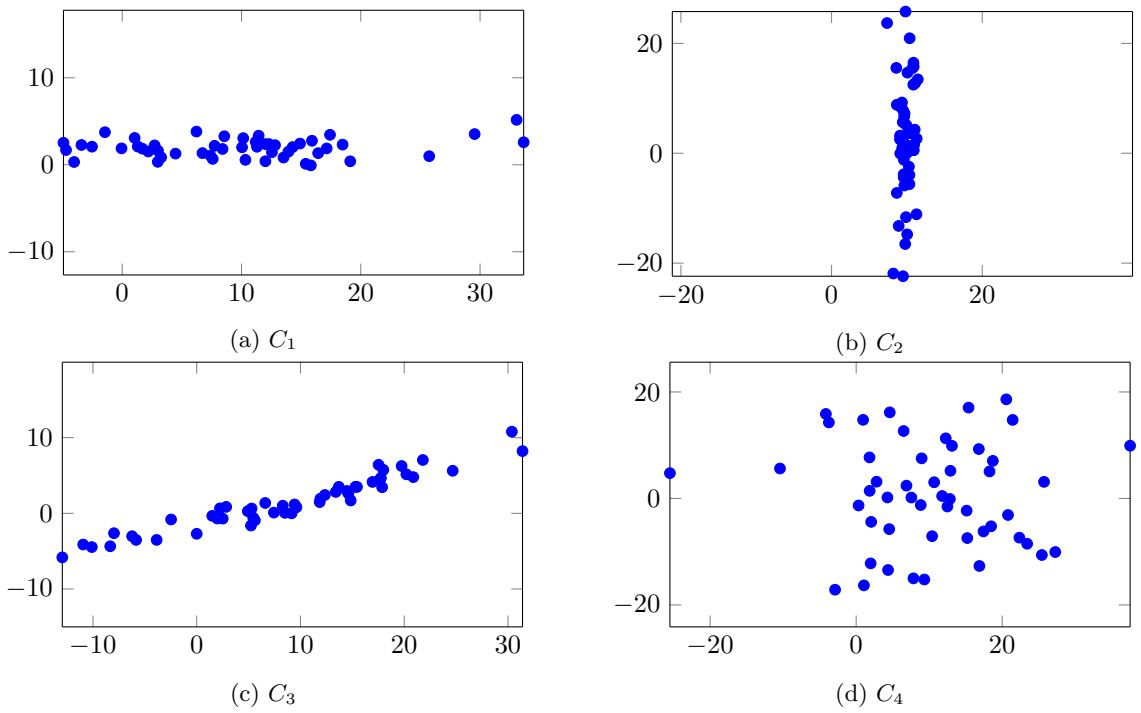
Gruppennummer 16

Andreas Cremer (0926918)
Hanna Huber (0925230)
Lena Trautmann (1526567)

May 25, 2016



(a) C_1 (b) C_2

(c) C_3 (d) C_4

Figure 1: Die Daten aus data1 (a), data2 (b), data3 (c) and data4 (d)

1. Kovarianzmatrix

   (a) ourCov.m erwartet eine $d \times n$ Matrix und gibt die dazugehörige Kovarianzmatrix zurück.

   (b) Hier werden die Kovarianzmatrizen für daten.mat berechnet. In C_{11} steht die Varianz in der ersten Dimension. In C_{22} steht die Varianz in der zweiten Dimension. In C_{12} und C_{21} steht die Kovarianz.
   Abbildung 1 zeigt die verschiedenen 2D-Datensätze. data1 hat eine hohe Varianz in der ersten und eine geringe Varianz in der zweiten Dimension. Die Kovarianz ist gering, die Datenpunkte bilden ein schmales Band parallel zur x-Achse.
   data2 hat eine geringe Varianz in der ersten und eine hohe Varianz in der zweiten Dimension und ebenfalls eine geringe Kovarianz. Die Datenpunkte bilden ein schmales Band parallel zur y-Achse.
   data3 hat eine sehr hohe und eine deutlich niedrigere Varianz sowie eine hohe Kovarianz. Dies führt zu einem leicht ansteigenden Band.
   data4 hat hohe nahe beieinander liegende Varianzen und eine Kovarianz nahe beim Nullpunkt. Dies führt zu einer Punktwolke ohne erkennbare Ordnung.

2. PCA

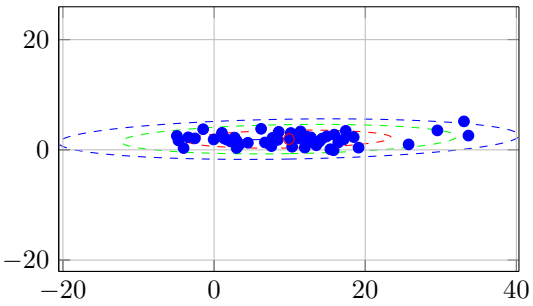
   pca.m berechnet die PCA indem mithilfe von der Matlabfunktion eig die Eigenwerte und -vektoren abgefragt werden. Diese Funktion ordnet beides nach aufsteigenden Eigenwerten, daher wird danach noch die Reihenfolge umgekehrt.

   (a) Abbildung 2 zeigt die Ergebnisse für die Daten aus daten.mat mit plot2DPCA.m.

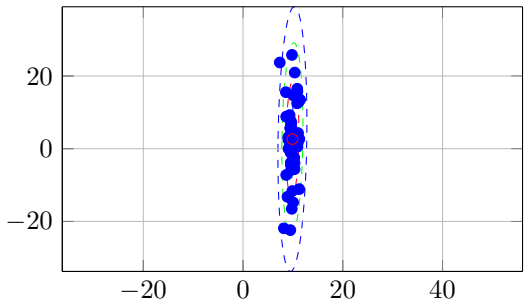
   (b) Der erste Eigenvektor gibt die Richtung der höchsten Varianz an. Weitere Eigenvektoren stehen jeweils orthogonal auf alle schon vorhanden Eigenvektoren und geben die Richtung der höchsten verbleibenden Varianz an. Im Plot sind die Eigenvektoren durch blaue Striche durch den Mittelwert gekennzeichnet.

   (c) Die Eigenwerte zu den Eigenvektoren geben die Varianz in Richtung des jeweiligen Eigenvektors an. Im Plot sind sie durch die Länge der Eigenvektormarkierungen dargestellt. Sie ergeben aufaddiert die Gesamtvarianz.

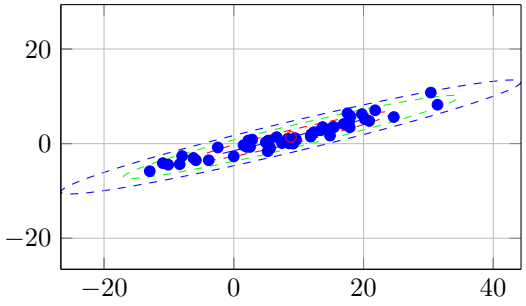
   (d) In die Berechnung von Varianz und Kovarianz fließt bei fehlendem Mittelwertsabzug der Abstand der Datenpunkte vom Nullpunkt des verwendeten Koordinatensystems mit ein. Somit kann man keine sinnvollen Schlussfolgerungen mehr ziehen. Durch den Mittelwertsabzug wird die Kovarianzmatrix invariant gegen Translation.



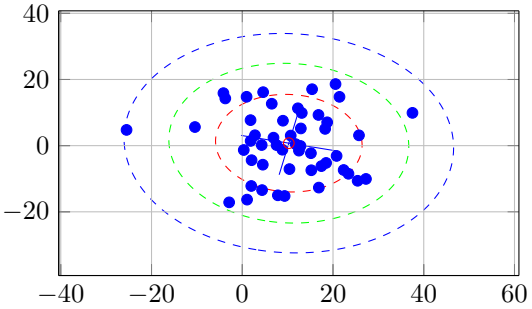
(a) PCA 1



(b) PCA 2

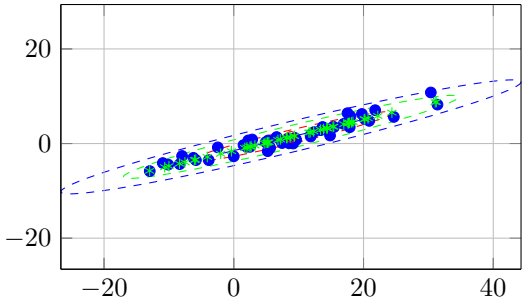


(c) PCA 3

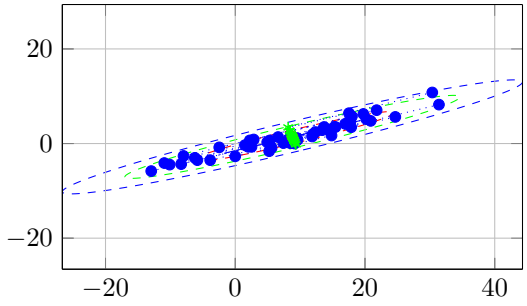


(d) PCA 4

Figure 2: Die PCA-Plots



(a) Hauptvektor



(b) Nebenvektor

Figure 3: Projektionen auf Haupt und Nebenvektor

3. Unterraum-Projektion

   (a) In project.m werden data3 und die Eigenvektoren übernommen und die Daten mithilfe von $b = E^T * (x - m)$ in das Koordinatensystem des Eigenraums übertragen. Hierdurch können die Daten auf den Hauptvektor projiziert werden, indem weitere Dimensionen einfach weggeschnitten werden. Die Daten sind damit nur noch eindimensional.
   Anschließend werden die Daten im Eigenraum mit Nullen auf die ursprüngliche Dimension aufgefüllt. Diese neuen Daten werden in der obigen Gleichung als b eingesetzt und es wird nach x gelöst. So werden die auf den Hauptvektor projizierten Daten wieder im ursprünglichen Koordinatensystem dargestellt.
   Wie man in Abbildung 3a sehen sehen kann, liegen die Datenpunkte nach Projektion und Rekonstruktion alle auf einer Linie, da sie auf eine Dimension reduziert wurden. Der durchschnittliche Fehler liegt bei 0.7257.

   (b) Abbildung 3b zeigt die Projektion auf den Nebenvektor. Der im Plot sichtbare Unterschied zum vorigen Punkt ist, dass die Datenpunkte nach Projektion und Rekonstruktion viel näher zusammen liegen. Der durchschnittliche Fehler ist mit 8.9097 deutlich höher. Um den Fehler gering zu halten, verwendet man die Eigenvektoren mit den höchsten Eigenwerten. Hierbei gibt es einen Trade-off zwischen Genauigkeit und Anzahl der verwendeten Eigenvektoren.

4. Untersuchungen in 3D

   (a) Wie in Abbildung 4 zu sehen, entspricht die Ausdehnung der Ellipsoide der Länge des Eigen-

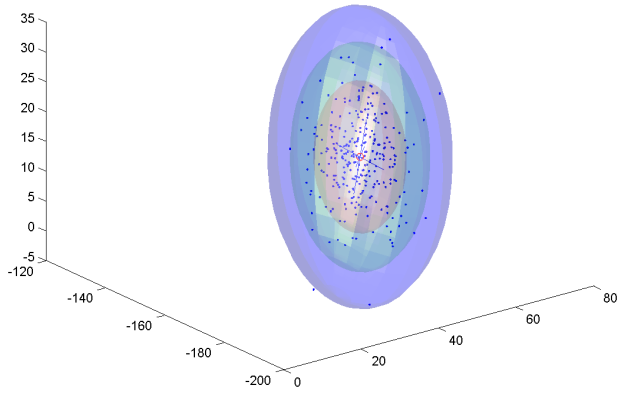


Figure 4: Daten, Eigenvektoren und Standardabweichung

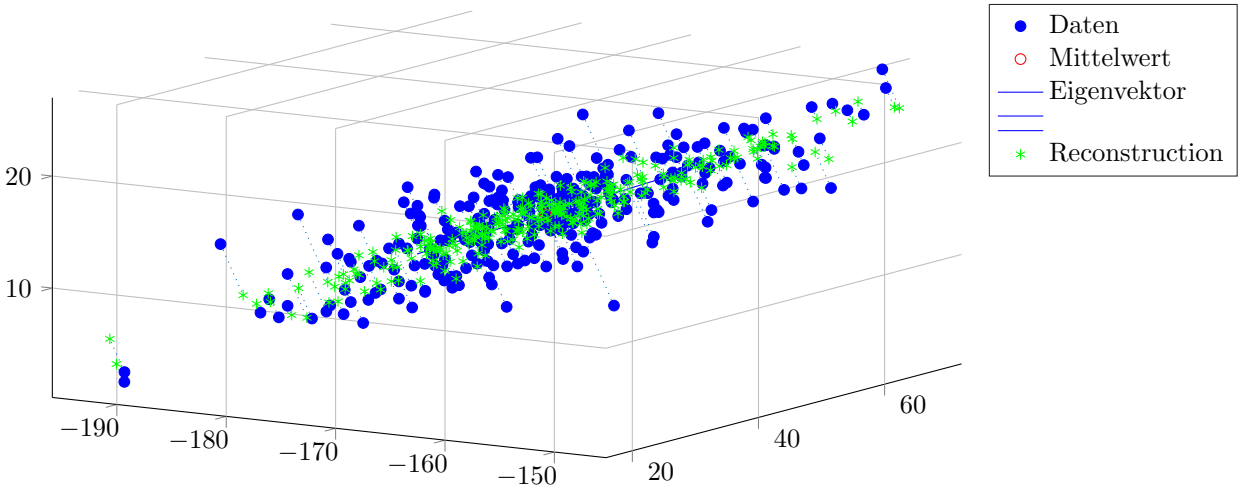


Figure 5: Rekonstruktion der auf die ersten zwei Hauptkomponenten projizierten 3D Daten

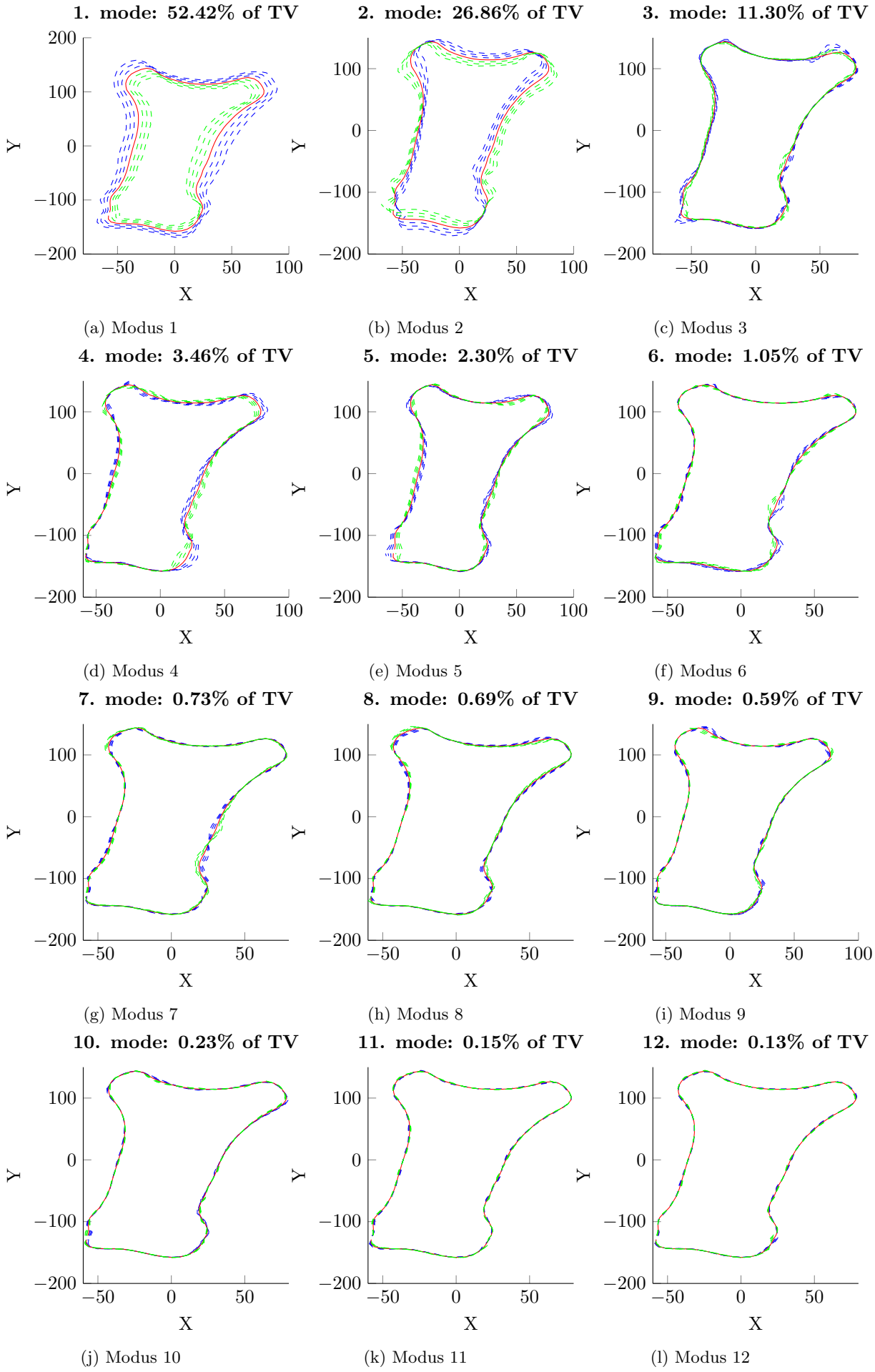
vektors (als der Höhe des zugehörigen Eigenwerts) in die jeweilige Richtung und somit auch der Größe der Varianz dieser Dimension. Einer großen Kovarianz zwischen zwei Dimensionen entspricht ein Ellipsoid, dessen Hauptachse entlang des ersten Meridians dieser Dimensionen liegt.

(b) Nach Projektion auf den Unterraum, der durch die ersten beiden Eigenvektoren aufgespannt wird, haben die Daten Dimension zwei. Die verlorene Information ist die des dritten Eigenvektors. Die Daten liegen jetzt in einer Ebene. Die rekonstruierten Daten sind in Abbildung 5 zu sehen.

5. Shape Modell

(a) generateShape.m berechnet eine neue Shape anhand der mit b gewichteten Eigenvektoren und dem Mittelwert aller Shapes.

(b) Die ersten 13 Eigenwerte sind größer als 1, alle weiteren Eigenwerte gehen gegen 0 (Werte der Größenordnung 10^{-13} und kleiner). Daher tragen eigentlich nur die ersten 13 Modes zur Gesamtvarianz bei und werden im Folgenden genauer betrachtet (siehe Abb. 6).
Der erste Modus beinhaltet mehr als 50% der Gesamtvarianz und beeinflusst hauptsächlich die Größe der Struktur. Der zweite Modus beinhaltet ein weiteres Viertel der Gesamtvarianz und beeinflusst am meisten die Länge (negatives b für diesen Modus) bzw. Breite (positives b für diesen Modus) der Knochenstruktur. Bereits der dritte Modus deckt nur noch etwas mehr als 10% der Gesamtvarianz ab und ist für leichte Änderungen der exakten Knochenstruktur verantwortlich. Der vierte und fünfte Modus (mit zusammen knapp 6% der Gesamtvarianz) bestimmen wie weit die Epiphysen des Knochens im Gegensatz zur Diaphyse herausstehen.



(a) Modus 1 (b) Modus 2 (c) Modus 3

(d) Modus 4 (e) Modus 5 (f) Modus 6

(g) Modus 7 (h) Modus 8 (i) Modus 9

(j) Modus 10 (k) Modus 11 (l) Modus 12

Figure 6: Die ersten zwölf Modi: negatives Vielfaches von lambda (blau), positives Vielfaches (grün) und mean shape (rot)

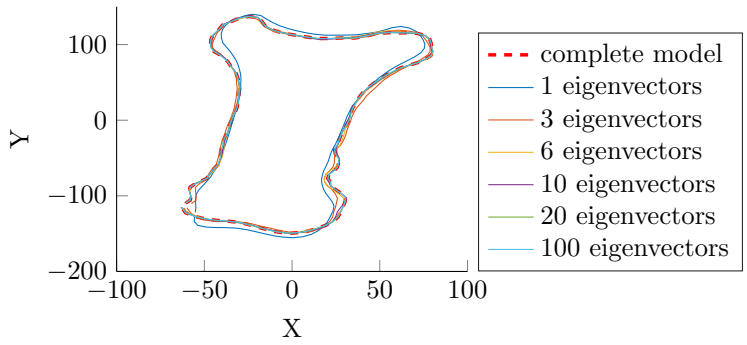


Figure 7: Neue Shape bei variierter Anzahl an verwendeten Eigenvektoren

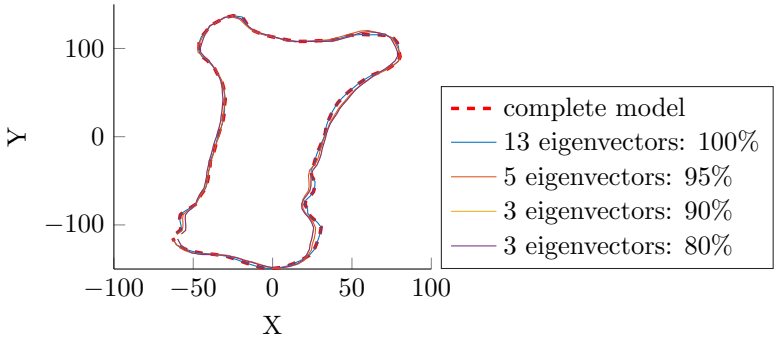


Figure 8: Neue Shape bei variiertem Prozentsatz an abgedeckter Gesamtvarianz

Alle Modi ab dem sechsten decken bis zu gut 1% der Gesamtvarianz ab und führen zu spezifischen Ausbuchtungen.

(c) Mit Hilfe eines zufällig generierten b-Vektors wurde eine neue Knochenstruktur berechnet. Die Anzahl der Einträge in b, und damit die Anzahl der verwendeten Eigenvektoren, wurde variiert zwischen eins, drei, sechs, zehn, 20, 100 und allen. In Abbildung 7 sieht man die Unterschiede in der erzeugten Struktur. Wird nur der erste Eigenvektor verwendet, ist die Abweichung vom gesamten Modell am größten (übereinstimmend mit Aufgabe 3). Werden die ersten zehn Eigenvektoren verwendet, sind nur noch geringe Abweichungen erkennbar (wenn man entsprechende Teile der Graphik vergrößert betrachtet). Da die Eigenwerte ab dem 14. gegen Null gehen, ist es nicht überraschend, dass keine Unterschiede zwischen dem Modell mit 20 bzw. 100 Eigenvektoren und dem kompletten Modell mit allen Eigenvektoren erkennbar sind.
In Abbildung 8 ist die Anzahl der verwendeten Eigenvektoren anhand der mindestens abgedeckten Gesamtvarianz bestimmt. Sowohl für 80% als auch für 90% der Gesamtvarianz werden drei Eigenvektoren verwendet. Für 95% sind zwei weitere Eigenvektoren notwendig. Für ein vollständiges Modell werden die ersten 13 Eigenvektoren benötigt, alle weiteren tragen derart geringfügig zur Gesamtvarianz bei, dass sie vernachlässigt werden können. Der Fehler beläuft sich hierbei auf 1.4158×10^{-15}.