional $T_{reg} = (\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}^\top)^\top$ gegeben durch (5.6) und (5.7) sowohl regressions- als auch y -affin und x -affin äquivariant ist, wenn zur Schätzung von Lage μ und Kovarianz Σ affin äquivalente Schätzfunktionale verwendet werden.

Dieses Resultat nutzen Ollila, Oja und Koivunen (2003) zur Entwicklung einer effizienten multivariaten Regressionstechnik, bei der die Schätzung der Kovarianzmatrix auf multivariaten Rängen basiert. Die Influenzfunktion dieser Prozedur ist jedoch unbeschränkt, und der Bruchpunkt ε_N^* beträgt Null.

Maronna und Morgenthaler (1986) ersetzen im univariaten multiplen Regressionsmodell die Funktionale in (5.6) und (5.7) durch multivariate M-Schätzer. Das resultierende Regressionsverfahren erbt allerdings den nur geringen Bruchpunkt von $1/(m+1)$ multivariater M-Schätzer, wobei m die Anzahl der Regressoren bezeichnet.

Eine affin äquivalente und robuste Prozedur mit beschränkter Influenzfunktion schlagen Rousseeuw, Van Aelst, Van Driessen und Agulló (2004) vor. Dazu wird gezeigt, dass der finite-sample Ersetzungs-Bruchpunkt ε_N^* des Regressionsfunktional $T_{reg} = (\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}^T)^T$ gegeben durch (5.6) und (5.7) das Minimum der Bruchpunkte bei Verwenden beliebiger Lage- und Kovarianzfunktionale annimmt. Indem μ und Σ basierend auf dem MCD-Funktional $T_{MCD} = (\tilde{\mu}, \tilde{\Sigma})$ robust geschätzt werden, ergibt sich ein multivariates Regressionsverfahren mit einem höchstmöglichen finite-sample Ersetzungs-Bruchpunkt von $\varepsilon_N^*(T_{MCDreg,N}, \underline{Z}_N) = \lfloor (N - (k+m) + 1)/2 \rfloor / N$, wobei N für den Stichprobenumfang steht. Die Effizienz des MCD-Regressionsfunktional T_{MCDreg} ist relativ gering, lässt sich aber durch zusätzliche Gewichtungsschritte verbessern. Zum einen kann anstelle des MCD-Schätzers der sogenannte Reweighted MCD-Schätzer (R-MCD-Schätzer) verwendet werden. Dabei erhalten diejenigen Beobachtungen das Gewicht Null, deren Mahalanobisdistanz bezüglich der anfänglich durch das MCD-Funktional T_{MCD} robust geschätzten Lage und Kovarianz größer ist als das $\chi^2_{(k+m),\delta}$ -Quantil, wobei für den Trimm-Anteil δ z. B. $\delta = 0.975$ gewählt wird. Dann ist der Reweighted MCD-Schätzer als das arithmetische Mittel und die empirische Kovarianzmatrix der Beobachtungen mit Gewicht Eins definiert. Zum anderen können die Beobachtungen basierend auf den Mahalanobisdistanzen der Residuen aus der MCD-Regression im Regressions-schritt neu gewichtet werden, (vgl. auch Rousseeuw, Van Aelst, Van Driessen und Agulló, 2004).

Einen anderen robusten und affin äquivalenten Ansatz, basierend auf der Kovarianzmatrix der Residuen, betrachten Agulló, Croux und Van Aelst (2001). Gesucht wird die Teilstichprobe mit denjenigen h Beobachtungen, $h = \gamma N$, $0 < \gamma \leq 1$, deren Residuen-Kovarianzmatrix bei einer Kleinste-Quadrate-Anpassung die kleinste Determinante besitzt. Der sogenannte *Multivariate Least Trimmed Squares (MLTS)*-Schätzer ist dann der KQ-Schätzer basierend auf dieser optimalen Teilstichprobe. Die Bezeichnung rührt daher, dass der MLTS-Schätzer im univariaten Regressionsproblem mit dem *Least Trimmed Squares (LTS)*-Schätzer (Rousseeuw, 1984) zusammenfällt. Alternativ lässt sich der vorgeschlagene Schätzer auch als das Tupel $(\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}^T)^T$ charakterisieren, das die Determinante der MCD-Kovarianzmatrix der Residuen minimiert.

Sei nun für jede Stichprobe $\underline{Z}_N \subset \mathbb{R}^{k+m+1}$ durch $g(\underline{Z}_N)$ die maximale Anzahl von Beobachtungen in \underline{Z}_N bezeichnet, die in dem gleichen echten linearen Unterraum des \mathbb{R}^{k+m+1}

liegen. Agulló, Croux und Van Aelst (2001) zeigen, dass für $k > 1$ und $h > g(\underline{\mathbf{Z}}_N)$ der finite-sample Ersetzungs-Bruchpunkt des MLTS-Schätzers $\varepsilon_N^*(T_{MLTS,N}, \underline{\mathbf{Z}}_N) = \min(N - h + 1, h - g(\underline{\mathbf{Z}}_N))/N$ beträgt. Eine obere Schranke des Bruchpunkts des MLTS-Schätzers ist damit $\lfloor (N - (k + m) + 1)/2 \rfloor / N$. Ähnlich wie für das MCD-Regressionsfunktional ist die Effizienz des robusten und affin äquivarianten MLTS-Schätzers relativ gering. Daher wird auch für den MLTS-Schätzer ein zusätzlicher Gewichtungsschritt empfohlen.

Damit existieren für das multivariate Regressionsproblem nur wenige erst kürzlich vorgeschlagene Regressionsfunktionale, die gegenüber affinen Transformationen äquivariant sind und gleichzeitig einen hohen Bruchpunkt ε_N^* besitzen. Ein Nachteil der MCD-basierten Funktionale ist deren rechnerische Komplexität. Damit verbundene Probleme werden im folgenden Abschnitt angesprochen.

5.2.3 WAHL EINER REGRESSIONSMETHODE IM ONLINE-MONITORING

In diesem Abschnitt werden die Eigenschaften der multivariaten robusten Regressionsverfahren aus Abschnitt 5.2.2 im Hinblick auf die Anforderungen im Online-Monitoring diskutiert. Schließlich wird eine Prozedur ausgewählt, die zur robusten Online-Approximation der Parameter im Modell $\mathbf{X}(t + s) = \boldsymbol{\mu}(t) + \boldsymbol{\beta}(t)s + \boldsymbol{\varepsilon}(s; t)$, $s = -w, \dots, w$, geeignet ist.

Die Regressionskoeffizienten $(\boldsymbol{\mu}(t), \boldsymbol{\beta}(t))$ im Modell (5.5) sind jeweils in möglichst kurzen Zeitfenstern zu approximieren. Das bedeutet, dass in jedem Fenster der Stichprobenumfang $N = 2w + 1$ nicht viel größer als die Dimension des Zielvektors k ist.

Bei der Wahl eines für die Online-Monitoring-Situation geeigneten Verfahrens zur Approximation von $\boldsymbol{\mu}(t)$ und $\boldsymbol{\beta}(t)$ sind einige wichtige Aspekte zu beachten. Zu diesen Anforderungen gehören

- eine hohe Robustheit gegenüber Ausreißern und Gruppen von Ausreißern,
- die eindeutige Existenz des Schätzers in jeder Datensituation,
- kurze Rechenzeiten,
- die Möglichkeit, auch Trend- und Niveauänderungen schnell und zuverlässig zu erkennen und
- gegebenenfalls eine ausreichende Effizienz bei endlicher, kleiner Stichprobengröße.

Angesichts der Empfindlichkeit gegenüber Ausreißern ist das Kleinste-Quadrate-Funktional ebenso wie die Prozedur von Ollila, Oja und Koivunen (2003) im multivariaten Online-Monitoring nicht geeignet. Ferner ist die auf der Transformations-Retransformations-Technik basierende, affin äquivariante multivariate Erweiterung der L_1 -Regression wegen der erwähnten Probleme nicht zu empfehlen.

Dagegen scheinen sowohl der MLTS-Schätzer als auch der Ansatz, die Lokations- und Kovarianzfunktionale in (5.6) und (5.7) durch affin äquivalente Funktionale mit hohem Bruchpunkt zu ersetzen, vielversprechend. Diese Verfahren sind robust und berücksichtigen gleichzeitig Korrelationen zwischen den Zielvariablen. Wegen der geforderten kurzen Rechenzeiten werden dabei im Online-Monitoring Kovarianzfunktionale, die mehrere Iterationen benötigen, wie etwa die meisten M- und S-Schätzer, nicht mit in Betracht gezogen. Zu beachten ist, dass die gemeinsame Verteilung der Einfluss- und Zielvariablen bei der MCD-Regression implizit als elliptisch angenommen wird, so dass Fisher-konsistente Schätzer für $(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\beta})$ resultieren. Da es sich bei der einzigen Einflussvariablen in Modell (5.5), der Zeit, nicht um elliptisch verteilte Zufallsvariablen, sondern um Designpunkte handelt, sind die Annahmen für die MCD-Regression in Online-Monitoring verletzt. Der ebenfalls auf dem MCD-Funktional beruhende MLTS-Schätzer benötigt für die Fisher-Konsistenz dagegen eine elliptisch symmetrische Verteilung der Fehler.

Im folgenden werden von den multivariaten Regressionsverfahren nur noch die MCD-basierten robusten Verfahren weiterverfolgt, wobei hinsichtlich der Annahmen die MLTS-Regression im Modell (5.5) geeigneter scheint als die MCD-Regression.

Effizienzbetrachtungen für die Regressionsfunktionale sind im Online-Monitoring nicht von vorrangiger Bedeutung, werden hier der Vollständigkeit halber jedoch mit beleuchtet. Zur Beurteilung der Effizienz der multivariaten Regressionsschätzer im Modell (5.5) bei endlichen, kleinen Stichprobenumfängen wurde eine Simulationsstudie durchgeführt. Gleichzeitig wurde untersucht, wie sich im Modell (5.5) hohe Korrelationen zwischen den Komponenten des Zielvektors auf die Effizienz eines robusten univariaten Schätzers auswirken, wenn für jede der k Zielvariablen gesondert lineare Trends angepasst werden. Dazu wird der in Abschnitt 5.1 für das Online-Monitoring empfohlene Repeated Median T_{RM} betrachtet. Natürlich ist diese univariate Prozedur multivariat gesehen nicht affin äquivalent.

Für den MCD-Schätzer ist die Problematik, dass hohe Bruchpunkte eine geringere Effizienz nach sich ziehen, bekannt (Croux und Haesbroeck, 1999). Bei einem hohen finite-sample Bruchpunkt sind die Effizienzen des MCD- und des MLTS-Regressionsfunktionals sehr gering. In einer Simulationsstudie wurden das MCD-Regressionsfunktional $T_{R-MCDreg}$ basierend auf dem Reweighted MCD-Schätzer, der MLTS-Schätzer T_{MLTS} und die getrennte univariate Anwendung des RM-Funktional T_{RM} im multivariaten Regressionsmodell relativ zum KQ-Funktional T_{KQ} miteinander verglichen. Dabei wird für festen Stichprobenumfang N der MCD-Schätzer auf Basis der Teilstichprobe vom Umfang $h = [(N + k + 2)/2]$ bestimmt. Dies entspricht der Wahl mit dem höchstmöglichen Bruchpunkt. Der Trimm-Anteil δ im Gewichtungsschritt des R-MCD-Schätzers beträgt $\delta = 0.975$.

Die Beobachtungen werden aus dem Modell

$$\mathbf{X}(t) = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\beta}t + \boldsymbol{\varepsilon}(t), \quad t = -w, \dots, w, \quad (5.9)$$

generiert mit einem Zielvektor $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^9$, d. h. $k = 9$. Da die betrachteten Regressionsfunktionale regressions-äquivalent sind, werden die wahren Regressionskoeffizienten o. B. d. A.

als $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^9$ gewählt. Die Fehler $\boldsymbol{\varepsilon}(t) \in \mathbb{R}^9$ werden zum einen aus einer neundimensionalen Normalverteilung mit Erwartungswert $\mathbf{0}$ und zum anderen aus einer t -Verteilung mit drei Freiheitsgraden mit jeweils unterschiedlichen Kovarianzmatrizen erzeugt. Zur Beschreibung verschiedener Abhängigkeitsstrukturen werden zehn Fälle mit den folgenden Kovarianzmatrizen betrachtet:

$$\begin{aligned} \text{Fälle 1 – 6: } \boldsymbol{\Sigma}_j &= \begin{pmatrix} 1 & \rho_j & \cdots & \rho_j \\ \rho_j & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \rho_j \\ \rho_j & \cdots & \rho_j & 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} \rho_1 &= 0, & \rho_2 &= 0.2, \\ \rho_3 &= 0.4, & \rho_4 &= 0.6, \\ \rho_5 &= 0.8, & \rho_6 &= 0.9, \end{aligned} \\ \\ \text{Fall 7: } \boldsymbol{\Sigma}_7 &= \begin{pmatrix} 1.0 & 0.7 & 0.7 & 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.1 & 0.1 & 0.1 \\ 0.7 & 1.0 & 0.7 & 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.1 & 0.1 & 0.1 \\ 0.7 & 0.7 & 1.0 & 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.1 & 0.1 & 0.1 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 & 1.0 & 0.7 & 0.7 & 0.2 & 0.0 & 0.0 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.7 & 1.0 & 0.7 & 0.2 & 0.0 & 0.0 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.7 & 0.7 & 1.0 & 0.2 & 0.0 & 0.0 \\ 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.2 & 0.2 & 0.2 & 1.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 & 0.7 \\ 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.7 & 1.0 \end{pmatrix}, \\ \\ \text{Fälle 8 – 10: } \boldsymbol{\Sigma}_j &= \begin{pmatrix} 1.0 & \rho_a & \rho_a & 0.3 & 0.3 & 0.3 & 0.2 & 0.2 & 0.2 \\ \rho_a & 1.0 & \rho_a & 0.3 & 0.3 & 0.3 & 0.2 & 0.2 & 0.2 \\ \rho_a & \rho_a & 1.0 & 0.3 & 0.3 & 0.3 & 0.2 & 0.2 & 0.2 \\ 0.3 & 0.3 & 0.3 & 1.0 & \rho_b & \rho_b & 0.3 & 0.0 & 0.0 \\ 0.3 & 0.3 & 0.3 & \rho_b & 1.0 & \rho_b & 0.3 & 0.0 & 0.0 \\ 0.3 & 0.3 & 0.3 & \rho_b & \rho_b & 1.0 & 0.3 & 0.0 & 0.0 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.3 & 0.3 & 0.3 & 1.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 & \rho_a \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & \rho_a & 1.0 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} &\text{mit} \\ j = 8 : & \\ \rho_a = \rho_b = 0.8, & \\ j = 9 : & \\ \rho_a = 0.9, \rho_b = 0.8, & \\ j = 10 : & \\ \rho_a = \rho_b = 0.9. & \end{aligned} \end{aligned}$$

Der Fall 1 beschreibt unabhängige standardnormalverteilte bzw. t -verteilte Zufallsvektoren $\mathbf{X}(t) \in \mathbb{R}^9$, während in den Fällen 2 – 6 (*engl. uniform correlation model*) die Korrelation

zwischen den Zufallsvektoren schrittweise einheitlich erhöht wird. Die Fälle 8 – 10 zeigen Blockabhängigkeitsstrukturen, wie sie im Intensivmonitoring für die Variablen des hämodynamischen Systems typisch sind. Ein Vergleich der Regressionsfunktionale ist daher insbesondere für diese in der Praxis vorkommenden Kovarianzstrukturen interessant.

In der Simulationsstudie werden sehr kleine Stichprobenumfänge $N = 21$ ($w = 10$) und $N = 31$ ($w = 15$) betrachtet, so wie sie im Online-Monitoring benötigt werden. Für jedes Modell und beide Stichprobenumfänge werden jeweils 5000 Stichproben generiert. Als Vergleichskriterium wird die relative Effizienz der Schätzer verwendet. Diese ist hier als 18. Wurzel ($2 \times k = 18$) aus den geschätzten Quotienten von Wilks generalisierten Varianzen der zwei betrachteten Schätzer definiert (vgl. auch Chakraborty, 1999, 2003; Ollila, Oja, und Koivunen, 2003). Die Ergebnisse sind in den Tabellen 5.1 und 5.2 dargestellt.

Fall	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Reweighted-MCD-Regression relativ zu KQ-Regression										
$N = 21$	0.672	0.678	0.673	0.675	0.679	0.677	0.679	0.672	0.677	0.672
$N = 31$	0.581	0.581	0.581	0.573	0.581	0.583	0.582	0.578	0.584	0.579
MLTS-Regression relativ zu KQ-Regression										
$N = 21$	0.538	0.539	0.537	0.538	0.536	0.539	0.537	0.532	0.535	0.538
$N = 31$	0.496	0.497	0.491	0.494	0.497	0.498	0.498	0.492	0.494	0.492
RM-Regression relativ zu KQ-Regression										
$N = 21$	0.676	0.656	0.597	0.524	0.412	0.318	0.559	0.503	0.454	0.426
$N = 31$	0.681	0.654	0.602	0.529	0.418	0.323	0.559	0.506	0.459	0.427
RM-Regression relativ zu Reweighted-MCD-Regression										
$N = 21$	1.006	0.967	0.887	0.776	0.607	0.470	0.824	0.748	0.671	0.634
$N = 31$	1.172	1.126	1.035	0.924	0.718	0.555	0.960	0.876	0.786	0.738
RM-Regression relativ zu MLTS-Regression										
$N = 21$	1.256	1.216	1.112	0.973	0.768	0.590	1.040	0.945	0.849	0.792
$N = 31$	1.374	1.318	1.225	1.071	0.840	0.649	1.122	1.028	0.929	0.869

Tabelle 5.1: Relative Effizienzen der Regressionsfunktionale: Reweighted MCD-Regression $T_{R-MCDreg}$, MLTS-Regression T_{MLTS} , RM-Regression T_{RM} und KQ-Regression T_{KQ} für verschiedene Abhängigkeitsstrukturen und Stichprobenumfänge $N = 21$ und $N = 31$ bei Normalverteilung

Die Tabellen 5.1 und 5.2 zeigen, dass die relativen empirischen Effizienzen der MCD-basierten Regressionsfunktionale (Reweighted-MCD-Regression und MLTS-Regression) bei festem Stichprobenumfang N für die unterschiedlichen Abhängigkeitsstrukturen nahezu konstant

Fall	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Reweighted-MCD-Regression relativ zu KQ-Regression										
$N = 21$	1.491	1.532	1.539	1.517	1.507	1.514	1.477	1.505	1.491	1.579
$N = 31$	1.624	1.596	1.581	1.604	1.590	1.650	1.613	1.570	1.571	1.590
MLTS-Regression relativ zu KQ-Regression										
$N = 21$	0.844	0.847	0.874	0.867	0.853	0.868	0.824	0.852	0.842	0.915
$N = 31$	0.822	0.839	0.814	0.841	0.823	0.808	0.833	0.824	0.818	0.846
RM-Regression relativ zu KQ-Regression										
$N = 21$	1.449	1.415	1.303	1.126	0.858	0.666	1.166	1.066	0.950	0.946
$N = 31$	1.548	1.491	1.315	1.196	0.913	0.727	1.267	1.111	1.009	0.953
RM-Regression relativ zu Reweighted-MCD-Regression										
$N = 21$	0.972	0.924	0.847	0.742	0.569	0.440	0.789	0.708	0.638	0.599
$N = 31$	0.953	0.934	0.832	0.746	0.574	0.441	0.785	0.708	0.643	0.599
RM-Regression relativ zu MLTS-Regression										
$N = 21$	1.718	1.671	1.491	1.298	1.006	0.768	1.416	1.252	1.129	1.034
$N = 31$	1.883	1.776	1.616	1.423	1.108	0.900	1.520	1.349	1.234	1.127

Tabelle 5.2: *Relative Effizienzen der Regressionsfunktionale: Reweighted MCD-Regression $T_{R-MCDreg}$, MLTS-Regression T_{MLTS} , RM-Regression T_{RM} und KQ-Regression T_{KQ} für verschiedene Abhängigkeitsstrukturen und Stichprobenumfänge $N = 21$ und $N = 31$ bei t -Verteilung mit 3 Freiheitsgraden*

bleiben. Dieses Verhalten ist für die wahren Effizienzen wegen der affinen Äquivarianz dieser multivariaten Regressionsverfahren zu erwarten. Die Annahmen für die Anwendung der MCD-Regression sind zwar nur bedingt erfüllt, jedoch ist die R-MCD-Regression im Vergleich zum MLTS-Schätzer bei den kleinen Stichprobenumfängen offensichtlich effizienter. Diese Aussage bleibt erhalten, wenn bei der MLTS-Schätzung zusätzlich ein Reweighting-Schritt erfolgen würde.

Bei einer t -Verteilung mit schweren Rändern schneidet die R-MCD-Regression besser ab als der empfindliche KQ-Schätzer. Dagegen ist die MLTS-Regression überraschenderweise sogar bei einer t -Verteilung mit 3 Freiheitsgraden noch weniger effizient als der KQ-Schätzer.

Die Größenunterschiede in den relativen Effizienzen für die beiden Stichprobenumfänge lassen sich durch das unterschiedliche Verhältnis des Umfangs h der verwendeten Teilstichproben zu N erklären. Die Schätzung der Kovarianz für $N = 21$ beruht auf Teilstichproben vom Umfang $h = 16$, d. h. es fließen 76.2% der Beobachtungen in die Schätzung mit ein. Hingegen werden bei einem Stichprobenumfang von $N = 31$ Teilstichproben vom Umfang $h = 21$, d. h. nur 67.7% der Beobachtungen, genutzt. Für den klassischen Fall einer Normalverteilung

ohne Ausreißer ist die relative Effizienz der MCD-basierten Regressionsschätzer gegenüber dem KQ-Schätzer umso kleiner, desto weniger Information der Stichprobe ausgenutzt wird. Die relative Effizienz des RM-Funktional gegenüber dem KQ-Funktional sinkt wie erwartet mit steigender Korrelation zwischen den Komponenten des Zielvektors. In den in der Praxis relevanten Fällen ist die relative Effizienz des RM-Funktional gegenüber dem KQ-Schätzer bei Normalverteilung mäßig und bei einer t -Verteilung mit 3 Freiheitsgraden jedoch ungefähr genauso hoch. Der Stichprobenumfang hat für die betrachteten Werte bei einer Normalverteilung keinen Einfluss, jedoch verbessert sich die Effizienz des RM bei der t -Verteilung geringfügig mit höherem Stichprobenumfang.

Für moderat korrelierte Zielgrößen haben der RM und das R-MCD-Regressionssunktional ähnliche Effizienz. Bei Normalverteilung und einem Stichprobenumfang von $N = 31$ ist der RM hier sogar effizienter, und dies gilt auch noch bei geringen Korrelationen zwischen den Zielgrößen. Für stärkere Korrelationen ist wegen der nicht vorhandenen affinen Äquivarianz des RM eine Abnahme der relativen Effizienz festzustellen. Für die in der Praxis relevanten Fälle mit einer Blockabhängigkeitsstruktur ist der Effizienzverlust des RM gegenüber der robusten, affin äquivarianten R-MCD-Regression akzeptabel. Im Vergleich zur MLTS-Regression ist der RM nur in den Fällen mit sehr hohen Korrelationen zwischen allen Variablen weniger effizient.

Wie in Abschnitt 5.2.2 bereits kurz angesprochen wurde, ist die exakte Berechnung affin äquivarianter Kovarianzschätzer mit hohem Bruchpunkt sehr aufwendig. Für die exakte Bestimmung des MCD-Schätzers im \mathbb{R}^k muss die Kovarianzmatrix sämtlicher $(k + 1)$ -elementigen Teilstichproben der Datenmatrix untersucht werden. Die Anzahl solcher Teilstichproben ist schon bei moderatem Stichprobenumfang sehr umfangreich und bedingt äußerst lange Rechenzeiten. Bernholt und Fischer (2004) entwickeln einen Algorithmus zur Bestimmung des MCD-Schätzers in polynomieller Zeit $O(N^{k(k+3)/2})$. Eine exakte Bestimmung des MCD-Schätzers ist selbst bei einer Anwendung auf die Daten in kurzen Zeitfenstern im Online-Monitoring zu zeitintensiv.

Ein schneller, aber heuristischer Algorithmus von Rousseeuw und Van Driessen (1999) erlaubt eine approximative Berechnung des MCD-Schätzers. Für kleine Datensätze liefert der Algorithmus typischerweise die optimale Teilstichprobe und die Fast-MCD-Approximation (FMCD) stimmt mit dem exakten Schätzer überein. Aufgrund der zufälligen Auswahl der untersuchten Teilstichproben können dennoch wiederholt abweichende Lösungen gefunden werden. Dies ist trotz der kurzen Zeitfenster auch für die vorliegenden Daten festzustellen. Die für einen Datensatz geschätzten FMCD-Regressionskoeffizienten können sich somit bei wiederholter Berechnung unterscheiden.

Eine unverzichtbare Eigenschaft bei der Approximation linearer Trends in den intensivmedizinischen Zeitreihen ist eine hohe Robustheit der verwendeten Prozedur. So können bei den stark fehlerbehafteten Vitalparametern in einem kurzen Zeitfenster in verschiedenen Variab-

len und zu unterschiedlichen Zeitpunkten mehrfach einzelne Ausreißer als auch Gruppen von Ausreißern auftreten. Der maximal mögliche finite-sample Ersetzungs-Bruchpunkt für das MCD-Regressionsfunktional im Modell (5.5) beträgt $\varepsilon_N^*(T_{MCDreg}, \underline{\mathbf{Z}}_N) = \lfloor (N - k)/2 \rfloor / N$. Für Stichproben, bei denen höchstens $k + 1$ Beobachtungen in ein und demselben linearen Unterraum des \mathbb{R}^{k+2} liegen, besitzt auch der affin äquivalente MLTS-Schätzer diesen maximal möglichen Bruchpunkt. Damit erreichen diese Regressionsfunktionale bei großen Stichprobenumfängen optimale finite-sample Bruchpunkte von bis zu 0.5.

Zur Einschätzung der Robustheit der Prozeduren im Online-Monitoring, d. h. im Fall von kleinen Stichprobenumfängen und gleichzeitig großer Anzahl von Variablen, sind in Tabelle 5.3 die maximal möglichen finite-sample Bruchpunkte in Abhängigkeit des Stichprobenumfangs $N = 2w + 1$ und der Dimension k des Zielvektors dargestellt. Bedingt durch die notwendigerweise recht kurzen Zeitfenster und der relativ zum Stichprobenumfang N hohen Dimension k des Zielvektors, fallen die maximal möglichen finite-sample Bruchpunkte in der Online-Monitoring-Situation deutlich kleiner aus. Ein Bruchpunkt von 0.29 bei neun Zielvariablen und einer Fensterlänge von 21 Beobachtungen bedeutet für das MCD-Regressionsfunktional, dass nur fünf beliebig schlechte Beobachtungen verkraftet werden, bevor die Prozedur völlig zusammenbrechen kann.

$N =$	$k =$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
21	0.48	0.43	0.43	0.38	0.38	0.33	0.33	0.29	0.29	0.24
31	0.48	0.45	0.45	0.42	0.42	0.39	0.39	0.35	0.35	0.32
51	0.49	0.47	0.47	0.45	0.45	0.43	0.43	0.41	0.41	0.39
501	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	0.49	0.49	0.49	0.49	0.49

Tabelle 5.3: Maximal mögliche finite-sample Bruchpunkte für die MCD-basierten Regressionsfunktionale in Abhängigkeit des Stichprobenumfangs N und Dimension k der Zielgröße bei einer univariaten Regressorvariablen

Gemäß der Bruchpunktdefinition (5.8) für Regressionsfunktionale im multivariaten Regressionsmodell heißt die Schätzung zusammengebrochen, wenn die Schätzer für die Parameter $(\tilde{\boldsymbol{\alpha}}, \tilde{\boldsymbol{\beta}}^\top)^\top$ an den Rand des Parameterraums geschoben werden. Der Schätzer einer Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ heißt, grob gesprochen, zusammengebrochen, wenn der größte Eigenwert beliebig groß wird (Explosion) oder der kleinste Eigenwert Null annimmt (Implosion). Eine Implosion kann durch sogenannte Inlier herbeigeführt werden und bedeutet, dass die Schätzung zu einer singulären Matrix degeneriert.

Die Frage ist nun, ob sich im multivariaten Regressionsproblem eine Implosion des MCD-Schätzers bei der MCD- oder der MLTS-Regression auf die Schätzung der Regressionsparameter auswirkt. In diesem Fall wäre der finite-sample Bruchpunkt der Regressionsschätzer

jeweils 0, aber bedeutet die Implosion des in der Prozedur benötigten Kovarianzschätzers einen Zusammenbruch der gesamten Regressionsschätzung?

Beispielsweise betragen die robust geschätzten Einträge in der Kovarianzmatrix für die Varianz und Kovarianzen einer Variablen, die in einem Zeitfenster mindestens h identische Beobachtungen besitzt, jeweils 0. Damit ist die MCD-Matrix singulär, und der MCD-Schätzer ist zusammengebrochen. Mit der MCD-Regression wird in diesem Fall jedoch vernünftigerweise für diese Variable die Steigung der zugehörigen Regressionsgeraden auf 0 geschätzt. Bei den robusten univariaten Regressionsmethoden ist diese sogenannte „exact fit“-Eigenschaft durchaus erwünscht. Gemäß der Bruchpunktdefinition in (5.8) bedeutet die Implosion des verwendeten MCD-Schätzers im multivariaten Regressionsproblem nicht, dass auch der Regressionsschätzer zusammengebrochen ist. Trotzdem beträgt der finite-sample Ersetzungs-Bruchpunkt für das MCD-Regressionfunktional bei dieser Stichprobe $\varepsilon_N^*(T_{MCD}, \underline{\mathbf{Z}}_N) = 0$. Der maximale Bruchpunkt des MCD-Funktional beträgt nur $\varepsilon_N^*(T_{MCD}, \underline{\mathbf{Z}}_N) = \lfloor (N - (k + m) + 1)/2 \rfloor / N$ unter der Voraussetzung, dass sich die Beobachtungen der Stichprobe $\underline{\mathbf{Z}}_N$ in *allgemeiner Lage* befinden. Dabei heißt eine Stichprobe $\underline{\mathbf{Z}}_N$ mit $\mathbf{Z}_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \dots, N$, in allgemeiner Lage, wenn in jeder Hyperebene des \mathbb{R}^d höchstens d Punkte der Stichprobe liegen. Um sicherzustellen, dass die Bruchpunktaussagen für das MCD-Funktional auch für das MCD-Regressionfunktional gelten, wird daher auch im multivariaten Regressionsproblem die allgemeine Lage der Beobachtungen benötigt.

Beim MLTS-Schätzer fließt die maximale Anzahl $g(\underline{\mathbf{Z}}_N)$ der Beobachtungen, die in dem gleichen linearen Unterraum des \mathbb{R}^{k+m+1} liegen, in die Bestimmung des finite-sample Ersetzungs-Bruchpunkts für eine Stichprobe $\underline{\mathbf{Z}}_N$ mit ein. Für $g(\underline{\mathbf{Z}}_N) \rightarrow h$, d. h. für eine zunehmende Anzahl von Beobachtungen, die im gleichen linearen Unterraum des \mathbb{R}^{k+m+1} liegen, sinkt der maximal mögliche Bruchpunkt bis auf 0. Besitzt die Stichprobe h identische Beobachtungen, so ist bei der MLTS-Regression die Regularitätsbedingung $g(\underline{\mathbf{Z}}_N) < h$ zur Vermeidung degenerierter Kovarianzmatrizen der Fehler verletzt, und der Schätzer ist nicht mehr wohldefiniert.

In der Regel wird im multivariaten Regressionsproblem vorausgesetzt, dass die Fehlerkovarianzmatrix vollen Rang k besitzt. Wenn mindestens h Beobachtungen auf einer Hyperebene des Stichprobenraums liegen, wird durch die MCD-basierten Regressionsverfahren die Kovarianzmatrix der Fehler singulär geschätzt. Die Schätzung dieser Matrix befindet sich somit am Rand des Parameterraums, und der zugehörige Schätzer gilt als zusammengebrochen. Im multivariaten Regressionsmodell mit $m = 1$ fällt in diesem Fall sozusagen mindestens eine Dimension der Zielgröße weg. Die Abhängigkeitsbeziehungen zwischen der Einflussgröße und den Zielgrößen kann in einem niedrigerdimensionalen Raum beschrieben werden. Falls die Forderung nach einer Fehlerkovarianzmatrix mit vollem Rang wichtig ist und die Schätzung dieser Matrix in weiteren Analysen benötigt wird, könnte diese Entartung im multivariaten Regressionsproblem ebenfalls als Zusammenbruch der Regressionsprozedur aufgefasst werden. Die Bruchpunktdefinition (5.8) müsste dann so erweitert werden, dass neben der

Biasbetrachtung für die geschätzten Regressionsparameter gefordert wird, dass die Kovarianzmatrix der Fehler nicht singulär werden darf.

Hinsichtlich der Forderung, dass die Beobachtungen einer Stichprobe bei der Anwendung MCD-basierter Regressionsverfahren im multivariaten Regressionsproblem in allgemeiner Lage sein müssen, liefern letztlich vor allem die vorliegenden intensivmedizinischen Daten die entscheidenden Argumente bei der Wahl einer geeigneten Regressionsprozedur. Eine Analyse der Zeitreihen in kurzen Zeitfenstern deckt Datenstrukturen auf, die zu gravierenden praktischen Problemen führen. Diese Forderung der allgemeinen Lage bedeutet im Online-Monitoring beispielsweise, dass in einem Zeitfenster nicht mehr als $k + m$ Beobachtungen einer Variablen den gleichen Wert annehmen dürfen oder dass nicht mehr als $k + m$ Beobachtungen einer Variablen kollinear zu den Beobachtungen einer anderen Variablen an den gleichen Zeitpunkten sind. Diese Forderungen sind für Zufallsvariablen, die einer stetigen Verteilung folgen, fast sicher erfüllt. Für die intensivmedizinischen Vitalparameter kann angenommen werden, dass die unterliegende multivariate Verteilung stetig ist, jedoch werden die Beobachtungen nur auf einer diskreten Skala gemessen. Eine Untersuchung der vorliegenden Daten zeigt, dass die Beobachtungen in einem Zeitfenster häufig nicht in allgemeiner Lage sind. Die finite-sample Bruchpunkte sind in der Regel also geringer als in Tabelle 5.3 angegeben.

Angenommen, der FMCD-Schätzer wird basierend auf der optimalen Teilstichprobe vom Umfang $h = \lfloor (N + k + 2)/2 \rfloor$ bestimmt. Die geschätzte Kovarianzmatrix degeneriert beispielsweise zu einer singulären Matrix, falls mindestens h Beobachtungen auf einer Hyperebene des \mathbb{R}^{k+1} liegen. Um die Häufigkeiten des Auftretens solcher Datenkonstellationen mit Zahlen zu belegen, werden die neundimensionalen hämodynamischen Zeitreihen der 332 Patienten des betrachteten Datenkollektivs genauer analysiert. Die untersuchten Zeitfenster betragen 15, 21 und 31 Minuten.

Für jeden Patientendatensatz wird dazu einzeln der Anteil der Zeitfenster der Länge N und mit mindestens h identischen Beobachtungen in einer Variablen an der Gesamtheit aller Zeitfenster dieser Länge bestimmt. In Abbildung 5.1 sind Boxplots für diese Anteile von sämtlichen untersuchten Zeitreihen dargestellt. Über die 332 Patienten hinweg ist der Anteil dieser Zeitfenster sehr variabel, wobei im Mittel ca. 30% der untersuchten Zeitfenster entsprechende Datenkonstellationen aufweist. Mit wachsender Fensterlänge N nimmt der Anteil sogar leicht zu, da die Größe der Teilstichproben h im Vergleich zu N langsamer wächst. Besonders fällt ein Datensatz auf. Bei diesem Patienten werden für die Variablen Herzfrequenz und Puls fast über den ganzen Beobachtungszeitraum hinweg Werte von 80 bzw. 81 Schlägen pro Minute gemessen. Dies ist beispielsweise bei Patienten mit einem Herzschrittmacher möglich.

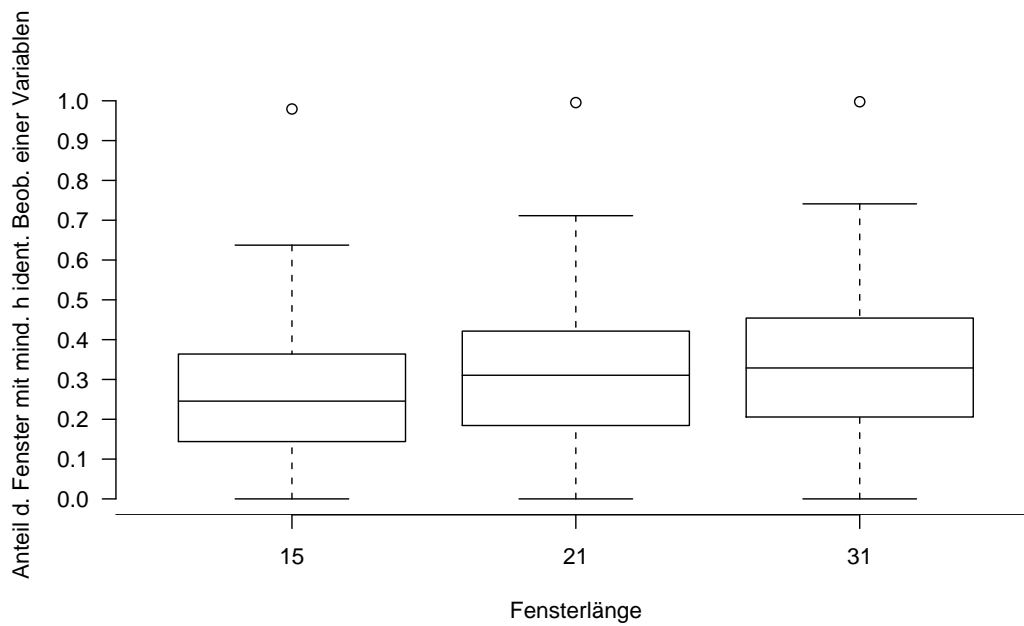


Abbildung 5.1: *Boxplots über den Anteil der Zeitfenster mit mindestens $h = (N + 11)/2$ identischen Beobachtungen für eine Variable bei Fensterlänge $N = 15, 21$ und 31*

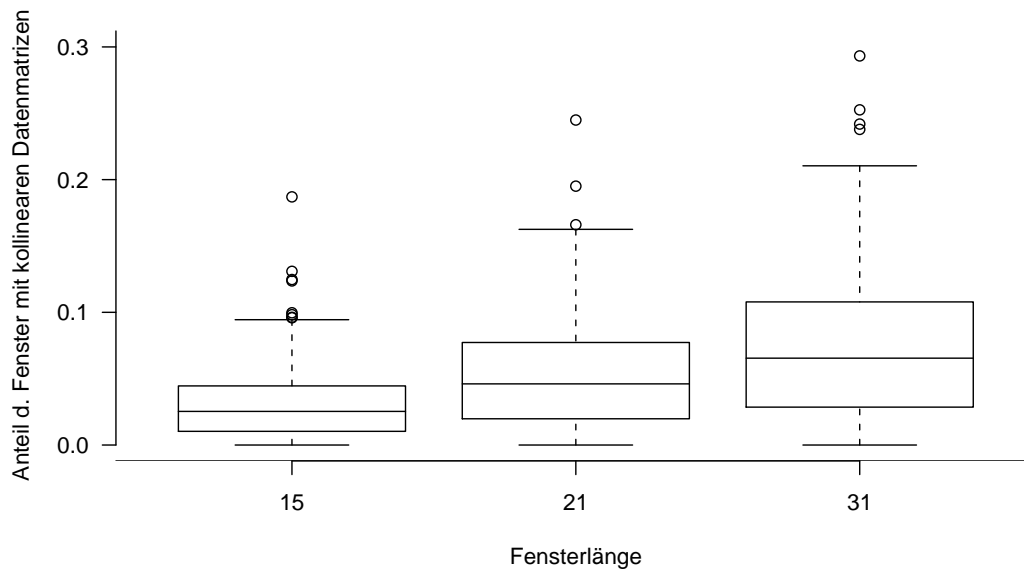


Abbildung 5.2: *Boxplots über den Anteil der Zeitfenster mit mindestens $h = (N + 11)/2$ kollinearen Beobachtungen bei Fensterlänge $N = 15, 21$ und 31*

Eine zweite Ursache für die Schätzung singulärer MCD-Kovarianzmatrizen ist die Kollinearität von mehr als h Beobachtungen eines Zeitfensters. Abbildung 5.2 zeigt Boxplots mit dem Anteil der Zeitfenster, für die der FMCD-Algorithmus Kollinearitäten für mindestens h Beobachtungen der Datenmatrix gefunden hat, jeweils an der Gesamtheit aller Zeitfenster

der Länge N . Bei der Bestimmung solcher Kollinearitäten werden diejenigen Zeitfenster, in denen der FMCD-Schätzer bereits aufgrund zu vieler identischer Beobachtungen singulär wird, ausgenommen. Für die Berechnungen für Abbildung 5.2 wurde die Software **S-PLUS** 4.5, unter Verwendung des Fortran-Codes für den FMCD (Rousseeuw und Van Driessen, 1999), genutzt. Der wahre Anteil von Zeitfenstern mit mindestens h kollinearen Beobachtungen liegt sogar etwas höher, da wegen der zufälligen Auswahl der Teilstichproben nicht alle Fälle entdeckt werden. Insgesamt liefert der FMCD-Schätzer im Mittel in jedem dritten Zeitfenster eine singuläre, d. h. zusammengebrochene, Schätzung der Kovarianzmatrix.

Wenn mehr als h Beobachtungen auf einer Hyperebene liegen, erfolgt mit dem FMCD-Algorithmus die Bestimmung einer Gleichung dieser Hyperebene. Als FMCD-Schätzung für die Kovarianzmatrix wird in der Praxis anschließend die singuläre empirische Kovarianzmatrix aus sämtlichen Beobachtungen der Datenmatrix, die in dieser Hyperebene liegen, ausgegeben. Abhängig von der Anzahl der Beobachtungen auf der ermittelten Hyperebene fällt der Bruchpunkt der Regressionsverfahren hier bis auf 0 ab.

Sollen im Modell (5.5) bei potentiell degenerierter Kovarianzmatrix der Fehler mit unbekanntem Rang $r^* \leq k$ die Regressionsparameter trotzdem robust und affin äquivariant geschätzt werden, dann muss nach einem Ausweg gesucht werden.

Eine Lösungsmöglichkeit besteht in der Schätzung des Rangs r^* und einer entsprechenden Transformation der Beobachtungen in den zugehörigen r^* -dimensionalen Unterraum. Dazu kann der Regressionsschätzung eine robuste Hauptkomponentenanalyse vorgeschaltet werden. Zur Gewinnung von Hauptkomponenten und Transformationsmatrix sind hier eine robuste Projection-Pursuit basierte Hauptkomponentenanalyse (Li und Chen, 1985; Croux und Ruiz-Gazen, 1996, 2004) oder eine Kombination dieses Verfahrens mit robuster Kovarianzschätzung, der robusten Hauptkomponentenanalyse ROBPCA (Hubert, Rousseeuw und Vanden Branden, 2004) geeignet. Mit diesen Methoden können insbesondere Situationen erkannt werden, in denen ein Großteil der Beobachtungen auf einer Hyperebene liegt. Basierend auf den Hauptkomponenten ist mittels einer MCD- oder MLTS-Regression eine robuste Schätzung der Regressionsparameter im \mathbb{R}^{r^*} möglich. Diese müssen anschließend wieder in den \mathbb{R}^k zurück transformiert werden. In der Praxis erweist sich dieses Vorgehen für das Online-Monitoring als problematisch, da neben den approximativen Algorithmen vor allem die langen Rechenzeiten nachteilig sind.

Eine ad-hoc Lösung, die im Data Mining zur Erkennung verborgener Strukturen in hochdimensionalen Daten gebräuchlich ist, ist die Addition eines geringfügigen Rauschens zu den Beobachtungen. So fügt Koivunen (1996) diskret gemessenen Beobachtungen, die auf eine Einheit genau gemessen werden, ein gleichverteiltes Rauschen aus dem Intervall $[-0.5, 0.5]$ zu, um einen robusten multivariaten Filter basierend auf dem MCD-Lokationsschätzer anwenden zu können. Bei der robusten Schätzung der Kovarianz werden damit durch Inlier

hervorgerufene singuläre Matrizen vermieden. Die Schätzung der Regressionsparameter erfolgt hierbei weiterhin im \mathbb{R}^k , obwohl sämtliche Information aus den Daten im \mathbb{R}^{r^*} , $r^* \leq k$, enthalten ist. Ein Vergleich der Güte der MCD-Schätzung im \mathbb{R}^{r^*} mit der MCD-Schätzung auf Basis der weit unterhalb der Messgenauigkeit verrauschten Daten im \mathbb{R}^k zeigt in Simulationen geringere mittlere quadratische Fehler für die Schätzer aus den zufällig verrauschten Beobachtungen. Dies scheint zunächst paradox, ist aber über die höhere Dimension zu erklären. Die relative Effizienz des MCD-Schätzers, wie auch anderer robuster Kovarianzschätzer, nimmt nämlich mit zunehmender Dimension zu (Croux und Haesbroeck, 1999). Diese Eigenschaft überträgt sich auf MCD-basierte Parameterschätzer in Regressionsmodellen (Croux, Dehon, Rousseeuw und Van Aelst, 2001; Rousseeuw, Van Aelst, Van Driessen und Agulló, 2004; Agulló, Croux und Van Aelst, 2001), sogar wenn zusätzliche zufällige Variablen mit hinzugenommen werden.

Wie Simulationen weiter zeigen, hat das zufällige Rauschen, selbst wenn es weit unterhalb der Messgenauigkeit gewählt wird, einen erheblichen Einfluss auf die Wahl der optimalen Teilstichprobe bei der Bestimmung des MCD-Schätzers (vgl. Anhang C). Gerade bei der Analyse von Daten aus der Intensivmedizin scheint es allerdings verfehlt, den Zufall über die Auswahl der Beobachtungen und damit über die zum Teil höchst unterschiedlichen Schätzungen der unbekannten Parameter entscheiden zu lassen.

Insgesamt erweist sich die Findung eines geeigneten Regressionsverfahrens im multivariaten Online-Monitoring als eine schwierige Aufgabe. Die obige Diskussion zeigt, dass sich die Forderungen nach affiner Äquivarianz, hoher Robustheit und schnellen Rechenzeiten der Regressionsverfahren bei den benötigten kleinen Stichprobenumfängen und der besonderen Struktur der vorliegenden Daten nicht gleichzeitig erfüllen lassen. Die MCD-basierten Schätzer besitzen zwar einige der gewünschten Eigenschaften, jedoch ist zum einen ihre Berechnung schwierig und zum anderen ist die Skala, auf der die intensivmedizinischen Variablen erhoben werden, zu diskret, um diese Verfahren anwenden zu können.

Die Forderungen nach einer hohen Robustheit oder nach kurzen Rechenzeiten können nicht aufgegeben werden, jedoch wird die affine Äquivarianz hauptsächlich für die Effizienz der Verfahren benötigt. Daher ist zu überlegen, ob eine gesonderte robuste univariate Approximation der linearen Trends für jede der k Zielvariablen eine akzeptable Alternative darstellt. Die Untersuchungen zum Effizienzverlust bei Verwendung des univariaten RM-Funktionalen im multivariaten Regressionsproblem zeigen, dass der RM-Schätzer für moderate Korrelationen zwischen den Komponenten des Zielvektors durchaus konkurrenzfähig ist. Ein weiterer Vorteil des RM ist die Unempfindlichkeit gegenüber kleinen Änderungen in den Daten. So zeigt Schettlinger (2004), dass der univariate LTS-Schätzer wie der LMS-Schätzer zu Instabilitäten neigt. Ein ähnliches Verhalten ist daher auch für den MLTS-Schätzer zu erwarten. Die Approximation der unbekannten Parameter im Modell (5.5) basiert daher im folgenden auf der Verwendung des univariaten RM-Schätzers.

5.2.4 MODIFIKATION DER GEWÄHLTEN REGRESSIONSMETHODE

In Kapitel 5.2.3 wurden verschiedene Verfahren zur lokalen Approximation der unbekannten Parameter $(\boldsymbol{\mu}(t), \boldsymbol{\beta}(t))$ im Modell $\mathbf{X}(t+s) = \boldsymbol{\mu}(t) + \boldsymbol{\beta}(t)s + \boldsymbol{\varepsilon}(s;t) + \boldsymbol{\eta}(s;t)$, $s = -w, \dots, w$, eingehend betrachtet. Für die diskret gemessenen hämodynamischen Variablen wird als Schlussfolgerung der Diskussion vorgeschlagen, für jede Variable die Parameter gesondert durch eine univariate Regression mit dem Repeated Median zu approximieren. Diese Methode ist sehr robust, aber nicht affin äquivariant und bei hohen Korrelationen zwischen den einzelnen Variablen der multivariaten Zeitreihe nur mäßig effizient.

Für die Reduktion der approximierten Signale auf wenige Komponenten ist in den folgenden Kapiteln insbesondere der in den einzelnen kurzen Zeitfenstern geschätzte Steigungsparameter $\boldsymbol{\beta}(t)$ von Interesse. Eine sorgfältige deskriptive Analyse der mittels des RM geschätzten lokalen Steigungsparameter $\hat{\boldsymbol{\beta}}(t)$, $t = w + 1, \dots, T - w$, für sämtliche Zeitfenster der Länge $2w + 1$ einer hämodynamischen Zeitreihe zeigt eine auffällige Verteilung dieser Werte. Exemplarisch wird dies hier anhand der Schätzungen für eine Zeitreihe des Datenkollektivs mit einer Länge von ca. 6400 Zeitpunkten dargestellt. In einem gleitenden Fenster von 21 Beobachtungen wird für den diastolischen arteriellen Blutdruck jeweils die lokale Steigung mittels des RM geschätzt. Abbildung 5.3 zeigt ein Streudiagramm dieser geschätzten lokalen Steigungsparameter $\hat{\boldsymbol{\beta}}(t)$ gegen die um einen Zeitpunkt verschobenen Schätzungen $\hat{\boldsymbol{\beta}}(t + 1)$.

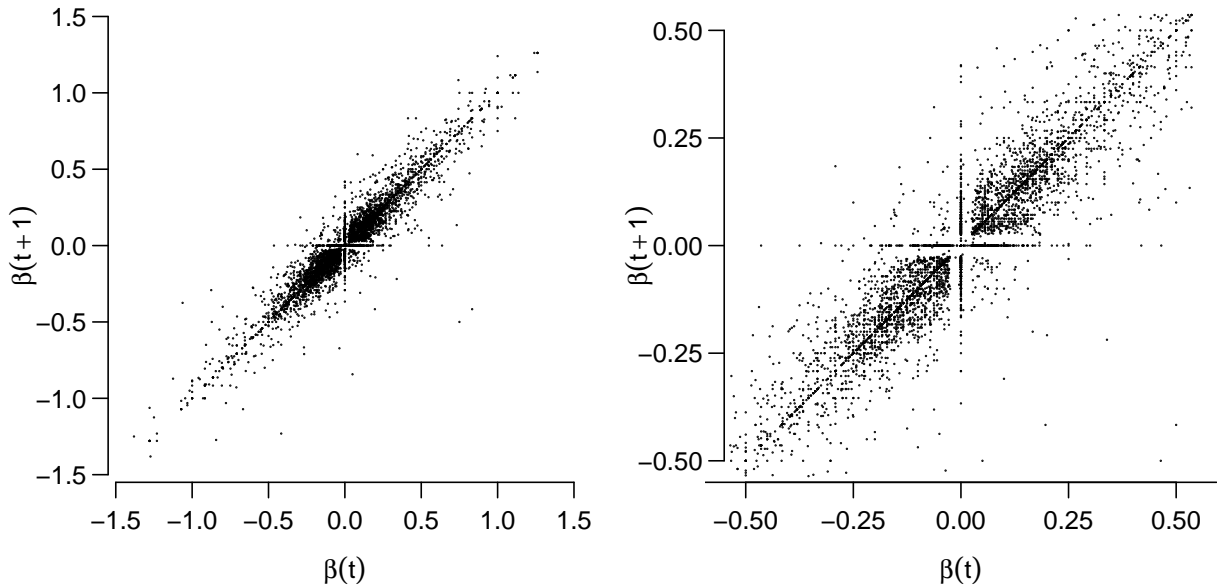


Abbildung 5.3: Streudiagramm der in einem gleitenden Fenster von 21 Beobachtungen mittels RM geschätzten Steigungsparameter $\hat{\boldsymbol{\beta}}(t)$ gegen $\hat{\boldsymbol{\beta}}(t + 1)$ für den diastolischen Blutdruck eines Patienten, Ausschnitt (links) und vergrößerter Ausschnitt (rechts)

Wie erwartet sind die Schätzungen der lokalen Steigungsparameter für aufeinanderfolgende Zeitfenster hoch korreliert. Außerdem ist eine starke Häufung der Schätzungen mit einem Wert von 0 zu erkennen. In insgesamt 27% aller Zeitfenster wird für den diastolischen Blutdruck dieses Patienten eine lokale Steigung von 0 geschätzt. Auffällig ist auch ein schmales Intervall um die 0, in dem weitaus weniger Punkte liegen. Eine genauere Untersuchung der empirischen Verteilung der geschätzten Steigungen für mehrere hämodynamische Variablen und mehr Patienten zeigt ein eher diskretes Verhalten. Dies ist wiederum auf die diskrete Messung der intensivmedizinischen Daten zurückzuführen.

In der ökonometrischen Zeitreihenanalyse ist bekannt, dass eine hohe Diskretheit bei der Messung von Aktienkursen zu besonderen strukturellen Mustern führen kann. Wenn Aktienrenditen mit einer Einheit Zeitverzug gegeneinander abgetragen werden, zeigt sich im allgemeinen ein Muster, das an eine Kompass-Rose (*compass rose pattern*) erinnert (Crack und Ledoit, 1996; Krämer und Runde, 1997). In einem Streudiagramm der prozentualen Änderungen von $x(t-1)$ auf $x(t)$ der hämodynamischen Zeitreihen lässt sich das Kompass-Rosen-Muster ebenfalls wiederfinden. Bedingung für das Auftreten dieser Struktur sind geringe minütliche Änderungen der gemessenen Vitalparameter relativ zum Niveau, die Diskretheit dieser Änderungen und ein großes Spektrum möglicher Ausprägungen.

Gleichmaßen macht sich die Diskretheit bei der Bestimmung der RM-Steigungen bemerkbar. Bei einer Bestimmung der RM-Steigung gemäß (5.2) für eine ungerade Anzahl $2w + 1$ von Zeitpunkten in einem Datenfenster wird der äußere Median durch das arithmetische Mittel zweier Steigungs-Quotienten bestimmt. Der Nenner dieser Quotienten stammt aus der Menge $\{1, \dots, 2w\}$, im Zähler stehen mit den Differenzen zwischen den Beobachtungen des Zeitfensters ganze Zahlen, deren Betrag bei geringen Änderungen der Beobachtungen in einem Zeitfenster meist recht klein ist. Auch die lokalen Steigungen, die mit Hilfe des LMS oder der *Deepest Regression*-Methode (Rousseeuw und Hubert, 1999; Gather, Schettlinger und Fried, 2004) geschätzt werden, zeigen bei den diskret gemessenen Daten eine nahezu diskrete empirische Verteilung. Dagegen haben die Steigungen, die mittels der KQ- oder LTS-Regression bestimmt werden, eine fast stetige empirische Verteilung. Eine genauere Analyse der Zusammenhänge zwischen der diskreten Messung der Beobachtungen und den Auswirkungen auf die Verteilung der geschätzten Steigungen geht über den Rahmen dieser Arbeit hinaus, ist aber eine interessante Aufgabe. Wenn basierend auf den Schätzungen der lokalen Steigungen weitere statistische Analysen erfolgen sollen, ist die diskrete Verteilung eine unerwünschte Eigenschaft.

Soll die Approximation der Signale im Online-Monitoring dennoch basierend auf dem RM erfolgen, so ist eine Modifikation der Schätzprozedur, wie sie Bernholt, Fried, Gather und Wegener (2004), Fried (2004b) und Gather und Fried (2004) für die Approximation univariater Signale betrachten, sinnvoll. Basierend auf einem Ansatz von Lee und Kassam (1985) in einem Lokations-Skalen-Modell wird die wiederholte Anwendung einer linearen Regression in ineinander geschachtelten Zeitfenstern vorgeschlagen. Dabei wird der lineare Trend in ei-

nem inneren Zeitfenster $\{t-v, \dots, t+v\}$ zunächst mit Hilfe des RM-Schätzers approximiert, so dass mit (5.2) und (5.3) Schätzungen $\hat{\mu}(t)$ und $\hat{\beta}(t)$ resultieren. Mit einem robusten Skalenfunktional $\sigma(\cdot)$ wird die Varianz der Residuen $r(t+s) = x(t+s) - \hat{\mu}(t) - s\hat{\beta}(t)$, $s = -v, \dots, v$, der Regressionsanpassung geschätzt (Gather und Fried, 2003). In einem äußeren Fenster $\{t-w, \dots, t+w\}$, $v \leq w$, das mit dem inneren Zeitfenster identisch sein kann, werden anschließend diejenigen Beobachtungen bestimmt, deren absoluten Residuen $r(t+s)$ kleiner oder gleich einem bestimmten Vielfachen der Skalenschätzung $\hat{\sigma}_r(t)$ sind. Alle Zeitpunkte $t+s$ mit $s \in S_t = \{s = -w, \dots, w : |r(t+s)| \leq c\hat{\sigma}_r(t)\}$, c beliebig gewählt, werden schließlich in einer zweiten linearen Regression gegen die Zeit berücksichtigt. Da Ausreißer und Artefakte die Schätzung in diesem zweiten Regressionsschritt kaum beeinflussen, kann hierzu eine klassische KQ-Regression verwendet werden (vgl. auch Bernholt, Fried, Gather und Wegener, 2004). Die hier beschriebene Prozedur wird im folgenden als univariate getrimmte RM-KQ-Regression (TRM-KQ-Regression) bezeichnet.

Bei einem leichten Effizienzgewinn ist diese Modifikation der univariaten Signalextraktionsprozedur Lokations- und Skalen-äquivariant, Trend-invariant (Fried, Bernholt und Gather, 2004) und fast ebenso robust wie der RM bei einem finite-sample Ersetzungs-Bruchpunkt von $\lfloor N/2 \rfloor / N$ (Bernholt, Fried, Gather und Wegener, 2004). Genauso wie für den RM wird bei einem Update des TRM-KQ-Filters nur $O(N)$ Zeit benötigt, wenn die zum Trimmen benötigte Skalenschätzung mit dem MAD erfolgt. Ein weiterer Vorteil besteht darin, dass die empirische Verteilung der so gewonnenen Schätzungen der lokalen Steigungsparameter nicht länger diskret ist, wie Abbildung 5.4 für das oben diskutierte Beispiel zeigt.

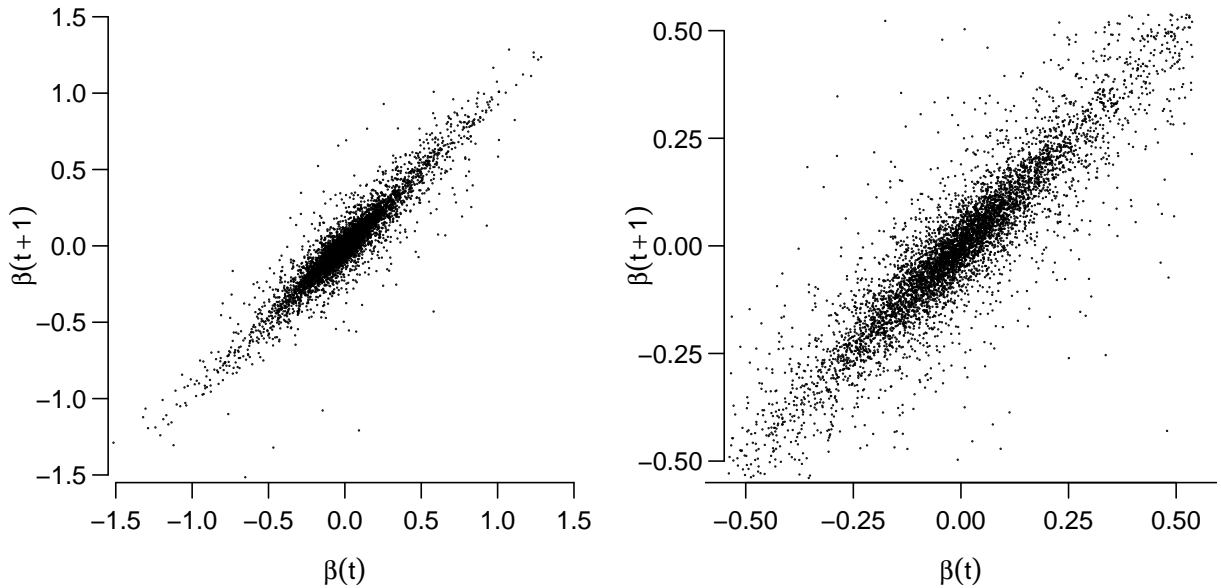


Abbildung 5.4: Streudiagramm der in einem gleitenden Fenster von 21 Beobachtungen (äußeres Fenster = inneres Fenster) mittels der TRM-KQ-Prozedur geschätzten Steigungsparameter $\hat{\beta}(t)$ gegen $\hat{\beta}(t+1)$ für den diastolischen Blutdruck eines Patienten, Ausschnitt (links) und vergrößerter Ausschnitt (rechts)

Für das Problem der multivariaten Signalextraktion bietet es sich an, ebenso eine solche Prozedur mit ineinander geschachtelten Zeitfenstern zu nutzen. Eine gesonderte univariate RM-Schätzung gefolgt von einer univariaten Skalenschätzung für die Residuen und einer variablenweisen KQ-Regression basierend auf unterschiedlich getrimmten Beobachtungen ist für die korrelierten Komponenten einer multivariaten Zeitreihe jedoch zu vermeiden. Durch die Verwendung komponentenweiser Verfahren können beim Trimmen Ausreißer bezüglich der multivariaten Abhängigkeitsstruktur unentdeckt bleiben. So ist es wünschenswert, die Korrelationsstruktur der Daten möglichst weitgehend auszunutzen. Für die multivariate Signalextraktion im Online-Monitoring hämodynamischer Variablen wird hier daher folgende Prozedur vorgeschlagen:

1. Bestimme in jedem Zeitfenster $\{t-w, \dots, t+w\}$ mit Hilfe des RM-Funktional $T_{RM} = (\tilde{\mu}(t), \tilde{\beta}(t))$ für jede Variable $X_j(\cdot)$, $j = 1, \dots, k$, einen Schätzer für das lokale Niveau $\mu_j(t)$ und die lokale Steigung $\beta_j(t)$, d. h.

$$\begin{aligned}\tilde{\beta}_j^{RM}(t) &= \text{med}_{s \in \{-w, \dots, w\}} \left(\text{med}_{v \neq s, v \in \{-w, \dots, w\}} \frac{x_j(t+s) - x_j(t+v)}{s-v} \right), \\ \tilde{\mu}_j^{RM}(t) &= \text{med}_{s \in \{-w, \dots, w\}} \left(x_j(t+s) - \tilde{\beta}_j^{RM}(t)s \right).\end{aligned}$$

Fasse diese Schätzungen in Vektoren zusammen zu $\tilde{\boldsymbol{\beta}}^{RM}(t) = (\tilde{\beta}_1^{RM}(t), \dots, \tilde{\beta}_k^{RM}(t))^T$ und $\tilde{\boldsymbol{\mu}}^{RM}(t) = (\tilde{\mu}_1^{RM}(t), \dots, \tilde{\mu}_k^{RM}(t))^T$.

2. Bestimme in dem betrachteten Zeitfenster die Residuen der Regressionsanpassung gemäß $\mathbf{r}(t+s) = \mathbf{x}(t+s) - \tilde{\boldsymbol{\mu}}^{RM}(t) - s\tilde{\boldsymbol{\beta}}^{RM}(t)$, $s = -w, \dots, w$, und fasse diese als multivariate Stichprobe auf.
3. Schätze aus den Residuen $\mathbf{r}(t+s)$, $s = -w, \dots, w$, mit Hilfe eines robusten Schätzers eine lokale Kovarianzmatrix $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(t)$ der Fehler.
4. Bestimme die Menge der Zeitpunkte des Datenfensters, deren Residuen bezüglich der lokalen Kovarianzstruktur einen Mahalanobisabstand haben, der kleiner als ein vorgegebener Wert d_N ist, d. h. $S_t = \{s = -w, \dots, w : \mathbf{r}(t+s)^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}(t)^{-1} \mathbf{r}(t+s) \leq d_N\}$.
5. Führe auf Basis der Beobachtungen der getrimmten Stichprobe $\{(t+s, \mathbf{x}(t+s)), s \in S_t\}$ eine multivariate KQ-Regression durch und erhalte mit $\tilde{\boldsymbol{\beta}}^{TRM-KQ}(t)$ und $\tilde{\boldsymbol{\mu}}^{TRM-KQ}(t)$ Schätzer für die lokale Steigung und das lokale Niveau des betrachteten Zeitfensters.

Eine Regressionsschätzung gemäß dieser Prozedur wird im folgenden als multivariate TRM-KQ-Regression bezeichnet.

In Schritt 3 muss die robuste Schätzung einer Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma}(t)$ der Residuen auf Basis einer kleinen Stichprobe erfolgen. In Abschnitt 5.2.3 hat sich hierbei gezeigt, dass diese Matrix aufgrund von Inliern bei einer robusten Schätzung häufig singulär werden kann und dass hoch robuste, affin äquivalente Schätzer, wie der FMCD-Schätzer, in dieser Situation im

Online-Monitoring weniger gut geeignet sind. Ein robuster, aber nicht affin äquivarianter Kovarianzschätzer, wie beispielsweise der orthogonalisierte Gnanadesikan-Kettenring-Schätzer (OGK-Schätzer; Maronna und Zamar, 2002) kann hier eine schnell zu berechnende Alternative darstellen.

Der Kovarianzschätzer aus Gnanadesikan und Kettenring (1972) nutzt für ein Paar von Zufallsvariablen X und Y und einen univariaten Skalenschätzer $\sigma(\cdot)$ die Gleichheit $\text{Cov}(X, Y) = (\sigma(X + Y)^2 - \sigma(X - Y)^2)/4$. Maronna und Zamar (2002) modifizieren den entsprechenden auf paarweisen, robusten Gnanadesikan-Kettenring-Kovarianzen basierenden Schätzer der Kovarianzmatrix so, dass eine positiv definite und approximativ affin äquivariante Matrix resultiert. Zur Bestimmung des OGK $_{\sigma}$ -Schätzers für Stichprobenvariablen $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N \in \mathbb{R}^k$, und ein robustes univariates Skalenfunktional $\sigma(\cdot)$ sind die folgenden Schritte nötig:

1. Skalieren die Stichprobenvariablen durch $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\mathbf{D}^{-1}$ mit $\mathbf{D} = \text{diag}(\sigma(X_1), \dots, \sigma(X_k))$.
2. Bestimme eine robuste Korrelationsmatrix \mathbf{R} von \mathbf{X} durch die Anwendung des GK-Schätzers auf die Spalten der skalierten Variablen \mathbf{Y} , d. h. $R_{jj} = 1$ und $R_{ij} = (\sigma(Y_i + Y_j)^2 - \sigma(Y_i - Y_j)^2)/4$, $i \neq j$.
3. Führe eine Eigenwertzerlegung $\mathbf{R} = \mathbf{E}\mathbf{\Lambda}\mathbf{E}^T$ durch, wobei $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$ die geordneten Eigenwerte und \mathbf{E} die zugehörigen Eigenvektoren von \mathbf{R} enthält.
4. Mit $\mathbf{A} = \mathbf{D}\mathbf{E}$ und $\mathbf{Z} = \mathbf{X}(\mathbf{A}^T)^{-1}$ sowie $\mathbf{\Gamma} = \text{diag}(\sigma(Z_1)^2, \dots, \sigma(Z_k)^2)$ definiere den OGK $_{\sigma}$ -Schätzer durch $\text{OGK}_{\sigma}(\mathbf{X}) = \mathbf{A}\mathbf{\Gamma}\mathbf{A}^T$.

Aufgrund von Inliern oder Kollinearitäten kann eine hochrobuste univariate Skalenschätzung mittels $\tilde{\sigma}(\cdot)$ in den Schritten 1 oder 4 für einige der Variablen X_j , $j = 1, \dots, k$, bzw. Z_j , $j = 1, \dots, k$, den Wert Null annehmen. Eine vernünftige Schätzung der Varianz wird jedoch zum Trimmen der Beobachtungen benötigt, wobei die geschätzte Kovarianzmatrix invertiert werden muss. Um bei sehr vielen Inliern eine Implosion der Skalenschätzung zu vermeiden, kann in diesen Fällen die Schätzung auf eine sehr kleine, von Null verschiedene untere Schranke gesetzt werden. Bei der Bestimmung des OGK $_{\sigma}$ -Schätzers wird hier für die univariate Skalenschätzung durch $\sigma(\cdot)$ die Vorschrift

$$\sigma(\cdot) = \max(\tilde{\sigma}(\cdot), \delta) \quad (5.10)$$

verwendet, wobei $\tilde{\sigma}(\cdot)$ ein hochrobustes Skalenfunktional mit einem Bruchpunkt von 50% ist und δ eine sinnvolle untere Schranke für die Variabilität darstellt. Dabei muss δ so gewählt werden, dass die Matrix mit Rücksicht auf die Toleranzschranke der verwendeten Software invertiert werden kann. Eine Analyse der hochrobust geschätzten Variabilität der Residuen nach lokalen RM-Anpassungen an die hämodynamischen Beobachtungen zeigt, dass die von Null verschiedenen Schätzungen in der Regel kaum Werte kleiner als $\delta = 0.02$ annehmen. Die auf (5.10) basierende OGK $_{\sigma}$ -Schätzung garantiert die Invertierbarkeit der geschätzten Kovarianzmatrix. Dabei stellt die Abschätzung der Variabilität durch δ keine Einschränkung

für die Erkennung von Ausreißern dar, sondern bietet eine praktikable Lösung für das lokale multivariate Trimmen bei der Signalextraktion im Online-Monitoring.

Verschiedene hochrobuste univariate Skalenfunktionale für die Schätzung der Variabilität in kleinen Stichproben diskutieren Gather und Fried (2003) hinsichtlich der Anwendung im Online-Monitoring. In dieser Arbeit werden zur Bestimmung des OGK-Schätzers für das Skalenfunktional $\tilde{\sigma}(\cdot)$ nur der MAD $\sigma_{MAD} = c_N^{MAD} \text{med}(|x_1 - \tilde{\mu}|, \dots, |x_N - \tilde{\mu}|)$ und der Q_N -Schätzer (Rousseeuw und Croux, 1993) $\sigma_{Q_N} = c_N^{Q_N} \{ |x_i - x_j| : 1 \leq i < j \leq N \}_{(h)}$, $h = \binom{[N/2]+1}{2}$ betrachtet. Die Konstanten c_N^{MAD} und $c_N^{Q_N}$ werden bei einem Stichprobenumfang von N für die Konsistenz der Schätzer bei einer Standardnormalverteilung benötigt. Vorteil des MAD ist, dass er in $O(\log N)$ Zeit updatefähig ist. Den Q_N -Schätzer empfehlen Ma und Genton (2001) im Zusammenhang mit dem GK-Schätzer, und Gather und Fried (2003) finden ein gutes Verhalten sowohl bei Inliern als auch bei Niveauänderungen.

In Schritt 4 der multivariaten Signalextraktionsprozedur werden die Beobachtungen bestimmt, deren Residuen einen zu großen Mahalanobisabstand haben. Dazu wird eine Schranke d_N benötigt, beispielsweise $d_N = \chi_k^2(\beta)$, wobei $\chi_k^2(\beta)$ das β -Quantil einer χ^2 -Verteilung mit k Freiheitsgraden darstellt. Alternativ kann d_N für jedes Zeitfenster leicht adaptiert werden durch $d_N = \chi_k^2(\beta) \text{med}(d(-w), \dots, d(w)) / \chi_k^2(0.5)$ und $d(s) = \mathbf{r}(t+s)^\top \hat{\Sigma}(t)^{-1} \mathbf{r}(t+s)$, $s = -w, \dots, w$, (Maronna und Zamar, 2002).

Eine Implosion des OGK $_\sigma$ -Schätzers wird durch die Wahl von $\sigma(\cdot)$ gemäß (5.10) verhindert. Damit muss bei einer Bruchpunktbetrachtung nur die Explosion des Schätzers untersucht werden. Maronna und Zamar (2002) zeigen, dass der maximal mögliche finite-sample Explosions-Bruchpunkt des OGK-Schätzers dem maximalen Explosions-Bruchpunkt des verwendeten univariaten Skalenschätzers $\sigma(\cdot)$ entspricht. Für den OGK $_\sigma$ -Schätzer auf Basis des MAD oder des Q_N -Schätzers ist damit ein maximaler Bruchpunkt von 50% möglich.

Der OGK $_\sigma$ -Schätzer ist hochrobust, flexibel und schnell zu berechnen, aber nicht affin äquivariant. Ähnlich zu den Untersuchungen von Maronna und Zamar (2002) soll daher im folgenden der OGK $_\sigma$ -Schätzer basierend auf dem MAD und dem Q_N -Schätzer mit der empirischen Kovarianzmatrix und dem FMCD-Schätzer bei kleinen Stichprobenumfängen verglichen werden. Bei der Beurteilung der Güte der Schätzung von Matrizen interessiert vor allem die Form der wahren Matrix Σ . Daher wird hier ein Gütemaß zur Messung der Sphärizität benötigt. Eine Möglichkeit ist die Verwendung eines Maßes φ , das die Sphärizität von $\Sigma^{-1/2} \hat{\Sigma} \Sigma^{-1/2}$ mißt, wobei $\hat{\Sigma}$ ein Schätzer für Σ ist. Als Maß φ wird hier die Konditionszahl $\text{cond}(\Sigma) = \|\Sigma\|_2 \|\Sigma^{-1}\|_2$ von Σ genutzt. Diese Größe gibt die mittlere Abweichung der Schätzung mittels $\hat{\Sigma}$ an und ist dabei invariant unter affinen Transformationen.

In der Simulationsstudie werden kleine Stichprobenumfänge mit $N = 21$, 31 und $N = 100$ betrachtet. Die Beobachtungen werden aus neundimensionalen Normalverteilungen mit Erwartungswert $\mathbf{0}$ und Kovarianzmatrizen Σ_1 , Σ_6 und Σ_9 aus Abschnitt 5.2.3 erzeugt. Zusätzlich werden kontaminierte Stichproben generiert, bei denen $(1 - \varepsilon)N$, ε fest, Beobachtungen

aus den obigen Normalverteilungen stammen und jeweils εN Beobachtungen aus einer Normalverteilung mit $\mathcal{N}(l\Sigma_j^{1/2}\mathbf{v}_j, \tau^2\Sigma_j)$, $j = 1, 6, 9$, wobei \mathbf{v}_j den normierten Eigenvektor des kleinsten Eigenwerts von Σ_j bezeichnet. Für τ wird $\tau = 0.1$ gewählt, so dass die kontaminierten Beobachtungen annähernd auf einen Punkt fallen, und für l werden verschiedene Fälle betrachtet, wobei $l \in \{5, 7, 10, 15, 20, 40\}$.

Für jede Stichprobe wird mit jedem der betrachteten Schätzfunktionale die Kovarianzmatrix Σ geschätzt, wobei jeweils der Logarithmus der Konditionszahl von $\Sigma^{-1/2}\hat{\Sigma}\Sigma^{-1/2}$ festgehalten wird. Im Idealfall ist diese Matrix die Einheitsmatrix \mathbf{I}_k , und die logarithmierte Konditionszahl beträgt 0. Zu beachten ist, dass die Konditionszahlen der empirischen Kovarianzmatrix und des FMCD wegen der affinen Äquivarianz von der Korrelationsstruktur zwischen den Variablen unabhängig sind.

Abbildung 5.5 zeigt die Mediane der logarithmierten Konditionszahlen für die verschiedenen Schätzfunktionale und Verteilungen für den Stichprobenumfang $N = 21$. Die rot eingefärbten Dreiecke stehen für die Ergebnisse der nicht-kontaminierten Beobachtungen, wobei für die OGK $_{\sigma}$ -Schätzer von links nach rechts die Konditionszahlen für die Kovarianzstrukturen Σ_1, Σ_6 und Σ_9 dargestellt sind. Die schwarzen Kreise stehen für die Konditionszahlen bei einer Verschmutzung der Stichproben mit einem festen Kontaminationsanteil von 20%, wobei die kontaminierten Beobachtungen mit dem Faktor l unterschiedlich weit herausgeschoben werden.

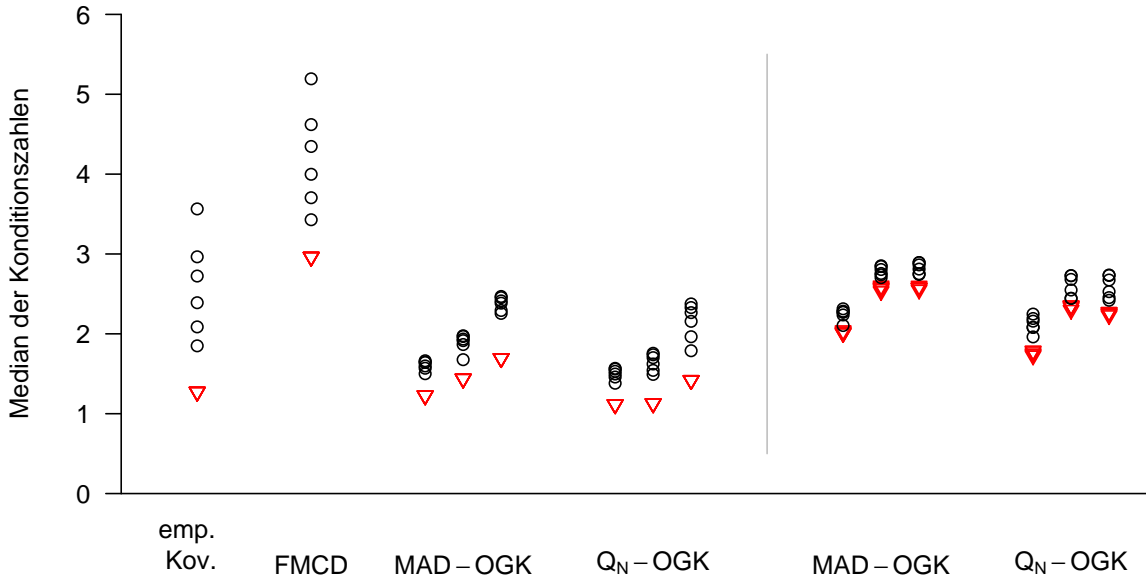


Abbildung 5.5: Güte der Kovarianzschätzungen bei verschiedenen Normalverteilungen ohne (rot) und mit (schwarz) Kontamination bei einem Stichprobenumfang von $N = 21$ (links) und Güte der OGK-Schätzungen unter zufälligen Transformationen (rechts)

Es ist zu erkennen, dass die OGK_σ -Schätzer ohne Kontamination fast so gut abschneiden wie die empirische Kovarianzmatrix, wobei die Güte der Schätzung bei Korrelationen zwischen den Variablen leicht abnimmt. Der FMCD-Schätzer schneidet bei dem geringen Stichprobenumfang jeweils am schlechtesten ab. Während die empirische Kovarianzmatrix von den kontaminierten Beobachtungen stark beeinflusst wird, fällt der Einfluss auf die OGK_σ -Schätzer gering aus. Gegenüber dem OGK_{MAD} -Schätzer hat der OGK_{Q_N} -Schätzer leichte Vorteile.

Ähnliche Aussagen gelten auch für Stichprobenumfänge von $N = 31$ und $N = 100$ (vgl. Abbildungen D.1 und D.2 in Anhang D). Hier ist auch zu sehen, dass der FMCD-Schätzer mit zunehmendem Stichprobenumfang bessere Ergebnisse liefert.

Von Interesse ist vor allem, wie stark sich das Fehlen affiner Äquivarianz auf die OGK_σ -Schätzung auswirkt. Dazu werden die Stichproben aus der obigen Simulationsstudie zusätzlich mittels zufällig generierten orthogonalen Matrizen transformiert (vgl. Maronna und Zamar, 2002). Anschließend wird die Güte der Kovarianzschätzung durch die OGK_σ -Schätzer unter Transformationen mit Hilfe der Konditionszahlen gemessen. Die Mediane der logarithmierten Konditionszahlen sind jeweils rechtsseitig in den Abbildungen 5.5, D.1 und D.2 dargestellt. In allen Fällen sind die entsprechenden Konditionszahlen größer als für die Schätzungen ohne Transformation. Es macht sich somit deutlich bemerkbar, dass die OGK_σ -Schätzer nicht äquivariant sind. Jedoch schneiden die OGK_σ -Schätzungen unter Transformationen für einen Stichprobenumfang von $N = 21$ immer noch besser ab als der FMCD-Schätzer. Dieser Vorteil der OGK_σ -Schätzer gegenüber dem FMCD-Schätzer verliert sich bei Zunahme des Stichprobenumfangs. Insgesamt bleibt aufgrund der Ergebnisse festzuhalten, dass insbesondere der OGK_{Q_N} -Schätzer bei kleinen Stichprobenumfängen, so wie sie im Online-Monitoring benötigt werden, zu empfehlen ist.

Zur Beurteilung der Effizienz der univariaten und multivariaten TRM-KQ-Regressionsprozeduren wurde die Simulationsstudie aus Kapitel 5.2.3 unter den gleichen Bedingungen um diese Verfahren erweitert. Die Tabellen 5.4 und 5.5 geben zum einen die relativen Effizienzen einer gesonderten TRM-KQ-Regression (Bernholt, Fried, Gather und Wegener, 2004) basierend auf dem MAD und dem Q_N -Schätzer für jede Variable der multivariaten Stichproben relativ zur KQ-Regression wieder. Dabei entspricht die Länge des äußeren Fensters der des inneren Fensters. Beim univariaten Trimmen wird eine Schranke von $2\tilde{\sigma}_{MAD}(t)$ bzw. $2\tilde{\sigma}_{Q_N}(t)$ gewählt. Außerdem werden die relativen Effizienzen der multivariaten TRM-KQ-Regressionsprozedur auf Basis des OGK_{MAD} - und des OGK_{Q_N} -Schätzers angegeben. Die Schranke beim multivariaten Trimmen lautet $d_N = \chi_9^2(0.95) \text{ med}(d(-w), \dots, d(w)) / \chi_9^2(0.5)$ mit $d(s) = \mathbf{r}(t+s)^\top \hat{\Sigma}(t)^{-1} \mathbf{r}(t+s)$, $s = -w, \dots, w$.

Im Vergleich zur RM-Regression (vgl. Tabellen 5.1 und 5.2) schneiden die univariaten TRM-KQ-Verfahren hinsichtlich der relativen Effizienz gegenüber dem KQ-Schätzer jeweils etwas besser ab. Da die univariaten TRM-KQ-Regressionsprozeduren angewendet auf die einzelnen Komponenten eines multivariaten Zielvektors nicht affin äquivariant sind, sinkt die Effizienz

Fall	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
univ. TRM(MAD)–KQ–Regression relativ zu KQ–Regression										
$N = 21$	0.745	0.724	0.671	0.603	0.495	0.396	0.635	0.582	0.536	0.504
$N = 31$	0.757	0.729	0.680	0.614	0.514	0.424	0.647	0.597	0.550	0.524
univ. TRM(Q_N)–KQ–Regression relativ zu KQ–Regression										
$N = 21$	0.768	0.749	0.701	0.631	0.532	0.437	0.667	0.618	0.576	0.543
$N = 31$	0.773	0.750	0.700	0.639	0.547	0.465	0.674	0.627	0.585	0.558
multiv. TRM(OGK _{MAD})–KQ–Regression relativ zu KQ–Regression										
$N = 21$	0.779	0.778	0.769	0.753	0.738	0.719	0.757	0.741	0.736	0.733
$N = 31$	0.816	0.807	0.800	0.793	0.781	0.774	0.787	0.776	0.767	0.764
multiv. TRM(OGK _{Q_N})–KQ–Regression relativ zu KQ–Regression										
$N = 21$	0.829	0.830	0.825	0.813	0.808	0.795	0.816	0.802	0.794	0.795
$N = 31$	0.858	0.849	0.845	0.838	0.835	0.834	0.841	0.828	0.826	0.824

Tabelle 5.4: Relative Effizienzen der univariaten und der multivariaten TRM–KQ–Regression jeweils basierend auf dem MAD und dem Q_N –Schätzer gegenüber der KQ–Regression für verschiedene Abhängigkeitsstrukturen und Stichprobenumfänge $N = 21$ und $N = 31$ bei Normalverteilung

wie erwartet mit steigender Korrelation zwischen den Zielgrößen.

Die multivariate TRM–KQ–Regression setzt sich aus mehreren Schritten zusammen, wobei der erste Schritt, die univariate RM–Regression, vorhandene Korrelationen zwischen den Zielgrößen nicht berücksichtigt. Nach dem multivariaten Trimmen erfolgt eine KQ–Regression basierend auf den verbleibenden Beobachtungen. Hierbei geht die Abhängigkeitsstruktur zwischen den Komponenten des Zielvektors mit ein. Dieser Aufbau der Prozedur bewirkt, dass die relativen Effizienzen der multivariaten TRM–KQ–Regression gegenüber der KQ–Regression bei steigender Korrelation zwischen den Zielgrößen nur geringfügig sinkt. Sowohl bei der univariaten als auch bei der multivariaten Anwendung ist dabei das Trimmen mittels des Q_N –Schätzers jeweils etwas effizienter als das Trimmen mittels des MAD. Für die klinische Anwendung bleibt jedoch zu überlegen, ob die Updatefähigkeit des Algorithmus zur Bestimmung des MAD (Bernholt, Fried, Gather und Wegener, 2004) den Nachteil bei der Effizienz nicht aufwiegt.

Zur Veranschaulichung der vorgeschlagenen Methode werden für die hämodynamische Zeitreihe aus Abbildung 4.1, die hier noch einmal wiederholt wird, multivariat glatte Signale extrahiert. Dazu wird die TRM(Q_N)–KQ–Regressionsprozedur in einem Fenster von $N = 21$ Zeitpunkten genutzt. Die extrahierten Signale sind in Abbildung 5.7 dargestellt.

Fall	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
univ. TRM(MAD)–KQ–Regression relativ zu KQ–Regression										
$N = 21$	1.545	1.497	1.377	1.181	0.911	0.700	1.220	1.132	0.998	1.003
$N = 31$	1.631	1.571	1.387	1.254	0.961	0.777	1.331	1.182	1.071	1.009
univ. TRM(Q_N)–KQ–Regression relativ zu KQ–Regression										
$N = 21$	1.571	1.535	1.415	1.228	0.970	0.758	1.264	1.178	1.051	1.069
$N = 31$	1.662	1.599	1.420	1.294	1.011	0.839	1.370	1.229	1.114	1.058
multiv. TRM(OGK _{MAD})–KQ–Regression relativ zu KQ–Regression										
$N = 21$	1.756	1.773	1.775	1.711	1.649	1.603	1.664	1.674	1.620	1.726
$N = 31$	1.882	1.857	1.803	1.824	1.769	1.785	1.815	1.760	1.739	1.747
multiv. TRM(OGK _{Q_N})–KQ–Regression relativ zu KQ–Regression										
$N = 21$	1.775	1.801	1.808	1.756	1.705	1.674	1.699	1.706	1.664	1.770
$N = 31$	1.893	1.870	1.824	1.852	1.804	1.841	1.848	1.795	1.770	1.791

Tabelle 5.5: Relative Effizienzen der univariaten und der multivariaten TRM–KQ–Regression jeweils basierend auf dem MAD und dem Q_N –Schätzer gegenüber der KQ–Regression für verschiedene Abhängigkeitsstrukturen und Stichprobenumfänge $N = 21$ und $N = 31$ bei t –Verteilung

Einen besseren Vergleich der beobachteten hämodynamischen Variablen mit den extrahierten Signalen ermöglicht Abbildung 5.8. Dabei wird nur ein Ausschnitt aus der betrachteten Zeitreihe gezeigt, um den Verlauf der extrahierten Signale bei Ausreißern und Trends zu verdeutlichen. Die Abbildungen 5.6, 5.7 und 5.8 zeigen, dass sowohl einzelne als auch zusammenhängende Ausreißer kaum einen Einfluss auf die extrahierten Signale ausüben. Trends werden gut erkannt und meist sehr glatt nachgezeichnet.

Gegenüber der MCD–basierten Regression ist die vorgeschlagene multivariate Signalextraktionsprozedur eine effiziente, schnell berechenbare und hochrobuste Alternative. Zusätzlich werden durch eine Modifikation des OGK _{σ} –Schätzers die für die hämodynamischen Daten vorhandenen Probleme aufgrund von Inliern und Kollinearitäten vermieden. Ein weiterer Vorteil der vorgeschlagenen Methode ist, dass die empirische Verteilung der Steigungsschätzungen stetig ist. Für die weiteren Analysen in dieser Arbeit wird zur lokalen Extraktion der relevanten Signale daher eine multivariate TRM(Q_N)–KQ–Regression verwendet.

Zusätzlich zu den Ergebnissen in dieser Arbeit sind Untersuchungen zur Güte der multivariaten Signalextraktionsprozedur bei unterschiedlichen Anzahlen von Ausreißern und Niveauänderungen von Interesse. Dieses Forschungsvorhaben ist Teil zukünftiger Untersuchungen und wird an dieser Stelle nicht weiter verfolgt.

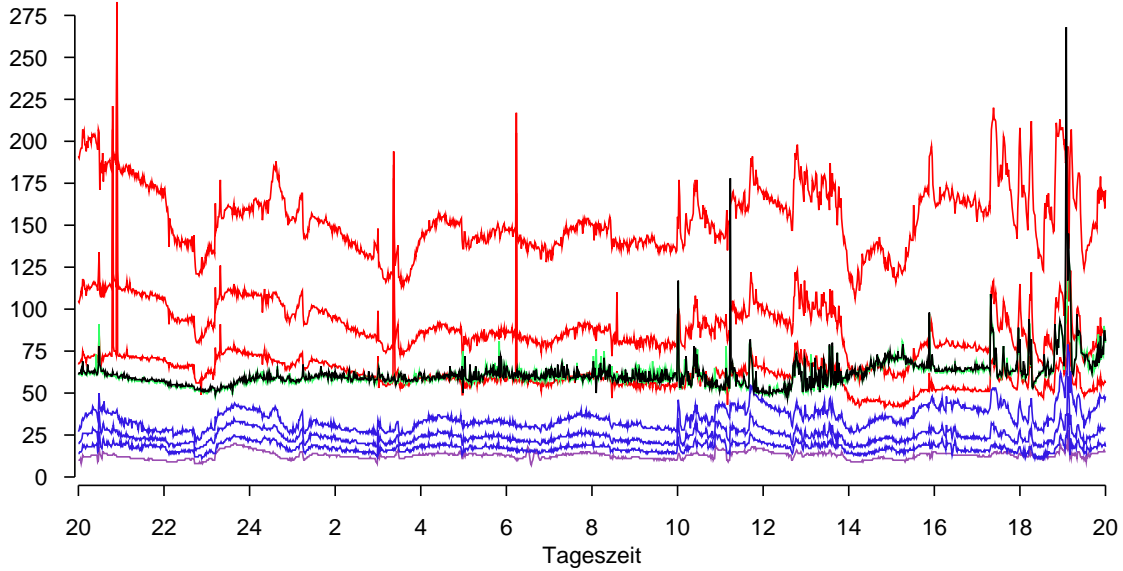


Abbildung 5.6: Zeitreihe mit neun hämodynamischen Variablen eines Intensivpatienten (vgl. Abbildung 4.1): arterielle Drücke (rot), Herzfrequenz (schwarz), Puls (grün), pulmonalarterielle Drücke (blau) und zentralvenöser Blutdruck (violett)

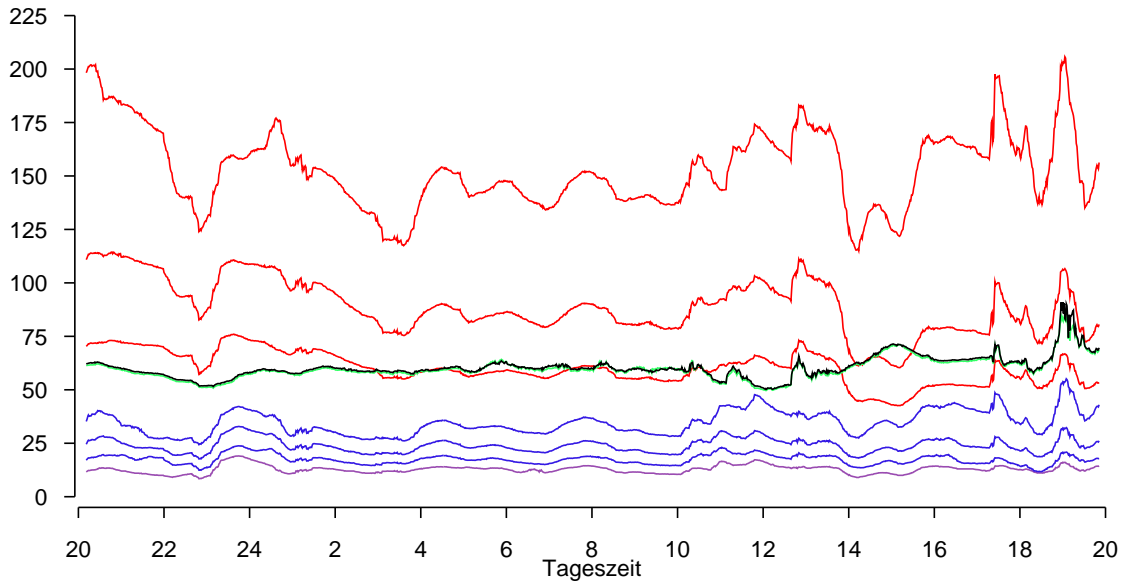


Abbildung 5.7: Extrahierte Signale mittels der $\text{TRM}(Q_N)$ -KQ-Regressionsprozedur für einen Intensivpatienten: arterielle Drücke (rot), Herzfrequenz (schwarz), Puls (grün), pulmonalarterielle Drücke (blau) und zentralvenöser Blutdruck (violett)

Durch die multivariate Online-Gewinnung glatter Signalkomponenten für jede hämodynamische Zeitreihe mittels der TRM-KQ-Regression in sich überlappenden fortschreitenden Zeitfenstern liegt gemäß Forderung (F.1) stets eine Approximation $\hat{\mu}(t)$ der lokalen Niveaus vor. Zusätzlich liefert die Signalextraktionsprozedur Informationen über die lokale Variabilität des Rauschens für jede Komponente (Forderung (F.2)) und eine Schätzung

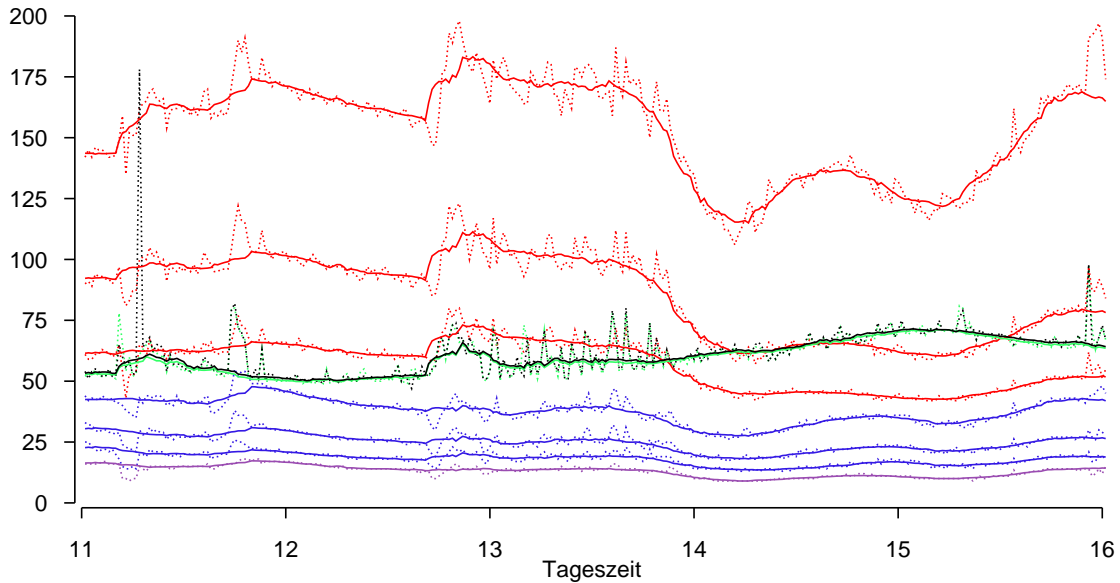


Abbildung 5.8: Ausschnitt der hämodynamischen Zeitreihe (gepunktet) mit extrahierten Signalen aus Abbildung 5.6: arterielle Drücke (rot), Herzfrequenz (schwarz), Puls (grün), pulmonalarterielle Drücke (blau) und zentralvenöser Blutdruck (violett)

des Steigungsverhaltens der zur lokalen Approximation verwendeten Gerade. Abgesehen von den Variablen Herzfrequenz und Puls unterscheiden sich die lokalen Niveaus für die einzelnen hämodynamischen Zeitreihen in der Regel deutlich. Gleiches gilt auch für die Varianz des Rauschens. Diese essentiellen Informationen können daher meist nicht weiter verdichtet werden. Zur Erkennung alarmrelevanter Situationen ist jedoch eine Überwachung der extrahierten Signale und der robust geschätzten lokalen Variabilität notwendig. Wenn ein Niveau über einen zu langen Zeitraum zu stark vom typischen Niveau abweicht, sollte über das Monitoring-System zusätzlich eine angemessene Warnung erfolgen. Um zu verhindern, dass eine alarmrelevante Situation fälschlicherweise nicht bemerkt wird, können weitgefaste und möglicherweise patientenspezifische Alarmgrenzen genutzt werden, die gegebenenfalls geeignet zu adaptieren sind. Zusätzlich muss angezeigt werden, wenn die Variabilität der Fehler in bestimmten Variablen ein kritisches Niveau überschreitet. Bei Auffälligkeiten hinsichtlich starker Variabilitätsänderungen ist die Alarmbereitschaft entsprechend anzupassen. Die hierfür benötigten Kontrollkarten müssen sowohl zeitliche Abhängigkeiten als auch Abhängigkeiten zwischen den einzelnen Komponenten berücksichtigen. In dieser Arbeit wird diese Aufgabe nicht weiter behandelt.

5.3 GRUPPIERUNG DER VITALPARAMETER NACH LOKAL ÄHNLICHEN STRUKTUREN

Über lokale Lage und Variabilität der Vitalparameter hinaus interessieren gemäß Forderung (F.3) die Strukturen, die in den einzelnen Zeitreihen zu finden sind. Abschnittsweise sind unter den verschiedenen extrahierten Signalen oft sehr ähnliche strukturelle Verläufe zu finden.

Wenn es unter den Signalen gemeinsame Trends oder gemeinsame temporäre oder dauerhafte Niveauänderungen gibt, ebenso wie Phasen, in denen mehrere Signale gemeinsam nahezu konstant verlaufen, handelt es sich dabei um redundante klinisch relevante Information, die weiter verdichtet werden kann.

Möglicherweise unabhängig von der gemeinsamen Struktur der Signale sind die Rauschanteile, die die interessierenden Signale überlagern, in der Regel hoch korreliert. Dies ist unter anderem auf Messungenauigkeiten oder Messfehler für zusammen erhobene Beobachtungen zurückzuführen. Gemeinsame Strukturen im Rauschen sind jedoch nicht von klinischer Bedeutung und geben kaum Aufschluss über den Zustand eines Patienten. Damit genügt es nicht, für die Reduktion der Anzahl der Signale die Kovarianzstruktur der von den extrahierten Signalen befreiten Beobachtungen heranzuziehen. Vielmehr sind gerade Änderungen im Lageverhalten der Variablen von klinischem Interesse.

Bisher richtet sich die Aufmerksamkeit der medizinischen Pflegekräfte meist auf die strukturellen Verläufe einiger weniger repräsentativer Variablen. Die Auswahl repräsentativer Vitalparameter kann mittels einer subjektiven Variablenselektion basierend auf physiologischen Überlegungen der Mediziner oder über statistische Methoden mit Hilfe eines geeignet definierten Kriteriums erfolgen. Im Online-Monitoring ist es denkbar, dass ein statistisches Verfahren lokal jeweils unterschiedliche repräsentative Variablen findet. Automatische Prozeduren mit einem festen Zielkriterium stoßen in der Praxis häufig auf geringe Akzeptanz, da die Selektion aus medizinischer Sicht zum Teil unbefriedigend ist. Benötigt wird ein Auswahlkriterium, das das ideale medizinische Wissen widerspiegelt. Dies impliziert jedoch, dass es möglich ist, allgemeingültige Regeln, auf denen die Überlegungen und Entscheidungen eines Mediziners beruhen, formulieren zu können. In der Praxis ist die Abbildung des medizinischen Wissens bisher kaum realisierbar, da selbst bei der Wahl repräsentativer Zeitreihen einige Subjektivität einfließt. Solange es hier keine Lösung gibt, scheint es in der Praxis besser zu sein, wenn ein Mediziner abhängig vom Krankheitsbild repräsentative Variablen auswählt, die er gut interpretieren kann und die für seine Diagnosefindung wertvoll sind. Für die hämodynamischen Variablen wurde in Kapitel 4.2.2 gezeigt, dass die Betrachtung der mittleren Blutdrücke zusammen mit der Herzfrequenz für die meisten Patienten einen Großteil der Varianz in den Daten erfassen kann. Durch physiologische Sachverhalte begründet können die mittleren Blutdrücke nicht lange ein gänzlich anderes Verhalten aufweisen als die entsprechenden diastolischen und systolischen Blutdrücke. Daher wird bei einer Untersuchung der strukturellen Verläufe der Zeitreihen erwartet, dass durch die Mitteldrücke jeweils gut die Struktur der diastolischen und systolischen Blutdrücke erfasst wird. Ebenso wird erwartet, dass sich die Verläufe von Herzfrequenz und Puls kaum unterscheiden. Eine Auswahl repräsentativer Vitalparameter stellt jedoch oft eine Einschränkung an „die Möglichkeit der Daten, für sich selbst zu sprechen“ dar. Im weiteren wird daher nach einem praktischen Kompromiss zwischen den Zielvorstellungen der Mediziner und den Möglichkeiten statistischer Methodik, die Informationen zu komprimieren, gesucht.

In diesem Abschnitt werden Wege aufgezeigt, die die extrahierten Signale auf Basis der klinisch relevanten Strukturänderungen in den Variablen auf eine geringere Anzahl beschränken können. Die gefundenen Strukturen können möglicherweise zur Abstraktion der klinischen Zustände im Sinne einer Einteilung der Zeitfenster in stabile, kritische oder alarmrelevante Phasen dienen, wie gemäß Forderung **(F.4)** erwünscht. Falls es mit Hilfe medizinischen Wissens gelingt, die unterschiedlichen Informationen für die hämodynamischen Variablen sinnvoll zu verknüpfen, ist es letztendlich erstrebenswert, regelbasiert diagnostische Aussagen zum Patientenzustand zu geben. In Kombination mit der Phasenraumprozedur diskutieren Morik, Imhoff, Brockhausen, et. al. (2000) einen solchen Ansatz. Dies wird in dieser Arbeit jedoch nicht weiter untersucht.

Gemäß (5.5) wird jede hämodynamische Zeitreihe $X_j(t)$, $j = 1, \dots, k$, zur Extraktion relevanter Signale in jedem Zeitfenster $\{t - w, \dots, t, \dots, t + w\}$ mit $w + 1 \leq t \leq T - w$ durch eine Gerade $X_j(t + s) \approx \mu_j(t) + \beta_j(t)s$, $s = -w, \dots, w$, approximiert. Lokal werden die einzelnen Zeitreihenkomponenten also durch Lage $\mu_j(t)$ und Steigungsparameter $\beta_j(t)$, $j = 1, \dots, k$, sowie ferner durch die lokale Varianz $\sigma_j^2(t)$ der Fehler charakterisiert. Dabei geben die Steigungsparameter $\beta(t)$ jeweils Aufschluss über die in dem betrachteten Zeitfenster vorhandenen Trends der Zeitreihen. Diese Information kann dazu genutzt werden, die neun Vitalparameter abschnittsweise gemäß ähnlicher struktureller Verläufe zusammenzufassen. Dabei werden hier zunächst nur Informationen über das Steigungsverhalten der Signale betrachtet. Zusätzlich können jedoch weitere charakterisierende Merkmale der Zeitreihen, wie spontane Niveauänderungen, mit berücksichtigt werden. In den folgenden Abschnitten wird angedeutet, wie die Vitalparameter auf Basis der gefundenen Strukturen lokal gruppiert werden können, um so medizinisch relevante Informationen weiter zu verdichten.

Eine Überprüfung der Gleichheit paarweiser Steigungen kann mittels statistischer Tests erfolgen. Zur Gruppierung von Zeitreihen mit ähnlichem Steigungsverhalten sind solche Tests jedoch weniger geeignet, da bei der großen Anzahl von Tests in jedem der fortschreitenden Zeitfenster die Problematik des multiplen Testens zu berücksichtigen ist.

Für eine Gruppierung verschiedener Objekte anhand einer Reihe beobachteter Merkmale bieten sich im allgemeinen Techniken der Clusteranalyse an. In jedem Zeitfenster entsprechen die Objekte hier den neun Vitalparametern, die anhand ihres lokalen Steigungsverhaltens zu gruppieren sind. Dieser Ansatz wird in Abschnitt 5.3.1 diskutiert.

Alternativ kann mit Hilfe medizinischen Wissens eine Beurteilung gefundener Strukturen hinsichtlich der klinischen Bedeutung vorgenommen werden, die zu einer Klassifikation der Variablen führt. Damit beschäftigt sich Abschnitt 5.3.2.

5.3.1 LOKALE CLUSTERANALYSE HÄMODYNAMISCHER VITALPARAMETER

Ziel ist es, die in den hämodynamischen Zeitreihen lokal vorhandenen Strukturen durch wenige Signale zu beschreiben. Zur lokalen Gruppierung der Vitalparameter mit Hilfe von Methoden aus der Clusteranalyse (Kaufman und Rousseeuw, 1990; Everitt, Landau und Lee, 2001) wird zunächst eine Bewertung von Ähnlichkeiten zwischen verschiedenen Objekten benötigt. Beobachtungssequenzen der hämodynamischen Zeitreihen sollen hier als ähnlich bezeichnet werden, wenn sie ein ähnliches Steigungsverhalten besitzen. Ähnlichkeiten bzw. Unterschiede im lokalen Steigungsverhalten der Zeitreihen können mittels eines geeigneten Abstandsmaßes gemessen werden.

Für die lokalen Steigungsparameter $\beta_j(t)$, $j = 1, \dots, k$, sind dabei unterschiedliche Wertebereiche zu berücksichtigen, da sich für die Vitalparameter mit unterschiedlichem Niveau der Umfang möglicher Merkmalsausprägungen und damit die Streuung der Beobachtungen um das jeweilige Niveau entsprechend ändert. Um eine Vergleichbarkeit der geschätzten Steigungen zu erreichen, ist eine geeignete Normalisierung der einzelnen Beobachtungssequenzen notwendig. Dabei ist eine gesonderte Standardisierung der Beobachtungen innerhalb jedes Datenfensters nicht sinnvoll, da unterschiedliche Steigungscharakteristika durch veränderliche Variabilitäten entlang der Zeitachse verschleiert werden können. Bei einer globalen Skalierung der Beobachtungen, beispielsweise mittels der Lage- und Skalenparameter aus 4.2.2, gemeinsam für die alle Datensätze können dagegen Steigungen aus verschiedenen Zeitfenstern miteinander verglichen werden. Da die TRM-KQ-Regressionsprozedur skalenäquivalent ist, genügt sogar eine Skalierung der geschätzten Steigungen aus den Originalbeobachtungen. Die lokale Struktur der Zeitreihen wird nun als ähnlich bezeichnet, wenn die geschätzten Steigungen für die so normalisierten Beobachtungen unabhängig von Lageverschiebungen in dem betrachteten Zeitfenster ähnlich sind.

Wenn an jedem von k Objekten m quantitative Merkmale in Form eines Datenvektors $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_m)^\top$ erhoben werden, können die k Objekte im \mathbb{R}^m durch die Punkte $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_k \in \mathbb{R}^m$ dargestellt werden. Die Distanz zwischen zwei Objekten lässt sich hierbei durch den euklidischen Abstand messen. Die paarweisen euklidischen Abstände zwischen zwei Objekten können in einer Distanzmatrix $D = \{d_{ij}\}$, $i, j = 1, \dots, k$, zusammengefasst werden, wobei $d_{ij} = \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|_2$. Im Fall von Abhängigkeiten unter den m Merkmalen sollte die Mahalanobisdistanz verwendet werden, die Korrelationen unter den Merkmalen berücksichtigt, d. h. $d_{ij} = (\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j)^\top \tilde{\Sigma}^{-1} (\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j)$, mit $\tilde{\Sigma}$ geeignet gewählt (Bock, 1974).

Bei den lokalen Steigungen $\beta_j(t)$, $j = 1, \dots, k$, handelt es sich um ein metrisches stetiges Merkmal. Zur Beschreibung der Struktur jedes Zeitreihenabschnitts können neben der aktuellen Steigungsschätzung zusätzlich die Steigungen aus den $m - 1$ unmittelbar zurückliegenden Zeitfenstern genutzt werden. Die Struktur von $X_j(s)$, $j = 1, \dots, k$, $s \in \{t - w, \dots, t, \dots, t + w\}$ wird damit durch den Merkmalsvektor $\hat{\beta}_j^{[m]}(t) = (\hat{\beta}_j(t - m), \dots, \hat{\beta}_j(t))^\top$

charakterisiert. So wird auch verhindert, dass sich die lokale Gruppierung der Vitalparameter bei Verschiebung des Zeitfensters aufgrund vereinzelt abweichender Steigungen zu schnell verändert.

Da die lokal geschätzten Steigungen $\hat{\beta}(t)$ für nah beieinander liegende Zeitpunkte aufgrund zeitlicher Abhängigkeiten bzw. Überschneidungen der Zeitfenster hoch positiv korreliert sind, sollte zur Bestimmung der paarweisen Distanzen auf Basis der Vektoren $\hat{\beta}_j^{[m]}(t)$, $j = 1, \dots, k$, $m > 1$, eine geeignete Mahalanobisdistanz genutzt werden. Für jeden Zeitpunkt t , $w + 1 \leq t \leq T - w$ wird eine Distanzmatrix $D(t) = \{d_{ij}(t)\}$ benötigt, wobei

$$d_{ij}(t) = (\hat{\beta}_i^{[m]}(t) - \hat{\beta}_j^{[m]}(t))^T \tilde{\Sigma}^{-1}(t) (\hat{\beta}_i^{[m]}(t) - \hat{\beta}_j^{[m]}(t)). \quad (5.11)$$

Eine Analyse der für das vorliegende Patientenkollektiv mittels der TRM-KQ-Prozedur geschätzten Steigungen zeigt, dass für Erwartungswert und Kovarianz des Merkmalsvektors die Annahmen $E[\beta_j^{[m]}(t)] = \mathbf{0}$ und $\text{Cov}[\beta_j^{[m]}(t)] = d^2(t)\mathbf{R}$ für alle j und t getroffen werden können. Dabei bezeichnet $d^2(t)$ die gemeinsame lokale Streuung der $\hat{\beta}_j^{[m]}(t)$, $j = 1, \dots, k$, um $\mathbf{0}$ und \mathbf{R} eine für alle Zeitfenster und Patientendatensätze fest gewählte Korrelationsmatrix. Wegen der vorherigen Standardisierung kann die Varianz $d^2(t)$ für alle Merkmale als gleich angesehen werden. Eine lokale Standardisierung der k Beobachtungen des Merkmalsvektors auf Varianz 1 durch eine lokale Schätzung von $d^2(t)$ ist hier nicht erwünscht, sondern nur die Berücksichtigung von Korrelationen zwischen den Merkmalen. Falls alle Zeitreihen in einem Zeitfenster konstant auf dem jeweiligen Niveau verlaufen, d. h. $\beta_j^{[m]}(t) \approx \mathbf{0}$ für alle j , soll folglich auch nur ein Cluster gefunden werden; ebenso sollen große Abweichungen der Steigungen der Zeitreihen voneinander zu einer größeren Anzahl an Clustern führen. Damit kann die Distanzmatrix für die Steigungen in jedem Zeitfenster durch (5.11) mit $\tilde{\Sigma}(t) = \mathbf{R}$ bestimmt werden. Wird \mathbf{R} aus den vorliegenden Daten geschätzt, ergibt sich für $m = 4$ beispielsweise die Matrix

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 0.91 & 0.83 & 0.74 & 0.64 \\ 0.83 & 0.91 & 0.83 & 0.74 \\ 0.74 & 0.83 & 0.91 & 0.83 \\ 0.64 & 0.74 & 0.83 & 0.91 \end{pmatrix}.$$

Der Bereich der Clusteranalyse umfasst eine große Bandbreite unterschiedlicher Techniken zur Findung von Gruppenstrukturen in einer Anzahl von Objekten, wie u. a. hierarchische Verfahren, die Optimierung vorgegebener Kriterien und modellbasierte Verfahren (vgl. Everitt, Landau und Leese, 2001). Das hier betrachtete Problem der fortlaufenden Gruppierung von nur neun Vitalparametern erfordert möglichst einfache Methoden, die keine Vorgabe hinsichtlich der Anzahl der Cluster benötigen. Bei einer agglomerativen hierarchischen Gruppierung der einzelnen Vitalparameter bzw. Gruppen von Vitalparametern kann der Anwender beispielsweise eine patientspezifische maximale Distanz wählen, durch die die Clusterteilung festlegt wird. Diese absolute Distanz gilt dann für alle Zeitfenster, so dass abhängig von den geschätzten Steigungen die Anzahl der Gruppen entlang der Zeitachse variiert. Für

die Wahl einer maximalen Distanz können bekannte Kriterien aus der Clusteranalyse eingesetzt werden (vgl. Everitt, Landau und Leese, 2001). Jedoch ist es dabei außerdem unbedingt notwendig, auch medizinisches Wissen einzubeziehen.

Für die gefundenen Gruppierungen kann schließlich ein repräsentatives Steigungsverhalten, wie der Median oder Mittelwert aus den betrachteten Merkmalen, angegeben werden. Die Information aus dem angepassten lokalen Regressionsmodell wird so für den Fall, dass weit weniger als neun Cluster gefunden werden, weiter verdichtet. Der Anwender bestimmt hierbei, wann die lokal gefundenen Strukturen in den Zeitreihenabschnitten ähnlich genug sind, um die Vitalparameter gemäß ihres Verlaufs in Gruppen zusammenzufassen.

Ein Problem bei diesem Ansatz liegt in der Normalisierung der geschätzten Steigungsparameter. Da der Streubereich der Vitalparameter für die einzelnen Patienten mit Beginn der Datenaufzeichnung nicht bekannt ist, werden zur Standardisierung der Steigungen Skalenparameter genutzt, die aus dem gesamten vorliegenden Patientenkollektiv geschätzt wurden. Eine Untersuchung der individuellen Streuung der Vitalparameter für die einzelnen Patienten zeigt jedoch, dass das Verhältnis der robust geschätzten MADs für die verschiedenen Variablen unter den Patienten stark variiert. Für einzelne Datensätze kann dies einen erheblichen – teils ungünstigen – Einfluss auf die anhand des Steigungsverhaltens gefundenen Gruppierungen haben.

Außerdem wird bei der hier vorgestellten Gruppierung der Variablen fast ausschließlich das Steigungsverhalten betrachtet, ohne dabei das aktuelle Niveau der Variablen mit einzubeziehen. Der im nächsten Abschnitt diskutierte Ansatz bewertet sowohl das aktuelle Niveau als auch das Steigungsverhalten der Vitalparameter und lenkt so die Aufmerksamkeit auf klinisch relevante Strukturen in den Daten.

5.3.2 GRUPPIERUNG HÄMODYNAMISCHER VITALPARAMETER ANHAND KLINISCHER BEWERTUNGEN

In diesem Abschnitt wird eine Prozedur zur klinischen Bewertung der in einem Zeitreihenabschnitt vorhandenen Strukturen vorgeschlagen. Lokal können in jedem Zeitfenster die extrahierten Informationen über Lage und Steigungsverhalten, d. h. $\tilde{\mu}_j(t)$ und $\tilde{\beta}_j(t)$, $j = 1, \dots, k$, zur Beurteilung der aktuellen klinischen Relevanz der Variablen $X_j(t)$ genutzt werden.

Dabei findet keine Dimensionsreduktion im klassischen Sinne statt, d. h. die Anzahl der überwachten Variablen wird nicht auf eine geringere Anzahl latenter Faktoren oder Linearkombinationen reduziert. Es gelingt jedoch, lokal jeweils diejenigen Variablen, die in dem betrachteten Zeitfenster von besonderem Interesse sind, zu finden und herauszustellen. Die Aufmerksamkeit der medizinischen Pflegekräfte wird so besonders auf einige klinisch relevante strukturelle Veränderungen gelenkt. Der vorgestellte Ansatz kann dabei für den Einsatz in einem Alarmsystem zur frühzeitigen Erkennung alarmrelevanter Zustände weiterentwickelt werden. In einem gewissen Sinne findet dabei bereits ein erster Schritt in Richtung einer Abstraktion der klinischen Zustände statt.

Bei einer Analyse des Steigungsverhaltens der Zeitreihen im Intensivmonitoring ist es wichtig, vorhandene Trends immer relativ zu dem aktuellen Niveau der Zeitreihenbeobachtungen zu betrachten. So kann ein Aufwärtstrend der Beobachtungen eines Vitalparameters zu einem kritischen Zustand des Patienten führen, wenn sich die Variable bereits auf einem sehr hohen Niveau befindet. Sofern das Niveau der Variablen eher Werte am unteren Rand der erlaubten Ausprägungen für diese Variable annimmt, kann ein Aufwärtstrend andererseits erwünscht sein.

Wie bei den bisher eingesetzten Schwellwertalarmen kann die medizinische Pflegekraft für jeden Patienten und jeden der k Vitalparameter $X_j(\cdot)$, $j = 1, \dots, k$, kritische Grenzen l_j und u_j festlegen, die zur Erhaltung eines stabilen Zustands des Patienten nicht unter- bzw. überschritten werden sollten. Auf Basis der lokalen Schätzung von Lage und Steigung der einzelnen Zeitreihen kann für jeden Vitalparameter die Zeit bestimmt werden, die benötigt wird, bis eine der Grenzen l_j und u_j bei einer Fortführung des aktuellen Trends überschritten wird. Mit Hilfe medizinischen Wissens können diese Zeiten bewertet und in verschiedene Gruppen eingeteilt werden. Für jede Variable ist die klinische Bedeutung der gefundenen Strukturen festzulegen. Beispielsweise könnte eine Einteilung in verschiedene Kategorien erfolgen, die klinische Relevanz und die Richtung gefundener Trends berücksichtigen. Eine Möglichkeit ist eine Bewertung mit Hilfe von sieben Kategorien, die für die Komponente $X_j(\cdot)$, $j = 1, \dots, k$, jeweils besagen, dass

- K1 sich der überwachte Vitalparameter eines Patienten oberhalb des eingestellten Schwellwerts u_j befindet,
- K2 innerhalb einer Zeit t_j^* mit einem alarmrelevanten Zustand in Form einer Überschreitung des eingestellten Schwellwerts u_j zu rechnen ist,
- K3 es einen langsamen Aufwärtstrend gibt, der langfristig wahrscheinlich zu einem alarmrelevanten Zustand in Form einer Überschreitung des eingestellten Schwellwerts u_j führt,
- K4 der Patient sich in einem stabilen Zustand befindet,
- K5 es einen langsamen Abwärtstrend gibt, der langfristig wahrscheinlich zu einem alarmrelevanten Zustand in Form einer Unterschreitung des eingestellten Schwellwerts l_j führt,
- K6 innerhalb einer Zeit t_j^{**} mit einem alarmrelevanten Zustand in Form einer Unterschreitung des eingestellten Schwellwerts l_j zu rechnen ist und
- K7 sich der überwachte Vitalparameter eines Patienten unterhalb des eingestellten Schwellwerts l_j befindet.

Sofern die Schwellwerte für einen Patienten sinnvoll eingestellt sind, erfordern die Kategorien K1 und K7 in der Regel jeweils, dass sofort adäquate therapeutischer Maßnahmen ergriffen werden. Die Kategorien K2 und K6 können als Frühwarnung angesehen werden, die als Reaktion einer diagnostischen Entscheidung der medizinischen Pflegekraft bedürfen. Eine Bewertung in eine der Kategorien K3 oder K5 sollte die Wachsamkeit entsprechend erhöhen und zu einer aufmerksamen Beobachtung des Patienten führen.

Exemplarisch wird hier eine Bewertung der Beobachtungen für einen Patienten anhand von sieben Kategorien vorgenommen und in Abbildung 5.9 dargestellt. Dabei werden für die neun hämodynamischen Variablen die von einem erfahrenen Intensivmediziner genannten Schwellwerte aus Tabelle 5.6 genutzt.

Variable	APD	APM	APS	CVP	HR	PAPD	PAPM	PAPS	Puls
j	1	2	3	4	5	6	7	8	9
l_j	40	60	100	5	60	5	14	18	60
u_j	100	120	200	25	130	35	40	55	130

Tabelle 5.6: Schwellwerte für die hämodynamischen Vitalparameter des Patienten aus Abbildung 5.9

Der Zustand für Variable X_j , $j = 1, \dots, 9$, wird mit den Kategorien K2 (K6) bewertet, falls von dem aktuellen Niveau ausgehend und bei Fortführung des aktuellen Trends die Grenze l_j (u_j) innerhalb von $t_j^* = t_j^{**} = 10$ Minuten über- bzw. unterschritten wird. Eine Bewertung mittels K3 bzw. K5 erfolgt, sofern eine solche Über- oder Unterschreitung der entsprechenden Schwellwerte innerhalb von 30 Minuten erwartet wird.

Abbildung 5.9 zeigt im Teil (a) einen Ausschnitt der beobachteten hämodynamischen Zeitreihen eines Patienten zusammen mit den zugehörigen extrahierten Signalen. In Teil (b) wird kontinuierlich für jede Variable eine klinische Bewertung der gefundenen Strukturen angezeigt. Außerdem sind in Teil (c) die zur Dauerinfusion verwendeten Medikamente für den Patienten dargestellt.

Für den Zeitraum zwischen 15 und 16 Uhr sind die systolischen Blutdrücke jeweils derart erhöht, dass die oberen Schwellwerte überschritten werden, während die übrigen Blutdrücke innerhalb der Schwellwerte liegen. In diesem Zeitraum ist die Amplitude der Druckpulskurve vergrößert. Anschließend befindet sich der Patient in einem stabilen Zustand. Etwa um 17 : 30 Uhr steigen der mittlere und der systolische arterielle Blutdruck so an, dass über die klinischen Bewertungen eine Frühwarnung gegeben wird. Der systolische Mitteldruck überschreitet schließlich den oberen Schwellwert. Zum Ausgleich des Blutdruckanstiegs ist ab ca. 18 Uhr ein Abfall von Herzfrequenz und Puls zu beobachten, der allerdings nicht zu einem alarmrelevanten Zustand führt. Ab etwa 21 Uhr erfolgt ein starker Anstieg von Herzfrequenz und Puls, bei dem bereits kurz nach der ersten Frühwarnung die Alarmgrenzen überschritten werden. Die verstärkte Herztätigkeit geht mit einem kontinuierlichen Abfall der arteriellen Blutdrücke einher, der sich in den Bewertungen der Verläufe der Zeitreihen

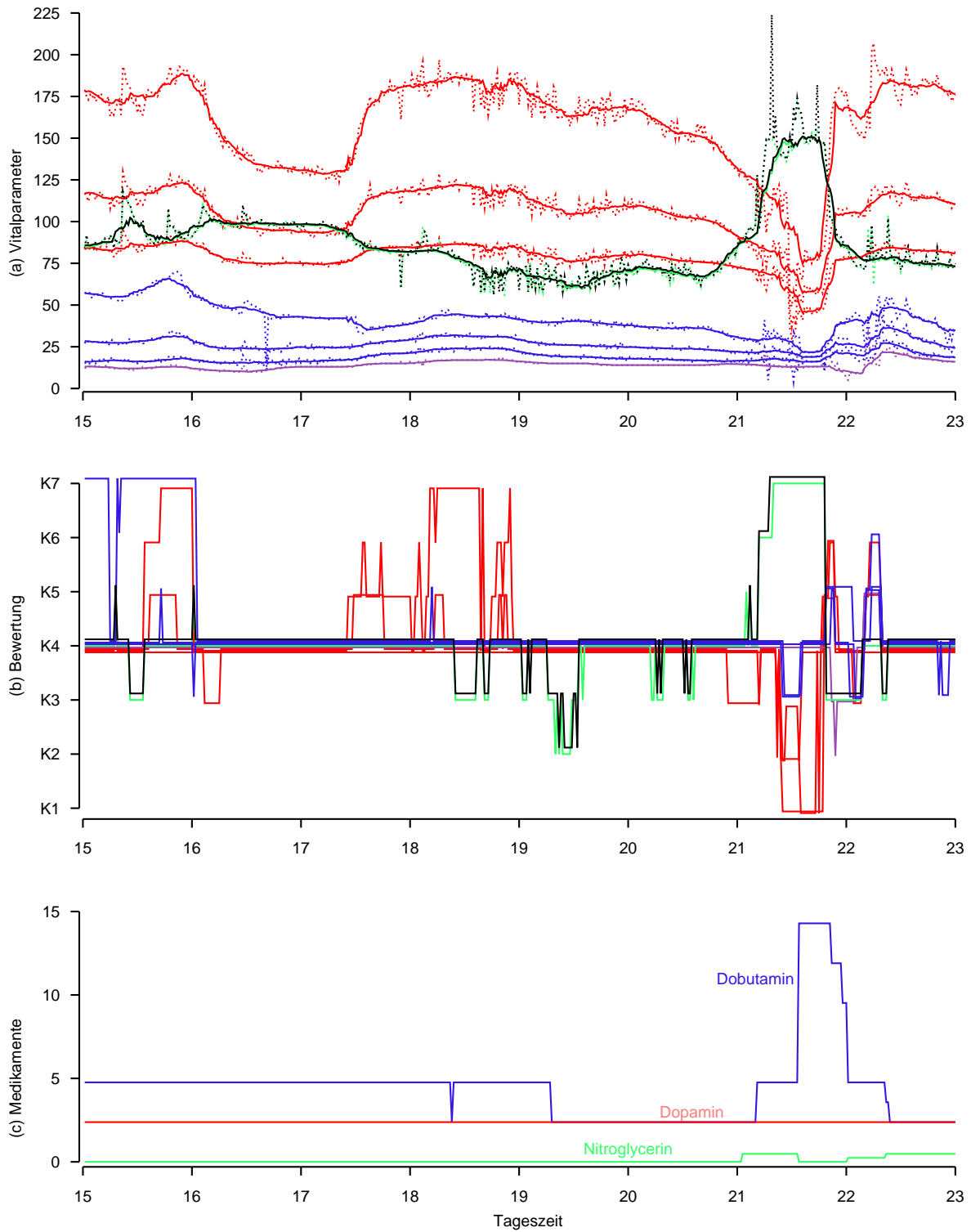


Abbildung 5.9: (a) Ausschnitt aus hämodynamischer Zeitreihe (gepunktet) mit extrahierten Signalen, (b) (leicht verschobene) Bewertungen gemäß sieben Kategorien; arterielle Drücke (rot), Herzfrequenz (schwarz), Puls (grün), pulmonalarterielle Drücke (blau) und zentralvenöser Blutdruck (violet) und (c) kontinuierliche Medikamentengaben

frühzeitig ankündigt. Gegen 22 Uhr sind bei den intrathorakalen Blutdrücken stärkere Lageänderungen festzustellen. Während der kritischen Phase zwischen 21 und 22 Uhr erfolgen gleichzeitig klinische Interventionen in Form von Änderungen der medikamentösen Therapie.

Bei der hier beispielhaft genannten Einteilung beruht die Bewertung der klinischen Relevanz, vergleichbar zu den derzeit genutzten Schwellwertalarmen, auf einer univariaten Betrachtung der einzelnen Variablen. Wenn eine Beurteilung der klinisch relevanten Strukturen in den hämodynamischen Zeitreihen für jeden Vitalparameter erfolgt, können jeweils Gruppen von Variablen mit der gleichen Bewertung gebildet werden. Somit wird angezeigt, welche Variablen bei der Überwachung des Zustands des Patienten aktuell die größte klinische Relevanz haben. Außerdem sind anhand der einfachen Bewertungen, die die Richtung wesentlicher Trends angeben, Interaktionen zwischen den Vitalparametern ablesbar. Die Bewertungen könnten zusätzlich verbessert werden, indem die lokalen Schätzungen der Variabilität jeweils berücksichtigt werden. So sind in Abbildung 5.9 beispielsweise die geschätzten lokalen Steigungen zwischen 18 und 20 Uhr aufgrund der erhöhten Streuung der Residuen recht variabel.

Letztlich ist eine echte multivariate Überwachung der Vitalparameter angestrebt. Mit Hilfe medizinischen Wissens über mögliche Interaktionen zwischen verschiedenen hämodynamischen Variablen und resultierende Konsequenzen für den Zustand des Patienten ist es hierfür notwendig, klare Regeln zu formulieren. Diese Regeln sollten schließlich bei einer multivariaten klinischen Bewertung der Zustände mit berücksichtigt werden. Die Verknüpfung dieser Informationen kann somit Hinweise auf die Art der ablaufenden physiologischen Vorgänge und eine benötigte adäquate Therapie liefern. Dieses langfristig angestrebte Ziel ist weiterhin Gegenstand der Forschung.

6 ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

In der vorliegenden Arbeit wurde mit Hilfe multivariater statistischer Verfahren untersucht, wie im Online-Monitoring in der Intensivmedizin klinisch relevante Information aus Beobachtungen des Herz-Kreislaufsystems extrahiert werden kann. Aufgrund der hohen Anzahl an aufgezeichneten Vitalparametern und teilweise starken Abhängigkeiten unter diesen Variablen ist es für den Mediziner oft schwierig, die in den Daten enthaltene Information vollständig zu erfassen und mit vorhandenem medizinischen Wissen abzugleichen. Ein Ziel ist dabei die Reduktion der erhobenen Daten auf wesentliche Informationen.

In dieser Arbeit wurden zunächst Verfahren zur Dimensionsreduktion für multivariate Zeitreihen herangezogen und hinsichtlich einer Anwendung im Intensivmonitoring untersucht. Neben modellbasierten Techniken der statischen und dynamischen Faktoranalyse gehören hierzu statische und dynamische Verfahren der Hauptkomponentenanalyse.

Wie sich zeigt, lassen sich die intensivmedizinischen Zeitreihen aufgrund von ausgeprägten strukturellen Mustern, wie Trends, spontanen Niveauänderungen und Ausreißern, kaum global modellieren. Für die Überwachung hochkomplexer physiologischer Vorgänge in Echtzeit werden jedoch möglichst einfache Methoden benötigt, die interpretierbare Rückschlüsse auf den Zustand der Patienten ermöglichen. Faktoranalytische Ansätze sind hierzu kaum geeignet, da eine vernünftige Modellanpassung an die Daten nur lokal möglich ist und dabei meist sehr aufwendig ist.

Bisher basieren viele klinische Entscheidungen auf wenigen Vitalparametern, die medizinische Pflegekräfte subjektiv aufgrund klinischer Erfahrung auswählen. Eine gemeinsame statische Hauptkomponentenanalyse der vorliegenden hämodynamischen Zeitreihen zeigt, dass eine Betrachtung weniger Linearkombinationen der Variablen in der Regel mehr Informationen im Sinne erklärter Variabilität aus den Daten erfasst als eine subjektive Variablenselektion. Gleichzeitig sind diese Linearkombinationen nach Rotation für den Mediziner leicht zu interpretieren. Ein Nachteil ist, dass diese Hauptkomponenten nicht notwendigerweise über den gesamten Zeitverlauf hinweg sämtliche wesentliche Information über den Zustand des Patienten enthalten. Aufgrund von Änderungen in den Abhängigkeiten zwischen den Variablen können somit lokal abweichende, klinisch relevante Strukturen möglicherweise nicht entdeckt werden. Auch lokale oder dynamische Hauptkomponentenanalysen der intensivmedizinischen Daten stellen hierbei keine völlig zufriedenstellende Lösung dar. Dies ist vor allem durch das klinische Interesse an strukturellen Lageänderungen zu begründen. Eine Hauptkomponentenanalyse geht jedoch von einem festen Erwartungswert der Beobachtungen aus, mit dem Ziel, die Kovarianzstruktur zu analysieren.

Einen vielversprechenden Ansatz zur Informationsextraktion aus multivariaten hämodynamischen Zeitreihen bieten multivariate Signalextraktionsverfahren. In einem ersten Schritt werden dabei glatte Signale, die die klinisch relevanten Strukturänderungen der Zeitreihen enthalten, von Rauschen und Artefakten getrennt. Damit werden die aufgezeichneten Beobachtungen auf die wesentlichen Informationen reduziert.

In dieser Arbeit wurden für die lokale Signalextraktion in Echtzeit verschiedene robuste multivariate Regressionsverfahren herangezogen und verglichen. Eine Anwendung von in der Literatur bekannten, affin äquivarianten und hochrobusten Regressionstechniken auf die verhältnismäßig kleinen Stichproben im Online-Monitoring ist aufgrund der diskreten Messung der Vitalparameter nicht empfehlenswert. Daher wurde in Kapitel 5.2.4 ein Regressionsverfahren vorgeschlagen, das für die vorliegenden Daten eine praktikable Lösung darstellt. Bei der TRM-KQ-Prozedur wird zur Extraktion relevanter Signale in jedem Zeitfenster eine robuste univariate Anfangsschätzung gefolgt von multivariatem Trimmen und klassischer multivariater KQ-Regression durchgeführt. Die extrahierten Signale geben kontinuierlich Aufschluss über das lokale Niveau der betrachteten Variablen. Diese Information muss der medizinischen Pflegekraft, wenn gewünscht, zur Verfügung stehen und kann nicht reduziert werden. Allerdings lassen sich Informationen über die in den Zeitreihen lokal gefundenen Strukturen weiter zusammenfassen. Dazu wurden in dieser Arbeit verschiedene Ansätze kurz angedeutet. Diese sind Gegenstand zukünftiger Forschungen.

Insbesondere von medizinischer Seite ist das Ziel eine weitestgehende Abstraktion des klinischen Zustands. Dazu sind weitere Informationen über physiologische Vorgänge notwendig, aus denen Regeln abgeleitet werden können. Langfristig ist schließlich die Entwicklung eines multivariaten Alarmsystems zur Unterstützung klinischer Entscheidungen vorgesehen.

Im Rahmen einer klinischen Studie zur Validierung der bereits entwickelten univariaten Verfahren im Online-Monitoring werden am Klinikum Regensburg zur Zeit intensivmedizinische Variablen mit einer höheren Frequenz (bis zu einer Beobachtung pro Sekunde) erhoben. Der entstehende Datensatz wird neben den Monitordaten zusätzlich Alarmlisten auf Basis der Schwellwerte, Informationen über die gewählten Schwellwerte und Annotationen hinsichtlich klinisch durchgeführter Maßnahmen und der Relevanz der Alarmlisten enthalten. Diese annotierten Daten können, neben der Validierung entwickelter univariater Methoden, zur Weiterentwicklung multivariater Verfahren der Prozesskontrolle im klinischen Kontext genutzt werden. Mit Hilfe der Informationen über die Relevanz der Schwellwertalarmlisten und den Annotationen kann aus den Daten Wissen über die klinische Relevanz physiologischer Vorgänge, die eine mehrere Vitalparameter involvieren, abgeleitet werden. Dabei interessiert insbesondere, welche Strukturen in den verschiedenen Variablen multivariat wie verknüpft werden müssen, um kontinuierlich klinische Aussagen hinsichtlich des Patientenzustands treffen zu können. Wünschenswert ist schließlich eine frühzeitige Erkennung relevanter physiologischer Änderungen, auf deren Basis Empfehlungen für angemessene therapeutische Interventionen gegeben werden können.

ANHANG

ANHANG A: DER KALMAN-FILTER

Der Kalman-Filter ist ein rekursives Verfahren zur Berechnung des optimalen linearen Schätzers eines Zustandvektors $\mathbf{Z}(t)$ in einem Zustandsraummodell im Sinne des kleinsten mittleren quadratischen Fehlers auf Basis beobachtbarer Zufallsvektoren $\mathbf{X}(1), \dots, \mathbf{X}(T)$. Dabei werden die Matrizen \mathbf{A} und Φ als bekannt vorausgesetzt.

Während des eigentlichen Filterns ist das Ziel, den bedingten Erwartungswert von $\mathbf{Z}(t)$ gegeben die Beobachtungen bis zum Zeitpunkt t , d.h. $\mathbf{Z}(t|t) = \mathbb{E}[\mathbf{Z}(t)|\mathbf{X}(1), \dots, \mathbf{X}(t)]$, auszuwerten. In einer Rückwärtsrekursion, dem Glättungsschritt, wird schließlich die bedingte Erwartung gegeben die gesamte Information, d.h. $\mathbf{Z}(t|T) = \mathbb{E}[\mathbf{Z}(t)|\mathbf{X}(1), \dots, \mathbf{X}(T)]$, gefunden.

Der Kalman-Filter-Algorithmus ist durch die folgenden Vorhersage- und Filtergleichungen definiert, wobei für $t_1, t_2, t^* = 1, \dots, T$

$$\mathbf{Z}(t_1|t^*) = \mathbb{E}[\mathbf{Z}(t_1)|\mathbf{X}(1), \dots, \mathbf{X}(t^*)] \quad \text{und} \quad (\text{A.1})$$

$$\Omega(t_1, t_2|t^*) = \mathbb{E}[(\mathbf{Z}(t_1) - \mathbf{Z}(t_1|t^*))(\mathbf{Z}(t_2) - \mathbf{Z}(t_2|t^*))'] \quad (\text{A.2})$$

bezeichnen. Mit den Initialisierungen $\mathbf{Z}(0|0) = \boldsymbol{\mu}_0$ und $\Omega(0|0) = \Omega_0$ gilt für $t = 1, \dots, T$

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}(t|t-1) &= \Phi \mathbf{Z}(t-1|t-1) \quad \text{und} \\ \Omega(t|t-1) &= \Phi \Omega(t-1|t-1) \Phi' + \Gamma_{\eta}. \end{aligned}$$

Sobald eine Beobachtung zum Zeitpunkt t selbst zur Verfügung steht, kann der Schätzer auf Basis dieser zusätzlichen Information aktualisiert werden zu

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}(t|t) &= \mathbf{Z}(t|t-1) + \mathbf{K}_t(\mathbf{X}(t) - \mathbf{A}\mathbf{Z}(t|t-1)) \quad \text{und} \\ \Omega(t|t) &= \Omega(t|t-1) - \mathbf{K}_t \mathbf{A} \Omega(t|t-1), \end{aligned}$$

wobei der Kalman-Gain \mathbf{K}_t definiert ist als

$$\mathbf{K}_t = \Omega(t|t-1) \mathbf{A}' [\mathbf{A} \Omega(t|t-1) \mathbf{A}' + \Gamma_{\epsilon}]^{-1}.$$

Für die Glättung existieren verschiedene Algorithmen (LIT). In dieser Arbeit wird der Fixed-Intervall-Glätter vorgestellt und verwendet. Die Gleichungen lauten für $t = T, T-1, \dots, 1$

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}(t-1|T) &= \mathbf{Z}(t-1|t-1) + \mathbf{G}_{t-1}(\mathbf{Z}(t|T) - \mathbf{Z}(t|t-1)) \quad \text{und} \\ \Omega(t-1|T) &= \Omega(t-1|t-1) + \mathbf{G}_{t-1}(\Omega(t|T) - \Omega(t|t-1)) \mathbf{G}_{t-1}', \end{aligned}$$

wobei

$$\mathbf{G}_{t-1} = \mathbf{\Omega}(t-1|t-1)\mathbf{\Phi}'\mathbf{\Omega}(t|t-1)^{-1}.$$

Für den M-Schritt im EM-Algorithmus werden zusätzlich die Kovarianzmatrizen $\mathbf{\Omega}(t, t-1|T)$ zum Zeitlag 1 benötigt, die im Glättungsschritt mitberechnet werden können. Dabei gilt mit

$$\mathbf{\Omega}(T, T-1|T) = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_t\mathbf{A})\mathbf{\Phi}\mathbf{\Omega}(T-1|T-1)$$

für $t = T, T-1, \dots, 2$

$$\mathbf{\Omega}(t-1, t-2|T) = \mathbf{\Omega}(t-1|t-1)\mathbf{G}'_{t-2} + \mathbf{G}_{t-1}(\mathbf{\Omega}(t, t-1|T) - \mathbf{\Phi}\mathbf{\Omega}(t-1|t-1))\mathbf{G}'_{t-2}.$$

Für eine Herleitung dieser Gleichungen und der zugehörigen Verteilungstheorie sei an dieser Stelle auf die Literatur (Shumway und Stoffer, 2000; Watson und Engle, 1983) verwiesen.

ANHANG B:

INTERPRETATION DES ABSTANDS ZWEIER UNTERRÄUME

In Kapitel 4 wurden mit Hilfe der Metrik aus (2.3) wiederholt Abstände zwischen dreidimensionalen Unterräumen im \mathbb{R}^9 berechnet. Der Wertebereich für diese Abstände ist hier das Intervall $[0, \sqrt{3}]$, wobei 0 für identische Unterräume steht und $\sqrt{3}$ für Unterräume, deren Basisvektoren orthogonal sind.

Die Interpretation der Werte, die diese Metrik liefert, ist jedoch nicht einfach. Dies wird hier anhand von zwei Beispielen betrachtet.

Im ersten Beispiel werden zwei identische dreidimensionale Unterräume \mathcal{G}_A und $\mathcal{G}_B \in \mathbb{R}^k$ betrachtet, wobei die Spaltenvektoren der Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{B} identisch seien. Sukzessive werden die Basisvektoren von \mathcal{G}_B jeweils um 1° in den zu \mathcal{G}_A orthogonalen Unterraum von den Spaltenvektoren von \mathbf{A} fortgedreht, bis alle Basisvektoren des resultierenden Unterrums \mathcal{G}_{B^*} zu denen von \mathcal{G}_A orthogonal sind. Für jeden der nacheinander betrachteten Unterräume $\mathcal{G}_{B^{(i)}}$ wird mit Hilfe der Metrik aus (2.3) der Abstand zu \mathcal{G}_A bestimmt. Diese Abstände sind in Abbildung B.1 dargestellt. Die Werte der Metrik steigen hier mit Zunahme der Winkelgröße zwischen den Basisvektoren der Unterräume monoton gemäß der Funktion $\sqrt{1 - \cos^2(x)}$, $x \in [0, \pi/2]$.

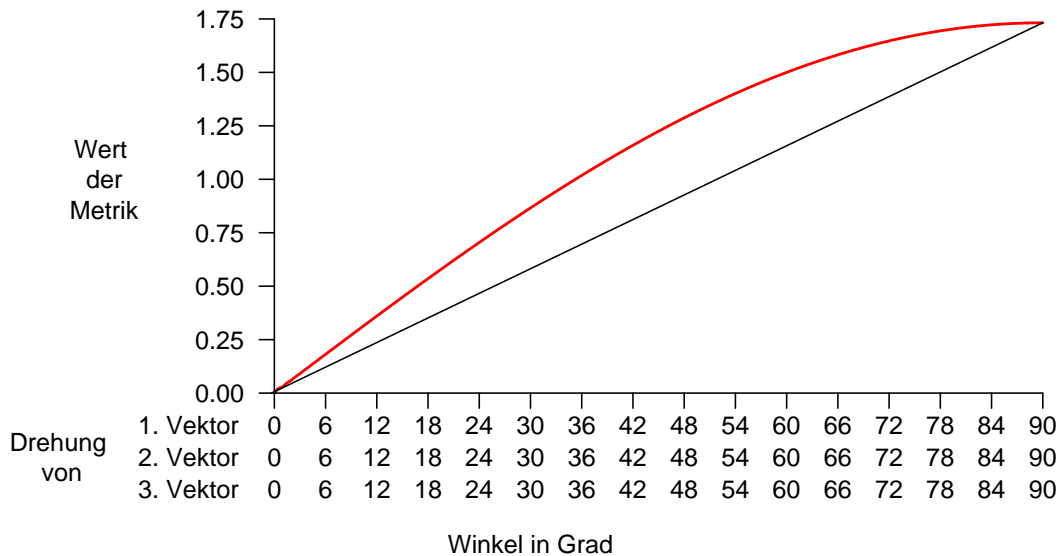


Abbildung B.1: Abstand zweier dreidimensionaler Unterräume im \mathbb{R}^9 bei bestimmter Winkelgröße zwischen den zugehörigen Basisvektoren

Ausgangspunkt im zweiten Beispiel sind wieder zwei identische dreidimensionale Unterräume \mathcal{G}_A und $\mathcal{G}_B \in \mathbb{R}^k$. Hier wird zuerst der erste Spaltenvektor von \mathbf{B} sukzessive um 1° in den zu \mathcal{G}_A orthogonalen Unterraum herausgedreht, bis ein Winkel von 90° erreicht ist. Die anderen beiden Basisvektoren bleiben konstant. Dabei haben die Unterräume \mathcal{G}_A und $\mathcal{G}_{B^{(i)}}$ jeweils den vom zweiten und dritten Spaltenvektor von \mathbf{B} aufgespannten Unterraum gemeinsam. In weiteren Schritten werden zusätzlich zunächst der zweite und schließlich der dritte Spaltenvektor von \mathbf{B} sukzessive in den komplementären Unterraum im \mathbb{R}^9 gedreht, bis alle Basisvektoren von \mathcal{G}_{B^*} und \mathcal{G}_A orthogonal sind. Abbildung B.2 zeigt die zugehörigen Werte der Abstände zwischen den jeweiligen Unterräumen.

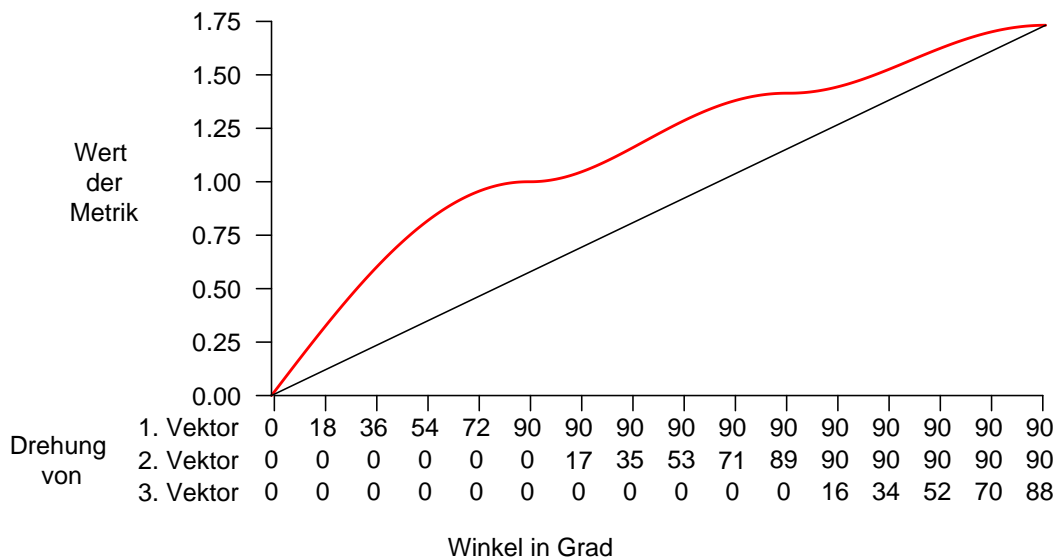


Abbildung B.2: Abstand zweier dreidimensionaler Unterräume im \mathbb{R}^9 bei bestimmter Winkelgröße zwischen den zugehörigen Basisvektoren

Der Einfluss einer Drehung bis zu einem Winkel von 45° führt jeweils zu größeren Änderungen in den Werten der Metrik als Winkeländerungen zwischen 45° und 90° . Ein Vergleich der Kurven aus den beiden Beispielen zeigt, dass die Änderung in den Werten der Metrik außerdem stark von den verschiedenen Winkeländerungen zwischen allen Basisvektoren abhängt. Allein vom Wert der Metrik kann also nicht auf die Winkel zwischen den Unterräumen zurückgeschlossen werden. Ein Wert von 0.5 für den Abstand von zwei dreidimensionalen Unterräumen im \mathbb{R}^9 kann beispielsweise bedeuten, dass die Winkel zwischen allen drei Basisvektoren jeweils 17° betragen, aber auch, dass zwei Basisvektoren identisch sind und der Winkel zwischen den übrigen Basisvektoren 30° beträgt.

Daher kann es hilfreich sein, zur Beurteilung der Abweichung zusätzlich die sukzessive kleinsten Winkel zwischen den Basisvektoren der Unterräume zu betrachten.

ANHANG C:

WAHL DER OPTIMALEN TEILSTICHPROBE BEI RAUSCHEN

Bei recht diskret gemessenen Beobachtungen und einer geringen Variabilität – eine Situation, die lokal auf die Messung hämodynamischer Vitalparameter zutrifft – können sehr viele Beobachtungen den gleichen Wert annehmen. Solche Inlier können bei einer hochrobusten Schätzung der Kovarianzmatrix zu einer singulären Matrix führen. In Kapitel 5.2.3 wurde angesprochen, dass durch die Addition eines geringfügigen Rauschens auf die Beobachtungen eine aufgrund von Inliern singuläre Schätzung einer Kovarianzmatrix vermieden werden kann. Dieses zufällige Rauschen hat jedoch einen starken Einfluss auf die Wahl der optimalen Teilstichprobe bei der Bestimmung des MCD-Schätzers.

Dazu wird im folgenden ein Zufallsvektor $(X, Y, Z)^T$ betrachtet. Die Zufallsvariablen X und Y seien o. B. d. A. unabhängig $\mathcal{N}(0, 1)$ -verteilt, wobei die Variablen Y und Z durch X erklärt werden sollen. Es werden Stichproben vom Umfang $N = 21$ betrachtet, die so ausfallen, dass für alle Beobachtungen der Zufallsvariablen Z konstant die Werte $z_1 = \dots = z_{21} = 0$, o. B. d. A. angenommen werden.

Bei einer sorgfältigen robusten MCD-Regression wird der Rangdefekt der Datenmatrix erkannt. Es werden nur die Koeffizienten der Regression von Y auf die erklärende Variable X im \mathbb{R}^2 geschätzt, die Koeffizienten der Regression von Z auf die erklärende Variable X sind dabei jeweils Null. Alternativ ist eine robuste Schätzung der Regressionsparameter im \mathbb{R}^3 möglich, wenn auf die Beobachtungen z_1, \dots, z_{21} ein geringfügiges Rauschen addiert wird. In den nachfolgenden Beispielen basierte die robuste MCD-Schätzung auf den optimalen Teilstichproben vom Umfang 13, d. h. , dass bei der Schätzung acht Beobachtungen nicht berücksichtigt werden.

In den Abbildungen C.1, C.2 und C.3 sind jeweils die Beobachtungen der Zufallsvariablen X und Y dargestellt. Die schwarz eingefärbten Punkte sind diejenigen Beobachtungen, die in die MCD-Schätzung einfließen.

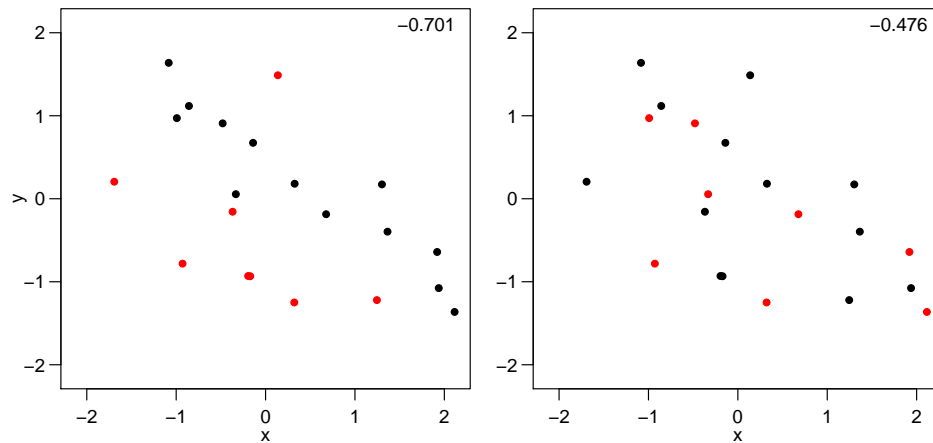


Abbildung C.1: Ausgewählte Teilstichproben bei der MCD-Schätzung ohne und mit Rauschen in dritter Dimension

Dabei beruht die Schätzung in den linksseitigen Abbildungen auf der Schätzung im \mathbb{R}^2 , d. h. nur die echte Information aus der Beobachtungen für X und Y wird verwendet. Für die rechtsseitigen Abbildungen wurde zu den Beobachtungen für Z ein auf dem Intervall $[-0.1, 0.1]$ gleichverteiltes Rauschen addiert. Dieses wurde bei der Schätzung im \mathbb{R}^3 einbezogen, jedoch nicht graphisch dargestellt. Es ist zu erkennen, dass das künstliche Rauschen die Wahl der optimalen Teilstichprobe stark beeinflusst. Auch bei der Schätzung des Steigungsparameters (jeweils in den rechten oberen Ecken mit angegeben) macht sich das Rauschen bemerkbar.

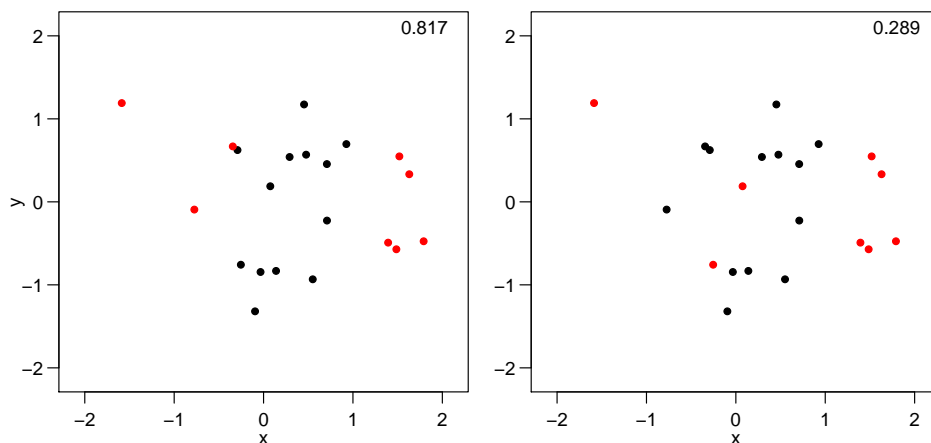


Abbildung C.2: Ausgewählte Teilstichproben bei der MCD-Schätzung ohne und mit Rauschen in dritter Dimension

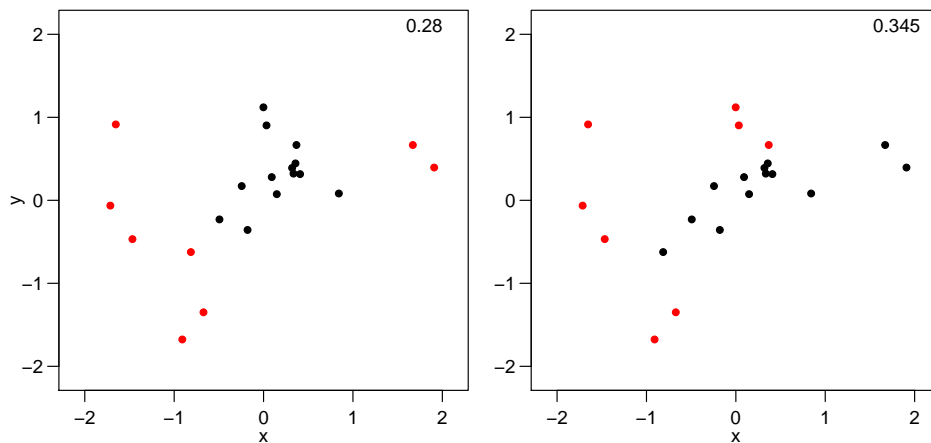


Abbildung C.3: Ausgewählte Teilstichproben bei der MCD-Schätzung ohne und mit Rauschen in dritter Dimension

ANHANG D: VERGLEICH ROBUSTER KOVARIANZSCHÄTZER

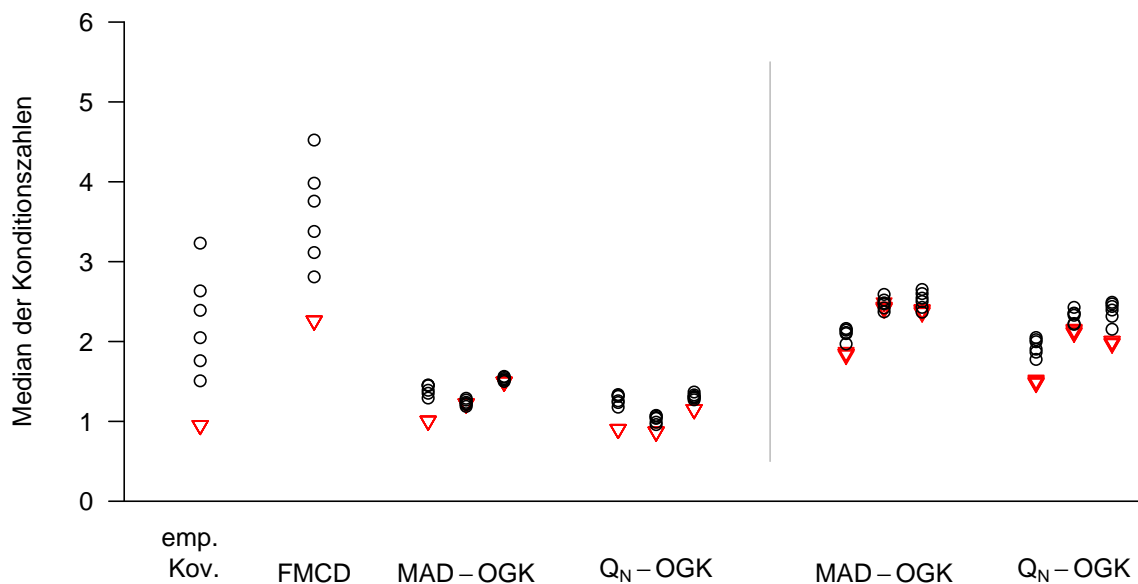


Abbildung D.1: Güte der Kovarianzschätzungen bei verschiedenen Normalverteilungen ohne (rot) und mit (schwarz) Kontamination bei einem Stichprobenumfang von $N = 31$ (links) und Güte der OGK-Schätzungen unter zufälligen Transformationen (rechts)

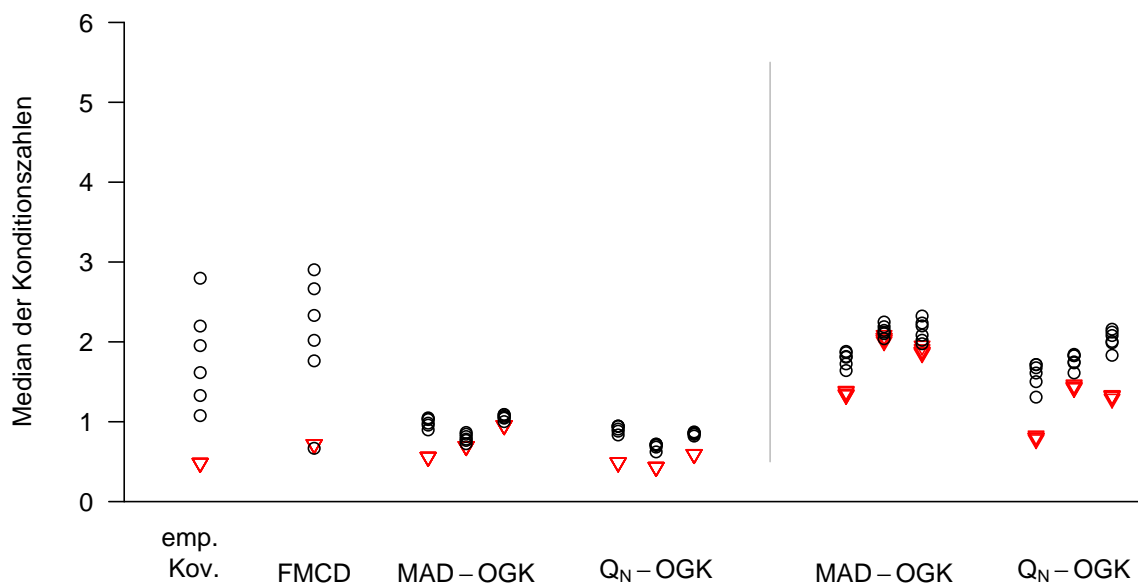


Abbildung D.2: Güte der Kovarianzschätzungen bei verschiedenen Normalverteilungen ohne (rot) und mit (schwarz) Kontamination bei einem Stichprobenumfang von $N = 100$ (links) und Güte der OGK-Schätzungen unter zufälligen Transformationen (rechts)

LITERATUR

- ABRAHAM, B., CHUANG, A. (1989): Outlier detection and time series modeling, *Technometrics*, **31**, 241–248.
- AGUILAR, O., HUERTA, G., PRADO, R., WEST, M. (1998): Bayesian inference on latent structure in time series, *Bayesian Statistics*, **6**, 1–16.
- AGUILAR, O., WEST, M. (2000): Bayesian dynamic factor models and portfolio allocation, *Journal of Business & Economic Statistics*, **18**, 338–357.
- AGULLÓ, J., CROUX, C., VAN AELST, S. (2001): The multivariate least trimmed squares estimator, Preprint.
- AHN, S. K., REINSEL, G. C. (1988): Nested reduced-rank autoregressive models for multiple time series, *Journal of the American Statistical Association*, **83**, 849–56.
- ANDERSON, T. W. (1963): The use of factor analysis in the statistical analysis of multiple time series, *Psychometrika*, **28**, 1–25.
- BADCOCK, J., BAILEY, T. C., KRZANOWSKI, W. J. (2001): Modelling of multivariate process control data, Abstract, IWMS 2001.
- BAI, Z. D., CHEN, N. R., MIAO, B. Q., RAO, C. R. (1990): Asymptotic theory of least distance estimate in multivariate linear models, *Statistics*, **21**, 503–529.
- BAKSHI, B. R. (1998): Multiscale PCA with application to multivariate statistical process monitoring, *AIChE Journal*, **44**, 1596–1610.
- BÁNKÖVI, G., VELICZKY, J., ZIERMANN, M. (1979): Dynamic models for prediction of the development of national economies, In: *Models and Decision Making in National Economies*, Janssen, J. M. L., Pau, L. F., Straszak, A. (Hrsg.), North-Holland, Amsterdam, 257–267.
- BARTHOLOMEW, D. J., KNOTT, M. (1999): *Latent Variable Models and Factor Analysis*, 2. Auflage, Arnold, London.
- BAUER, M. (1997): *Simultane Ausreißer- und Interventionsidentifikation bei Online-Monitoring-Daten*, Dissertation, Fachbereich Statistik, Universität Dortmund.
- BAUER, M., GATHER, U., IMHOFF, M. (1998): Analysis of high dimensional data from intensive care medicine, In: *Proceedings in Computational Statistics, COMPSTAT 1998*, Payne, R., Green, P. (Hrsg.), Physica-Verlag, Heidelberg, 185–190.
- BECKER, C. (1996): *Multivariate Ausreißer-Identifizierer mit hohem Bruchpunkt*, Dissertation, Fachbereich Statistik, Universität Dortmund.
- BECKER, C. (2001): *Robustness concepts for analyzing structured and complex data sets*, Habilitationsschrift, Fachbereich Statistik, Universität Dortmund.
- BECKER, C., FRIED, R. (2001): Applying sliced inverse regression to dynamical data, In: *Mathematical Statistics with Application in Biometry*, Kunert, J., Trenkler, G. (Hrsg.), Josef Eul Verlag, Lohmar, 201–214.

- BECKER, C., GATHER, U. (1999): The masking breakdown point of multivariate outlier identification rules, *Journal of the American Statistical Association*, **94**, 947–955.
- BERNHOLT, T., FISCHER, P. (2004): The complexity of computing the MCD-estimator, *Theoretical Computer Science*, **326**, 383–398.
- BERNHOLT, T., FRIED, R. (2003): Computing the update of the repeated median regression line in linear time, *Information Processing Letters*, **88**, 111–117.
- BERNHOLT, T., FRIED, R., GATHER, U., WEGENER, I. (2004): Modified repeated median filters, *Statistics and Computing*, eingereicht.
- BIANCO, A. M., GARCIA BEN, M., MARTÍNEZ, E. J., YOHAI, V. J. (2001): Outlier detection in regression models with ARIMA errors using robust estimates, *Journal of Forecasting*, **20**, 565–579.
- BICKEL, P. J. (1964): On some alternative estimates for shift in the p -variate one sample problem, *Annals of Mathematical Statistics*, **35**, 1079–1090.
- BLOCH, A. M. (1989): Identification and estimation of dynamic errors-in-variables models, *Journal of Econometrics*, **41**, 145–158.
- BLOOMFIELD, P. (2000): *Fourier analysis of time series: an introduction*, 2. Ausgabe, Wiley, New York.
- BOCK, H. H. (1974): *Automatische Klassifikation*, Vandenhoeck & Ruprecht, Göttingen.
- BOENTE, G., ORELLANA, L. (2004): Robust plug-in estimators in proportional scatter models, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **122**, 95–110.
- BOENTE, G., PIRES, A. M., RODRIGUES, I. M. (2002): Influence functions and outlier detection under the common principal components model: A robust approach, *Biometrika*, **89**, 861–875.
- BOX, G. E. P., JENKINS, G. M., REINSEL, G. C. (1994): *Time series analysis: forecasting and control*, 3. Auflage, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- BOX, G. E. P., TIAO, G. C. (1977): A canonical analysis of multiple time series, *Biometrika*, **64**, 355–365.
- BRILLINGER, D. R. (1975): *Time Series, Data Analysis and Theory*, Holt, Rinehart and Winston, New York; (1981): erweiterte Ausgabe, Holden-Day, San Francisco; (2001): Classics in Applied Mathematics, SIAM, Philadelphia.
- BROCKWELL, P. J., DAVIS, R. A. (1991): *Time Series: Theory and Methods*, Springer Verlag, New York.
- BUSTOS, O. H., YOHAI, V. J. (1986): Robust estimates for ARMA models, *Journal of the American Statistical Association*, **81**, 155–168.
- CAMPBELL, N. A. (1980): Robust procedures in multivariate analysis I: robust covariance estimation, *Applied Statistics*, **29**, 213–237.
- CATTELL, R. B., CATTELL, A. K. S., RHYMER, R. M. (1947): P-technique demonstrated in determining psychological source traits in a normal individual, *Psychometrika*, **12**, 267–288.
- CHAKRABORTY, B. (1999): On multivariate median regression, *Bernoulli*, **5**, 683–703.
- CHAKRABORTY, B. (2003): On multivariate quantile regression, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **110**, 109–132.
- CHAKRABORTY, B., CHAUDHURI, P. (1997): On multivariate rank regression, In: *L1-Statistical Procedures and Related Topics*, IMS Lecture Notes–Monograph Series, Vol. **31**, Dodge, Y. (Hrsg.), 399–414.

- CHAN, W.-S., WEI, W. W. S. (1992): A comparison of some estimators of time series autocorrelations, *Computational Statistics & Data Analysis*, **14**, 149–163.
- CHANG, I., TIAO, G. C., CHEN, C. (1988): Estimation of time series parameters in the presence of outliers, *Tacheometric*, **30**, 193–204.
- CHEN, C., LIU, L.-M. (1993): Joint estimation of model parameters and outlier effects in time series, *Journal of the American Statistical Association*, **88**, 284–297.
- CHOY, K. (2001): Outlier detection for stationary time series, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **99**, 111–127.
- COMON, P. (1994): Independence component analysis, A new concept?, *Signal Processing*, **36**, 287–314.
- CRACK, T. F., LEDOIT, O. (1996): Robust structure without predictability: the ”compass rose” pattern of the stock market, *The Journal of Finance*, **51**, 751–762.
- CRONE, L. J., CROSBY, D. S. (1995): Statistical applications of a metric on subspaces to satellite meteorology, *Tacheometric*, **37**, 324–328.
- CROUX, C., DEHON, C., ROUSSEEUW, P. J., VAN AELST, S. (2001): Robust estimation of the conditional median function at elliptical models, *Statistics & Probability Letters*, **51**, 361–368.
- CROUX, C., FILZMOSER, P., PISON, G., ROUSSEEUW, P. J. (2003): Fitting multiplicative models by robust alternating regressions, *Statistics and Computing*, **13**, 23–36.
- CROUX, C., HAESBROECK, G. (1999): Influence function and efficiency of the minimum covariance determinant scatter matrix estimator, *Journal of Multivariate Analysis*, **71**, 161–190.
- CROUX, C., HAESBROECK, G. (2000): Principal component analysis based on robust estimators of the covariance or correlation matrix: Influence functions and efficiencies, *Biometrika*, **87**, 603–618.
- CROUX, C., RUIZ-GAZEN, A. (1996): A fast algorithm for robust principal components based on projection pursuit, In: *Proceedings in Computational Statistics, COMPSTAT 1996*, Physica-Verlag, 211–216.
- CROUX, C., RUIZ-GAZEN, A. (2004): High breakdown estimators for principal components: the projection-pursuit approach revisited, *Journal of Multivariate Analysis*, erscheint.
- DAHLHAUS, R. (2000): Graphical interaction models for multivariate time series, *Metrika*, **51**, 157–172.
- DANILOV, D. L. (1997): Principal components in time series forecast, *Journal of Computational and Graphical Statistics*, **6**, 112–121.
- DAUMER, M., NEISS, A. (2001): A new adaptive algorithm to detect shifts, drifts and outliers in biomedical time series, In: *Mathematical Statistics with Application in Biometry*, Kunert, J., Trenkler, G. (Hrsg.), Josef Eul Verlag, Lohmar, 265–275.
- DAVIES, P. L., FRIED, R., GATHER, U. (2004): Robust signal extraction from on-line monitoring data, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **122**, 65–78.
- DAVIES, P. L., GATHER, U. (1993): The identification of multiple outliers, *Journal of the American Statistical Association*, **74**, 140–146, eingeladenes Paper mit Diskussion.
- DEMOS, A., SENTANA, E. (1998): An EM algorithm for conditionally heteroscedastic factor models, *Journal of Business & Economic Statistics*, **16**, 357–361.

- DEMPSTER, A. P., LAIRD, N. M., RUBIN, D. B. (1977): Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm, *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, **39**, 1–38 (with discussion).
- DENBY, L., MARTIN, D. (1979): Robust estimation of the first-order autoregressive parameter, *Journal of the American Statistical Association*, **74**, 140–146.
- DEVLIN, S. J., GNANADESIKAN, R., KETTENRING, J. R. (1981): Robust estimation of dispersion matrices and principal components, *Journal of the American Statistical Association*, **76**, 354–362.
- DIEBOLD, F. X., NERLOVE, M. (1989): The dynamics of exchange rate volatility: a multivariate latent factor ARCH model, *Journal of Applied Econometrics*, **4**, 1–21.
- DONOHU, D. L., HUBER, P. J. (1983): The notion of breakdown point, In: *Festschrift for Erich Lehmann*, Bickel, P. J., Doksum, K. A., Hodges, J. L. (Hrsg.), Wadsworth, Belmont, 157–184.
- ELLIS, S. P., MORGENTHAUER, S. (1992): Leverage and breakdown in L_1 regression, *Journal of the American Statistical Association*, **87**, 143–148.
- ENGLE, R. F., GRANGER, C. W. J. (1987): Co-integration and error correction: Representation, estimation and testing, *Econometrica*, **55**, 251–276.
- ENGLE, R. F., KOZICKI, S. (1993): Testing for common features, *Journal of Business & Economic Statistics*, **11**, 369–395, with comments.
- ENGLE, R. F., WATSON, M. (1981): A one-factor multivariate time series model of metropolitan wage rates, *Journal of the American Statistical Association*, **76**, 774–761.
- ESCRIBANO, A., PEÑA, D. (1994): Cointegration and common factors, *Journal of Time Series Analysis*, **15**, 577–586.
- EVERITT, B. S., LANDAU, S., LEESE, M. (2001): *Cluster Analysis*, 4. Auflage, Arnold, London.
- FAHRMEIR, L., TUTZ, G., HAMERLE, A. (1996): *Multivariate statistische Verfahren*, 2. Auflage, de Gruyter, Berlin.
- FERNÁNDEZ-MACHO, F. J. (1997): A dynamic factor model for economic time series, *Kybernetika*, **33**, 583–606.
- FILZMOSER, P. (1999): Robust principal component and factor analysis in the geostatistical treatment, *Environmetrics*, **10**, 363–375.
- FLURY, B. (1988): *Common principal component and related multivariate models*, Wiley, New York.
- FORNI, M., HALLIN, M., LIPPI, M., REICHLIN, L. (2000a): Reference cycles: the NBER methodology revisited, *CEPR Discussion Paper*, 2400.
- FORNI, M., HALLIN, M., LIPPI, M., REICHLIN, L. (2000b): The generalized dynamic factor model: identification and estimation, *The Review of Economics and Statistics*, **82**, 540–554.
- FORNI, M., HALLIN, M., LIPPI, M., REICHLIN, L. (2003): The generalized dynamic factor model: one-sided estimation and forecasting, Preprint.
- FORNI, M., HALLIN, M., LIPPI, M., REICHLIN, L. (2004): The generalized dynamic factor model: consistency and rates, *Journal of Econometrics*, **119**, 231–255.
- FORNI, M., REICHLIN, L. (1996): Dynamic common factors in large cross-sections, *Empirical Economics*, **21**, 27–42.
- FORNI, M., REICHLIN, L. (1998): Let's get real: a factor analytic approach to disaggregated business cycle dynamics, *Review of Economic Studies*, **65**, 453–473.

- FOX, A. J. (1972): Outliers in time series, *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, **3**, 350–363.
- FRIED, R. (2004a): Robust filtering of time series with trends, *Nonparametric Statistics*, **16**, 313–328.
- FRIED, R. (2004b): Robust extraction of trends, in: *Proceedings of the 7th International Conference on Computer Data Analysis and Modeling: Robustness and Computer Intensive Methods*, Aivazian, S., Filzmoser, P., Kharin, Y. (Hrsg.), Academy of Administration at the President of the Republic of Belarus, Minsk, 23–30.
- FRIED, R., BERNHOLT, T., GATHER, U. (2003): Repeated median and hybrid filters, *Computational Statistics and Data Analysis*, erscheint.
- FRIED, R., DIDELEZ, V. (2003): Decomposition and Selection of Graphical Models for Multivariate Time Series, *Biometrika*, **90**, 251–267.
- FRIED, R., GATHER, U. (2002): Fast and robust filtering of time series with trends, In: *Proceedings in Computational Statistics COMPSTAT 2002*, Härdle, W., Rönz, B. (Hrsg.), Physica-Verlag, Heidelberg, 367–372.
- FRIED, R., IMHOFF, M. (2004): On the online detection of monotonic trends in time series, *Biometrical Journal*. **46**, 90–102.
- FRIEDMAN, J. H. (1994): An overview of predictive learning and function approximation, In: *From statistics to neural networks*, Cherkassky, V., Friedman, J. H., Wechsler, H. (Hrsg.), Springer, Berlin, 1–61.
- GALEANO, P., PEÑA, D. (2000): Multivariate analysis in vector time series, Working Paper **01 – 24**, Departamento de Estadística y Econometría, Universidad Carlos III de Madrid.
- GALEANO, P., PEÑA, D., TSAY, R. S. (2004): Outlier detection in multivariate time series via projection pursuit, Working Paper.
- GATHER, U., BAUER, M., FRIED, R. (2002): The identification of multiple outliers in online monitoring data, *Estadística*, **54**, 289–338.
- GATHER, U., BECKER, C. (2001): The curse of dimensionality – a challenge for mathematical statistics, In: *Jahresbericht der Deutschen Mathematiker-Vereinigung*, Teubner, **103**, 19–36.
- GATHER, U., FRIED, R. (2003): Robust estimation of scale for local linear temporal trends, In: *Proceedings of the Fourth International Conference on Mathematical Statistics PROBASTAT 2002*, Stulajter, F. (Hrsg.), Tatra Mountain Mathematical Publications, **26**, 87–101.
- GATHER, U., FRIED, R. (2004): Methods and algorithms for robust filtering, eingeladener Artikel, In: *Proceedings in Computational Statistics COMPSTAT 2004*, Antoch, J. (Hrsg.), Physica-Verlag, Heidelberg, 159–170.
- GATHER, U., FRIED, R., LANIUS, V., IMHOFF, M. (2001): Online monitoring of high dimensional physiological time series – a case study, *Estadística*, **53**, 259–297.
- GATHER, U., IMHOFF, M., FRIED, R. (2002): Graphical models for multivariate time series from intensive care monitoring, *Statistics in Medicine*, **21**, 2685–2701.
- GATHER, U., SCHETTLINGER, K., FRIED, R. (2004): Online signal extraction by robust linear regression, *Computational Statistics*, eingereicht.
- GERVINI, D., ROUSSON, V. (2004): Criteria for evaluating dimension-reducing components for multivariate data, *The American Statistician*, **58**, 72–76.

- GEWEKE, J. (1977): The dynamic factor analysis of economic time series, In: *Latent Variables in Socio-Economic Models*, Aigner, D., Goldberger, A. S. (Hrsg.), North-Holland, Amsterdam, 365–383.
- GEWEKE, J. F., SINGLETON, K. J. (1981): Maximum likelihood „confirmatory“ factor analysis of economic time series, *International Economic Review*, **22**, 37–54.
- GNANADESIKAN, R., KETTENRING, J. R. (1972): Robust estimates, residuals, and outlier detection with multiresponse data, *Biometrics*, **28**, 81–124.
- GOLUB, G. H., VAN LOAN, C. F. (1983): *Matrix Computations*, North Oxford Academic Publishing, Oxford.
- GOLYANDINA, N. E., NEKRUTIN, V. V., ZHIGLJAVSKY, A. A. (2001): *Analysis of time series structure. SSA and related techniques*, Chapman and Hall, Boca Raton.
- GONZALO, J., GRANGER, C. (1995): Estimation of common long-memory components in integrated systems, *Journal of Business & Economic Statistics*, **13**, 27–35.
- HAMPEL, F. R. (1975): Beyond location parameters: Robust concepts and methods, *Bulletin of the International Statistical Institute*, **46**, 375–382.
- HANNAN, E. J. (1970): *Multiple time series*, Wiley, New York.
- HARVEY, A. C. (1989): *Forecasting structural time series models and the Kalman filter*, Cambridge University Press, New York.
- HARVEY, A., RUIZ, E., SENTANA, E. (1992): Unobserved component time series models with ARCH disturbances, *Journal of Econometrics*, **52**, 129–157.
- HASSELMAN, K. (1988): PIPs and POPs: The reduction of complex dynamical systems using principal interaction and oscillation patterns, *Journal of geophysical research-atmospheres*, **93**, 11015–11021.
- HE, X., JUREČKOVÁ, J., KOENKER, R., PORTNOY, S. (1990): Tail behavior of regression estimators and their breakdown points, *Econometrica*, **58**, 1195–1214.
- HEIJ, C., SCHERRER, W., DEISTLER, M. (1997): System identification by dynamic factor models, *SIAM Journal on Control and Optimization*, **35**, 1924–1951.
- HETTMANSPERGER, T. P., SHEATHER, S. J. (1992): A cautionary note on the method of least median squares, *American Statistician*, **46**, 79–83.
- HÖGEL, J. (2000): Applications of statistical process control techniques in medical fields, *Allgemeines Statistisches Archiv*, **84**, 337–359.
- HOREL, J. D. (1984): Complex principal component analysis: Theory and examples, *Journal of Climate and Applied Meteorology*, **23**, 1660–1673.
- HOTELLING, H. (1933): Analysis of a complex of statistical variables into principal components, *Journal of Educational Psychology*, **24**, 417–441, 498–520.
- HOTELLING, H. (1947): Multivariate quality control, In: *Techniques of Statistical Analysis*, Eisenhart, C., Hastay, M., Wallis, W. A. (Hrsg.), McGraw-Hill, New York, 111–184.
- HUBER, P. J. (1993): Projection Pursuit and Robustness, In: *New Directions in Statistical Data Analysis and Robustness*, Morgenthaler, S., Ronchetti, E., Stahel, W. A. (Hrsg.), Birkhäuser, Basel, 139–146.
- HUBERT, M., ROUSSEEUW, P. J., VANDEN BRANDEN, K. (2004): ROBPCA: a New Approach to Robust Principal Component Analysis, *Tacheometric*, erscheint.

- HUBERT, M., ROUSSEEUW, P. J., VERBOVEN, S. (2002): A fast method for robust principal components with applications to chemometrics, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **60**, 101–111.
- HYVÄRINEN, A., OJA, E. (2000): Independent component analysis: Algorithms and Applications, *Neural Networks*, **13**, 411–430.
- IMHOFF, M., BAUER, M. (1997): Time series analysis in critical care monitoring, *New Horizons*, **4**, 519–531.
- IMHOFF, M., BAUER, M., GATHER, U., LÖHLEIN, D. (1997): Time series analysis in intensive care medicine, *Applied Cardiopulmonary Pathophysiology*, **6**, 263–281.
- IMHOFF, M., BAUER, M., GATHER, U., LÖHLEIN, D. (1998): Statistical pattern detection in univariate time series of intensive care on-line monitoring data, *Intensive Care Medicine*, **24**, 1305–1314.
- IMHOFF, M., BAUER, M., GATHER, U., FRIED, R. (2002): Pattern detection in intensive care monitoring time series with autoregressive models: Influence of the model order, *Biometrical Journal*, **44**, 746–761.
- IMHOFF, M., FRIED, R., GATHER, U., LANIUS, V. (2003): Dimension Reduction for Physiological Variables Using Graphical Modelling, In: *Proceedings of the Annual Symposium of the American Medical Informatics Association AMIA 2003*, 313–317.
- JÖRESKOG, K. G. (1977): Factor Analysis by Least Squares and Maximum Likelihood, In: *Statistical Methods for Digital Computers*, Enslein, K., Ralston, A., Wilf, H. F. (Hrsg.), Wiley, New York, 125–153.
- JACKSON, J. E. (1959): Quality control methods for several related variables, *Tacheometric*, **1**, 359–377.
- JACKSON, J. E., MUDHOLKAR, G. S. (1979): Control procedures for residuals associated with principal component analysis, *Tacheometric*, **21**, 341–349.
- JOHNSON, R. A., WICHERN, D. W. (1992): *Applied multivariate statistical analysis*, Prentice–Hall, London.
- JOLLIFFE, I. T. (1995): Rotation of principal components: Choice of normalization constraints, *Journal of Applied Statistics*, **22**, 29–35.
- JOLLIFFE, I. T. (2002): *Principal component analysis*, 2. Auflage, Springer, New York.
- JUSTEL, A., PEÑA, D., TSAY, R. S. (2000): Detection of outlier patches in autoregressive time series, *Statistica Sinica*, **11**, 651–673.
- KANO, M., HASEBE, S., HASHIMOTO, I., OHNO, H. (2001): A new multivariate statistical process monitoring method using principal component analysis, *Computers and Chemical Engineering*, **25**, 1103–1113.
- KAUFMAN, L., ROUSSEEUW, P. J. (1990): *Finding Groups in Data, An Introduction to Cluster Analysis*, Wiley–Interscience, New York.
- KLEINER, B., MARTIN, D. (1979): Robust estimation of power spectra, *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, **41**, 313–351.
- KOENKER, R., PORTNOY, S. (1990): M-estimation of multivariate regressions, *Journal of the American Statistical Association*, **85**, 1060–1068.
- KOIVUNEN, V. (1996): Nonlinear filtering of multivariate images under robust error criterion, *IEEE Transactions on Image Processing*, **5**, 1054–1060.

- KOSFELD, R. (1996): Robust exploratory factor analysis, *Statistical Papers*, **27**, 105–122.
- KRÄMER, W., RUNDE, R. (1997): Chaos and the compass rose, *Economic Letters*, **54**, 113–118.
- KRZANOWSKI, W. J. (1979): Between-groups comparison of principal components, *Journal of the American Statistical Association*, **74**, 703–707.
- KU, W., STORER, R. H., GEORGAKIS, C. (1995): Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **30**, 179–196.
- LANIUS, V., GATHER, U. (2003): Dimension Reduction for Time Series from Intensive Care, *Technical Report 2/2003*, SFB 475, Universität Dortmund.
- LAWLEY, D. N., MAXWELL, A. E. (1971): *Factor analysis as a statistical method*, 2. Auflage, Butterworth, London.
- LEE, Y., KASSAM, S. (1985): Generalized median filtering and related nonlinear filtering techniques, *IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing*, **33**, 672–683.
- LI, G., CHEN, Z. (1985): Projection-pursuit approach to robust dispersion matrices and principal components: primary theory and Monte Carlo, *Journal of the American Statistical Society*, **80**, 759–766.
- LI, W., YUE, H. H., VALLE-CERVANTES, S., QIN, S. J. (2000): Recursive PCA for adaptive process monitoring, *Journal of Process Control*, **10**, 471–486.
- LOCANTORE, N., MARRON, J. S., SIMPSON, D. G., TRIPOLI, N., ZHANG, J. T., COHEN, K. L. (1999): Robust principal component analysis for functional data, *Test*, **8**, 1–74.
- MA, Y., GENTON, M. G. (2000): Highly robust estimation of the autocovariance function, *Journal of time series*, **21**, 663–684.
- MA, Y., GENTON, M. G. (2001): Highly robust estimation of dispersion matrices, *Journal of Multivariate Analysis*, **78**, 11–36.
- MANN, M. E., PARK, J. (1999): Oscillatory spatiotemporal signal detection in climate studies: A multi-taper spectral domain approach, *Advanced Geophysics*, **41**, 1–131.
- MARDIA, K. V., KENT, J. T., BIBBY, J. M. (1995): *Multivariate Analysis*, 10. Ausgabe, Academic Press, London.
- MÁRKUS, L., KOVÁCS, J. (2001): Identification of latent effects driving multiple time series, Preprint.
- MARONNA, R. A. (1976): Robust M-estimators of multivariate location and scatter, *The Annals of Statistics*, **4**, 51–67.
- MARONNA, R. A., MORGENTHALER, S. (1986): Robust regression through robust covariances, *Communications in Statistics – Theory and Methods*, **15**, 1347–1365.
- MARONNA, R. A., ZAMAR, R. H. (2002): Robust estimates of location and dispersion for high-dimensional datasets, *Technometrics*, **44**, 307–317.
- MARTIN, R. D. (1979): Robust estimation for time series autoregressions, In: *Robustness in statistics*, Launer, R. L., Wilkinson, G. (Hrsg.), Academic Press, New York, 683–759.
- MARTIN, R. D. (1981): Robust methods for time series, In: *Applied time series analysis II*, Findley, D. F. (Hrsg.), Academic Press, New York, 683–759.
- MARTIN, R. D., YOHAI, V. J. (1986): Influence functionals for time series, *The Annals of Statistics*, **14**, 781–818.

- MASAROTTO, G. (1987a): Robust and consistent estimates of autoregressive moving average parameters, *Biometrika*, **74**, 791–797.
- MASAROTTO, G. (1987b): Robust identification of autoregressive moving average models, *Applied Statistics*, **36**, 214–220.
- MILLER, G. A. (1956): The magical number seven, plus or minus two: Some limits on our capacity for processing information, *The Psychological Review*, **63**, 81–97.
- MIZERA, I., MÜLLER, C. H. (1999): Breakdown points and variation exponents of robust M -estimators in linear models, *The Annals of Statistics*, **27**, 1164–1177.
- MOLENAAR, P. C. M. (1985): A dynamic factor model for the analysis of multivariate time series, *Psychometrika*, **50**, 181–202.
- MOLENAAR, P. C. M. (1987): Dynamic factor analysis in the frequency domain: Causal modeling of multivariate psychophysiological time series, *Multivariate Behavioral Research*, **22**, 329–353.
- MOLENAAR, P. C. M., DE GOOIJER, J. G., SCHMITZ, B. (1992): Dynamic factor analysis of nonstationary multivariate time series, *Psychometrika*, **57**, 333–349.
- MOLENAAR, P. C. M., NESSELROADE, J. R. (1998): A comparison of pseudo-maximum likelihood and asymptotically distribution-free dynamic factor analysis, parameter estimation in fitting covariance-structure models to block-Toeplitz matrices representing single-subject multivariate time-series, *Multivariate Behavioral Research*, **33**, 313–342.
- MOLENAAR, P. C. M., NESSELROADE, J. R. (2001): Rotation in the dynamic factor modeling of multivariate stationary time series, *Psychometrika*, **66**, 99–107.
- MORIK, K., IMHOFF, M., BROCKHAUSEN, P., JOACHIMS, T., GATHER U. (2000): Knowledge discovery and knowledge validation in intensive care, *Artificial Intelligence in Medicine*, **19**, 225–249.
- MÜLLER, C. H. (1995): Breakdown points for designed experiments, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **45**, 413–427.
- NESSELROADE, J. R. (1994): Exploratory factor analysis with latent variables and the study of processes of development and change, In: *Latent variables analysis: Applications for developmental research*. von Eye, A., Clogg, C. C. (Hrsg.), Sage, Thousand Oaks, California, 131–154.
- NEUENSCHWANDER, B. E., FLURY, B. D. (2000): Common principal components for dependent random vectors, *Journal of Multivariate Analysis*, **75**, 163–183.
- OLLILA, E., OJA, H., KOIVUNEN, V. (2003): Estimates of regression coefficients based on sign covariance matrix, *Journal of the American Statistical Association*, **98**, 90–98.
- PEARSON, K. (1901): On lines and planes of closest fit to systems of points in space, *Philosophical Magazine*, Series 6, **2**, 559–572.
- PEÑA, D., BOX, G. E. P. (1987): Identifying a simplifying structure in time series, *Journal of the American Statistical Association*, **82**, 836–843.
- PEÑA, D., PONCELA, P. (2000): Nonstationary dynamic factor analysis, Preprint.
- PEÑA, D., PONCELA, P. (2002): Dimension reduction in multivariate time series, *Academy Colloquium and Masterclass on State space and unobserved models in honor of Prof. J. Durbin*, Amsterdam.

- PHILLIPS, P. (2000): CPC – Common principal component analysis program, <http://darkwing.uoregon.edu/~pphil/programs/cpc/cpc.htm>, Stand: 02.08.2004.
- PHILLIPS, P., PERRON, P. (1988): Testing for a unit root in time series regression, *Biometrika*, **75**, 335–346.
- PICCI, G., PINZONI, S. (1986): Dynamic factor–analysis models for stationary processes, *IMA Journal of Mathematical Control & Information*, **3**, 185–210.
- PISON, G., ROUSSEEUW, P. J., FILZMOSER, P., CROUX, C. (2003): Robust factor analysis, *Journal of Multivariate Analysis*, **84**, 145–172.
- PLAUT, G., VAUTARD, R. (1994): Spells of low–frequency oscillations and weather regimes in the Northern hemisphere, *Journal of the atmospheric sciences*, **51**, 210–236.
- PRIESTLEY, M. B., SUBBA RAO, T., TONG, H. (1974): Applications of principal component analysis and factor analysis in the identification of multivariate systems, *IEEE Transactions on Automatic Control*, **19**, 730–734.
- QIN, S. J., LI, W., YUE, H. H. (1999): Recursive PCA for adaptive process monitoring, *Proceedings of the IFAC 14th Triennial World Congress*, Beijing, China, 85–90.
- QUAH, D., SARGENT, T. J. (1993): A dynamic index model for large cross sections, In: *Business Cycles, Indicators, and Forecasting*, Stock, J. H., Watson, M. W. (Hrsg.) University of Chicago Press, Chicago.
- QUENOUILLE, M. H. (1968): *The Analysis of Multiple Time Series*, Griffin, London.
- RAO, C. R. (1988): Methodology based on the L_1 –norm in statistical inference, *Sankayā, Series A*, **50**, 289–313.
- REINSEL, G. C. (1983): Some results on multivariate autoregressive index models, *Biometrika*, **70**, 145–156.
- REINSEL, G. C. (1997): *Elements of multivariate time series*, 2. Auflage, Springer, New York.
- REINSEL, G. C., VELU, R. P. (1998): *Multivariate reduced–rank regression: theory and applications*, Springer, New York.
- ROBINSON, E. A., SILVIA, M. (1978): *Digital signal processing and time series analysis*, Holden–Day, San Francisco.
- ROUSSEEUW, P. J. (1984): Least median of squares regression, *Journal of the American Statistical Association*, **79**, 871–880.
- ROUSSEEUW, P. J. (1985): Multivariate estimation with high breakdown point, In: *Mathematical Statistics and Applications*, **8**, Grossmann, W., Pflug, G., Vincze, I., Wertz, W. (Hrsg.), Reidel, Dordrecht, 283–297.
- ROUSSEEUW, P. J., CROUX, C. (1993): Alternatives to the median absolute deviation, *Journal of the American Statistical Association*, **88**, 1273–1283.
- ROUSSEEUW, P. J., HUBERT, M. (1999): Regression Depth, *Journal of the American Statistical Association*, **94**, 388–402.
- ROUSSEEUW, P. J., LEROY, A. M. (1987): *Robust regression and outlier detection*, Wiley, New York.
- ROUSSEEUW, P. J., VAN AELST, S., VAN DRIESSEN, K., AGULLÓ, J. (2004): Robust multivariate regression, *Technometrics*, **46**, 293–305.
- ROUSSEEUW, P. J., VAN DRIESSEN, K. (1999): A fast algorithm for the minimum covariance determinant estimator, *Technometrics*, **41**, 212–223.

- ROUSSON, V., GASSER, T. (2004): Simple component analysis, *Applied statistics*, erscheint.
- SÁNCHEZ, J. M., PEÑA, D. (2003): The identification of multiple outliers in ARIMA models, *Communications in Statistics, Theory and Methods*, **32**, 1265–1287.
- SARGENT, T. J., SIMS, C. A. (1977): Business cycle modelling without pretending to have too much a priori economic theory, In: *New Methods in Business Research*, Sims, C. A. (Hrsg.), Federal Reserve Bank of Minneapolis, Minneapolis.
- SCHERRER, W., DEISTLER, M. (1998): A structure theory for linear dynamic errors-in-variables models, *SIAM Journal Control Optimization*, **36**, 2148–2175.
- SCHETTLINGER, K. (2004): *Robust methods for signal extraction from time series*, Diplomarbeit, Fachbereich Statistik, Universität Dortmund.
- SENTANA, E. (1998): The relation between conditionally heteroscedastic factor models and factor GARCH models, *Econometrics Journal*, **1**, 1–9.
- SENTANA, E., FIORENTINI, G. (2001): Identification, estimation and testing of conditionally heteroscedastic factor models, *Journal of Econometrics*, **102**, 143–164.
- SHAPIRO, D. E., SWITZER, P. (1989): Extracting time trends from multiple monitoring sites, *Technical Report*, **132**, SIMS, Stanford University.
- SHUMWAY, R. H., STOFFER, D. S. (2000): *Time series analysis and its applications*, Springer, New York.
- SIEGEL, A. F. (1982): Robust regression using repeated medians, *Biometrika*, **68**, 242–244.
- SJÖSTEDT, S. (1996): Continuum factor models: A unified approach to forecasting multiple time series, *Research Report*, **7**, Umea University, Sweden.
- SJÖSTEDT, S., BARRLUND, A. (1997): A computational method for estimating continuum factor models, *Computational Statistics*, **12**, 481–495.
- SMITH, A. F. M., WEST, M. (1983): Monitoring renal transplants: An application of the multi-process Kalman filter, *Biometrics*, **39**, 867–878.
- SOLOW, A. R. (1994): Detecting change in the composition of a multispecies community, *Biometrics*, **50**, 556–565.
- SPARKS, R., ADOLPHSON, A., PHATAK, A. (1997): Multivariate process monitoring using the dynamic biplot, *International Statistical Review*, **65**, 325–349.
- SPEARMAN, C. (1904): "General intelligence" objectively determined and measured, *American Journal of Psychology*, **15**, 201–293.
- STOCK, J. H., WATSON, M. W. (1988): Testing for common trends, *Journal of the American Statistical Association*, **83**, 1097–1107.
- STOCK, J. H., WATSON, M. W. (1998): Diffusion indexes, *NBER working paper*, **6702**.
- STOCK, J. H., WATSON, M. W. (2002): Macroeconomic forecasting using diffusion indexes, *Journal of Business and Economic Statistics*, **20**, 147–162.
- STOFFER, D. S. (1999): Detecting common signals in multiple time series using the spectral envelope, *Journal of the American Statistical Association*, **94**, 1341–1356.
- SWITZER, P. (1985): Min/max autocorrelation factors for multivariate spatial imagery, *Computer science and Statistics*, Billard, L. (Hrsg.), Elsevier, North Holland, 13–16.
- SWITZER, P., GREEN, A. A. (1984): Min/Max Autocorrelation factors for multivariate spatial imagery, *Technical Report*, **6**, Department of Statistics, Stanford University.

- TANAKA, Y., ODAKA, Y. (1989A): Influential observations in principal factor analysis, *Psychometrika*, **54**, 475–485.
- TANAKA, Y., ODAKA, Y. (1989B): Sensitivity analysis in maximum likelihood factor analysis, *Communications in Statistics – Theory and Methods*, **18**, 4067–4084.
- TATUM, L. G., HURVICH, C. M. (1993a): A frequency domain approach to robust time series analysis, In: *New Directions in Statistical Data Analysis and Robustness*, Morgenthaler, S., Ronchetti, B., Stahel, W. A. (Hrsg.), Birkhäuser, Basel.
- TATUM, L. G., HURVICH, C. M. (1993b): High breakdown methods of time-series analysis, *Journal of the royal statistical society, Series B*, **55**, 881–896.
- THEWS, G., MUTSCHLER, E., VAUPEL, P. (1991): *Anatomie, Physiologie, Pathophysiologie der Menschen*, 4. Auflage, WVG, Stuttgart.
- THURSTONE, L. L. (1935): *Vectors of the mind*, University of Chicago Press, Chicago.
- TIAO, G. C., BOX, G. E. P. (1981): Modeling multiple time series with applications, *Journal of the American Statistical Association*, **76**, 802–816.
- TIAO, G. C., TSAY, R. S. (1989): Model specification in multivariate time series, *Journal of the Royal Statistical Society B*, **51**, 157–213.
- TSAY, R. S. (1986): Time series model specification in the presence of outliers, *Journal of the American Statistical Association*, **81**, 132–141.
- TSAY, R. S. (1988): Outliers, level-shifts and variance changes in time series, *Journal of Forecasting*, **7**, 1–20.
- TSAY, R. S., PEÑA, D., PANKRATZ, A. E. (2000): Outliers in multivariate time series, *Biometrika*, **87**, 789–804.
- TUKEY, J. W. (1977): *Exploratory data analysis*, Addison–Wesley, Reading, Massachusetts.
- VELU, R. P., REINSEL, G. C., WICHERN, D. W. (1986): Reduced rank models for multiple time series, *Biometrika*, **73**, 105–118.
- WATSON, M. W., ENGLE, R. F. (1983): Alternative algorithms for the estimation of dynamic factor, mimic and varying coefficient regression models, *Journal of Econometrics*, **23**, 385–400.
- WISE, B. M., RICKER, N. L., VELTKAMP, D. F., KOWALSKI, B. R. (1990): A theoretical basis for the use of principal component models for monitoring multivariate processes, *Process Control and Quality*, **1**, 41–51.
- WOLD, S. (1994): Exponentially weighted moving principal components analysis and projections to latent structures, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **23**, 149–161.
- WOOD, P., BROWN, D. (1994): The study of intraindividual differences by means of dynamic factor models: Rationale, implementation, and interpretation, *Psychological Bulletin*, **116**, 166–186.
- WU, C. F. J. (1983): On the convergence properties of the EM algorithm, *Annals of Statistics*, **11**, 95–103.