Einfache Rechnungen per Hand zur PCA und ICA

Für eine einfache Handrechnung empfiehlt es sich, ein analytisch einfach lösbares Beispiel zu wählen, bei dem man aus der Theorie weiß, was zu erwarten ist.

PCA

Für das Beispiel der PCA ist dies mit dem Beispiel aus dem Vorlesungsskript, S. 135, gegeben. Hierbei gibt es nur Muster **x** = $(x_1,x_2)^T$, deren beide Komponenten x_1 und x_2 miteinander korreliert sind und durch die Beziehung $x_2 = ax_1$ charakterisiert wind, so dass $\langle x_1x_2\rangle = a\langle x_1^2\rangle \neq 0$ gegeben ist. In der nachfolgenden Abbildung ist diese Situation am Beispiel einiger Musterpunkte gezeigt.

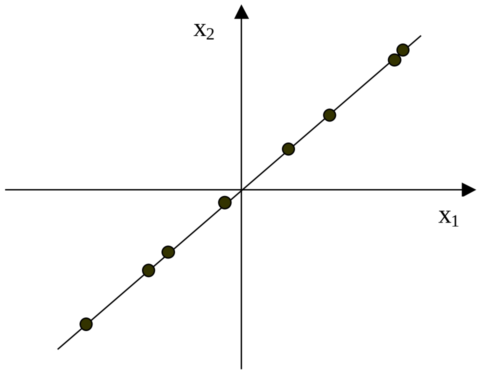

Abb. Fehler! Kein Text mit angegebener Formatvorlage im Dokument..**1** Rauschfrei korrelierte Muster

Die Hauptachse mit dem größten Eigenwert verläuft dann genau durch die Punkte und bildet eine Gerade mit der Steigung *a* durch den Nullpunkt. Der Basisvektor **w** ist dann analog zu dem Mustern gegeben durch

$$\mathbf{w} = \binom{w}{aw}$$

und in der normierten Form der Länge eins durch $\mathbf{w}^2 = 1 = w^2+a^2w^2 = w^2(1+a^2)$ oder $w^2 = 1/(1+a^2)$. Wählen wir uns a = 2 so ist damit

$$\mathbf{w} = \binom{\sqrt{0{,}2}}{2\sqrt{0{,}2}} = \binom{0{,}447}{0{,}894}$$

wobei für den dazu senkrechten Eigenvektor $\tilde{\boldsymbol{w}}$ mit dem Eigenwert null die Bedingung $\mathbf{w}^T\tilde{\boldsymbol{w}} = 0$ oder $w_1\tilde{w}_1 + aw_1\tilde{w}_2 = 0$ bzw. $w_1(\tilde{w}_1 + a\tilde{w}_2) = 0$ gilt. Da $w_1 \neq 0$ ist $\tilde{w}_1 = -a\tilde{w}_2$ oder

$$\tilde{\boldsymbol{w}} = \binom{-a\tilde{w}}{\tilde{w}} \text{ und in der auf eins normierten Form } \tilde{\boldsymbol{w}} = \binom{-2\sqrt{0{,}2}}{\sqrt{0{,}2}} = \binom{-0{,}894}{0{,}447}$$

Dies ist also das Konvergenzziel der PCA. Die Varianz (und damit der Eigenwert) von **w** ist von den gewählten Mustern abhängig. Angenommen, wir wählen uns drei Muster $\mathbf{x}_1 = (1,2)^T$, $\mathbf{x}_2 = (2,4)^T$, $\mathbf{x}_3 = (3,6)^T$. Dann ist der Mittelwert **m** mit

$$\mathbf{m} = \frac{1}{3}\left(\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}2\\4\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}3\\6\end{pmatrix}\right) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix}1+2+3\\2+4+6\end{pmatrix} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix}6\\12\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}2\\4\end{pmatrix}$$

Die Muster werden durch die Zentrierung (Transformation auf Mittelwert null) zu

$$\mathbf{X}_1 = \begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix} - \boldsymbol{m} = \begin{pmatrix}1-2\\2-4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-1\\-2\end{pmatrix}, \mathbf{X}_2 = \begin{pmatrix}2\\4\end{pmatrix} - \boldsymbol{m} = \begin{pmatrix}2-2\\4-4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}, \mathbf{X}_3 = \begin{pmatrix}3-2\\6-4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}$$

Für die Iteration starten wir mit einem zufällig gewählten Basisvektor, etwa $\mathbf{w}_1 = (1,1)^T$. Als Lernregel können wir die Hebbsche Lernregel verwenden, gefolgt von einer Normierung der Basisvektoren. Haben wir alle Muster bereits vorliegen, so können wir uns direkt den Erwartungswert errechnen und damit die Iteration zusätzlich beschleunigen. Der Erwartungswert der Hebbschen Lernregel ergibt eine Iteration mit der Kovarianzmatrix

$$\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{w}(t) + \gamma \mathbf{C}_{xx}\, \mathbf{w}$$

mit $\mathbf{C}_{xx} = \langle \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T \rangle = 1/3\ (\mathbf{x}_1\mathbf{x}_1^T + \mathbf{x}_2\mathbf{x}_2^T + \mathbf{x}_3\mathbf{x}_3^T)$

$$= \frac{1}{3}\left(\begin{bmatrix}1 & 2\\2 & 4\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0 & 0\\0 & 0\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}1 & 2\\2 & 4\end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix}2/3 & 4/3\\4/3 & 8/3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0{,}66 & 1{,}33\\1{,}33 & 2{,}66\end{bmatrix}$$

Die erste Iteration ergibt mit der Wahl $\gamma = 0{,}1$

$$\mathbf{w}'(t+1) = \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} + 0{,}1 \begin{bmatrix}2/3 & 4/3\\4/3 & 8/3\end{bmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} + 0{,}1\begin{pmatrix}2\\4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1{,}2\\1{,}4\end{pmatrix}$$

Die Normierung auf eins wird erreicht mit

$$\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{w}'/|\mathbf{w}'| = \frac{1}{\sqrt{1{,}2^2+1{,}4^2}}\begin{pmatrix}1{,}2\\1{,}4\end{pmatrix} = 0{,}54\begin{pmatrix}1{,}2\\1{,}4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0{,}65\\0{,}76\end{pmatrix}$$

Damit ist die erste Iteration abgeschlossen. Man sieht, dass die beiden Komponenten bereits unterschiedlich werden; die zweite überwiegt die erste.

Angenommen, der Basisvektor ist konvergiert. Den Eigenwert λ dazu erhalten wir dann, indem wir die Varianz aus den Projektionen der Muster auf **w** bilden, oder aber direkt durch

$$\lambda\mathbf{w} = \mathbf{C}_{xx}\,\mathbf{w} = \begin{bmatrix}0{,}66 & 1{,}33\\1{,}33 & 2{,}66\end{bmatrix}\begin{pmatrix}0{,}447\\0{,}894\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1{,}486\\2{,}98\end{pmatrix} \text{ so dass } \lambda = 1{,}486/0{,}447 \approx 2{,}98/0{,}894 \approx 3{,}3$$

Um den zweiten Basisvektor zu errechnen, muss nun die Mustermenge reduziert werden. Wir bilden

$$\mathbf{x}(2) = \mathbf{x}(1) - y\mathbf{w}$$

für *alle* Muster **x**. Für das erste Muster $\mathbf{x}_1$ erhalten wir

$$y_1 = \mathbf{w}^T\mathbf{x}_1(1) = \left(\sqrt{0{,}2}\ 2\sqrt{0{,}2}\right)\begin{pmatrix}-1\\-2\end{pmatrix} = -5\sqrt{0{,}2} \text{ und } \mathbf{x}_1\,(2) = \begin{pmatrix}-1\\-2\end{pmatrix} + 5\sqrt{0{,}2}\begin{pmatrix}\sqrt{0{,}2}\\2\sqrt{0{,}2}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$$

Es bleiben keine Musterkomponenten in eine andere Richtung übrig. Dies ist auch bei den anderen Mustern der Fall, so dass die Varianz der so erhaltenen Mustermenge null ist und für die restlichen Basisvektoren beliebige, orthogonale Basisvektoren genommen werden können; in diesem Fall einer.

ICA

Bei der ICA setzen wir auf den Ergebnissen der PCA auf. Zunächst renormieren wir die Basisvektoren zum Weissen der Muster.

$$\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{\lambda_1}}\,\boldsymbol{w} = \frac{1}{\sqrt{3{,}3}}\begin{pmatrix}0{,}447\\0{,}894\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0{,}246\\0{,}492\end{pmatrix}$$

Die Basisvektoren mit $\lambda = 0$ lassen sich allerdings nicht verwenden. Damit sind die Musterdimensionen auf die Anzahl der Dimensionen mit $\lambda>0$ reduziert.
In unserem konkreten Beispiel hätten wir nur noch eine Dimension erhalten, was eine ICA überflüssig macht, da nur noch max. eine Quelle erschlossen werden könnte.

Angenommen, wir hätten aber bei der PCA tatsächlich zwei nicht-verschwindende Eigenwerte (Varianzen in zwei Raumrichtungen) erhalten durch Hinzufügen passender Muster, die nicht genau auf der Diagonalen liegen und ein $\lambda_2 = 1$ erzeugen. Damit erhalten wir einen skalierten Eigenvektor

$$\mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{\lambda_2}}\,\widetilde{\boldsymbol{w}} = \frac{1}{\sqrt{1}}\begin{pmatrix}-0{,}894\\0{,}447\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-0{,}894\\0{,}447\end{pmatrix}$$

Das weitere Vorgehen für die ICA wird wie folgt erläutert.

Zunächst müssen wir die Muster transformieren, um sie für das Training der Basisvektoren (Zeilen der Matrix W) aufzubereiten. Die neuen Muster **v** erhalten wir durch Transformation durch die Matrix des Weissens:

$\mathbf{v} = \mathbf{A}\,\mathbf{x}$ mit der Matrix aus den skalierten Eigenvektoren $\mathbf{e}_i$ und den zentrierten Mustern **x**.

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix}0{,}246 & 0{,}492\\-0{,}894 & 0{,}447\end{bmatrix}\begin{pmatrix}-1\\-2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-1{,}23\\0\end{pmatrix},\quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},\ \mathbf{v}_3 = \begin{bmatrix}0{,}246 & 0{,}492\\-0{,}894 & 0{,}447\end{bmatrix}\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1{,}23\\0\end{pmatrix}, \ldots$$

Damit sind die Komponenten des Musters $\mathbf{x}_1$ bezüglich der neuen orthogonalen Basis aus skalierten Eigenvektoren ermittelt. Das Gleiche wird mit allen anderen Mustern durchgeführt, wobei bei den zusätzlichen Mustern die zweite Dimension nicht mehr null bleibt.
Nachdem wir die neue Mustermenge {**v**} generiert haben, können wir nun die Fixpunktiteration anwenden:

$\mathbf{w}'(t+1) = \langle(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{v})^3\boldsymbol{v}\rangle - 3\mathbf{w}$ sowie die Renormierung auf eins: $\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{w}'/|\mathbf{w}'|$

Dazu wählen wir uns einen zufälligen Startvektor, etwa $\mathbf{w} = (1,1)^T$, und bilden wir zuerst die Skalarprodukte der neuen Muster **v** mit **w:**

$(\mathbf{w}^T\mathbf{v}_1)^3\, \mathbf{v}_1 = \left((1\ \ 1) \begin{pmatrix} -1{,}23 \\ 0 \end{pmatrix} \right)^3 \mathbf{v}_1 = (-1{,}23)^3 \begin{pmatrix} -1{,}23 \\ 0 \end{pmatrix} = -1{,}86 \begin{pmatrix} -1{,}23 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2{,}288 \\ 0 \end{pmatrix}$

$(\mathbf{w}^T\mathbf{v}_2)^3\, \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

$(\mathbf{w}^T\mathbf{v}_3)^3\, \mathbf{v}_3 = \left((1\ \ 1) \begin{pmatrix} 1{,}23 \\ 0 \end{pmatrix} \right)^3 \mathbf{v}_3 = (1{,}23)^3 \begin{pmatrix} 1{,}23 \\ 0 \end{pmatrix} = 1{,}86 \begin{pmatrix} 1{,}23 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2{,}288 \\ 0 \end{pmatrix}$

$(\mathbf{w}^T\mathbf{v}_4)^3\, \mathbf{v}_4 = \ .....$

$(\mathbf{w}^T\mathbf{v}_5)^3\, \mathbf{v}_5 = \ .....$

und bilden dann den Erwartungswert

$$\langle (\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{v})^3 \boldsymbol{v} \rangle = \frac{1}{5} \Big((\mathbf{w}^T\mathbf{v}_1)^3\, \mathbf{v}_1 + (\mathbf{w}^T\mathbf{v}_2)^3\, \mathbf{v}_2 + (\mathbf{w}^T\mathbf{v}_3)^3\, \mathbf{v}_3 + (\mathbf{w}^T\mathbf{v}_4)^3\, \mathbf{v}_4 + (\mathbf{w}^T\mathbf{v}_5)^3\, \mathbf{v}_5 \Big)$$
$$= \frac{1}{5} \left(\begin{pmatrix} 2{,}288 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2{,}288 \\ 0 \end{pmatrix} + \cdots \right)$$

Von diesem Vektor wird dann $3\mathbf{w} = \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \end{pmatrix}$ abgezogen und der erhaltene Vektor $\mathbf{w}'(t+1)$ renormiert.
Dies war die erste Iteration. Mit dem so erhaltenen Vektor w(t+1) wird die Iteration und Renormierung erneut durchgeführt, um w(t+2) zu erhalten, und so fort bis zur Konvergenz.

Damit ist der erste Basisvektor $\mathbf{w}_1$ (die erste Zeile) der Matrix **W** über die Quelle mit der größten Kurtosis gefunden. Nun wird der Musterraum {**v**(1)} wieder reduziert, genauso wie oben bei der PCA. Wir bilden

$$\mathbf{v}(2) = \mathbf{v}(1) - z_1\mathbf{w}_1 \qquad\qquad \mathbf{z}_1 = \mathbf{w}^T\mathbf{v}_1$$

für *alle* Muster **v**. Für das erste Muster $\mathbf{v}_1$ erhalten wir

$$z_1 = \mathbf{w}^T\mathbf{v}_1(1) = (w1\ w2) \begin{pmatrix} 2{,}288 \\ 0 \end{pmatrix} = c1$$

und wir erhalten

$$\mathbf{v}_1(2) = \begin{pmatrix} 2{,}288 \\ 0 \end{pmatrix} - c1 \begin{pmatrix} w1 \\ w2 \end{pmatrix}$$

Analog dazu errechnen wir uns die restlichen Muster $\mathbf{v}_2(2),\ldots,\mathbf{v}_5(2)$.
Für den zweiten Basisvektor (zweite Zeile der Matrix **W**) führen wir erneut die obige Fixpunktiteration durch. Wir starten mit einem zu $\mathbf{w}_1$ orthogonalen, beliebigen Vektor $\mathbf{w}_2$ und bilden den Erwartungswert $\langle (\mathbf{w}_2^T\mathbf{v})^3\, \mathbf{v} \rangle$ über alle **v**(2) der reduzierten Mustermenge {**v**(2)}. Zusammen mit dem Term -3w2 erhalten wir einen Vektor, der in renormierter Form das Ergebnis der ersten Iteration des zweiten Basisvektors darstellt.
Wir fahren analog fort, bis alle *n* Basisvektoren der n-dim Muster **v** gefunden wurden.
Multiplizieren wir die ursprüngliche, nicht reduzierte Menge {**v**(1)} mit der Matrix **W**, so erhalten wir die Quellsignale {**s**}.