# Principal Components Analysis (PCA)

SE:MED 4. Semester

Werner Backfrieder



# Principal Components Analysis (PCA)

- Motivation
  - Fragestellung: Ist in den 64 Ableitungen eines MEG ein gemeinsames Signal enthalten?
  - Sind die Signale korreliert?
- Datenanalyse, finden gemeinsamer Merkmale (Features).

## Statistische Beschreibung von Signalen

- Signal $x_i$ kann als Zufallsvariable X beschrieben werden.
- Die Verteilung der Zufallsvariablen $\{X\}_N$ wird beschrieben durch:
  - Mittelwert $$\mu = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$$
  - Varianz=mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert:
$$\sigma^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \mu)^2$$



## Varianz- und Covarianz

- Varianz beschreibt die Streuung der Messwerte um ihren Mittelwert.
- Werden zwei Zufallsvariablen beobachtet, z.B, zwei Signale, Größe und Gewicht einer Personengruppe ..., beschreibt die Covarianz die Verteilung:
$$s_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(x_{ik} - \mu_i)(x_{jk} - \mu_j)$$
- Covarianz beschreibt das Produkt der Abweichung um den Mittelwert der einzelnen Verteilungen.

## Covarianz-Matrix

$$\Sigma = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{pmatrix}$$

- Covarianz-Matrix aus drei Signalen
  - quadratische Matrix
  - symmetrisch $s_{ij}=s_{ji}$
  - Varianzen der Signale entlang der Hauptdiagonalen



## Korrelation

$$r_{ij} = \frac{s_{ij}}{\sqrt{s_{ii}} \cdot \sqrt{s_{jj}}}$$

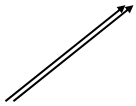
- Graphische Interpretation:
  - Inneres Produkt
  - Vektoren zentriert: $x'_j=x_i-\mu$
  - Normalisiert auf Länge 1: $|x_n|=1$
  - $r_{ij}$ ist Cosinus des Winkels zwischen den Vektoren

$$r_{ij} = \vec{x}_i \cdot \vec{x}_j = \left|\vec{x}_i\right|\left|\vec{x}_j\right| \cos(\alpha)$$

## Korrelation: Beispiele

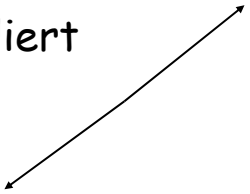
- positiv korreliert

  $r_{ij}=1$



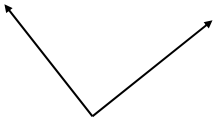
- Negativ korreliert

  $r_{ij}=-1$



- unkorreliert

  $r_{ij}=0$



Backfrieder-Hagenberg

## PCA

- In den Signalen werden sogenannte Hauptkomponenten (principal components, PCs) gesucht
- PCs sind nicht korreliert, d.h. in statistischer Sicht sind die Variablen unabhängig von einander
- => Korrelationsmatrix ist diagonal
  - Mischelemente sind Null $r_{ij}=0$ wenn i<>j

Backfrieder-Hagenberg

# Eigenwert-Eigenvektor

- Für bestimmte Vektoren (Unterräume) einer Matrix *A* gilt:

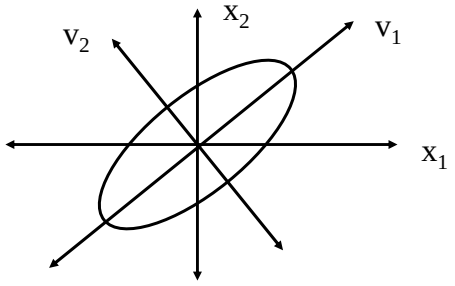
$$A \cdot v_i = \lambda_i v_i$$

- $\lambda_i$ Eigenwert
- $v_i$ Eigenvektor

- Bei einer nxn Matrix gibt es bis zu n verschiedene Eigenwerte und zugehörige Eigenvektoren
- Die Eigenvektoren stehen aufeinander normal: $\langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij}$

Backfrieder-Hagenberg

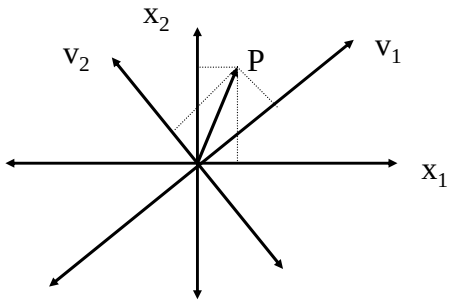
# Hauptachsenform




- Ellipse komplizierte Form im Koordinatensystem *x*
- Einfache Form im System *v*
- Koordinaten *v* repräsentieren Eigen-vektoren

Backfrieder-Hagenberg

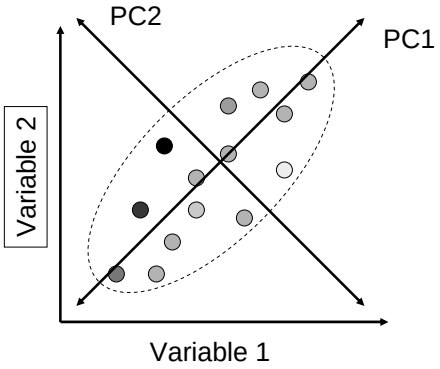
## Koordinaten-Trafo




- Koordinaten des Punktes P sind das innere Produkt des Ortsvektors mit den Basisvektoren der Koordinatensysteme:
- $P_{x1}=\langle x_1|P\rangle$ , $P_{x2}=\langle x_2|P\rangle \Leftrightarrow P_{v1}=\langle v_1|P\rangle$, $P_{v2}=\langle v_2|P\rangle$

Backfrieder-Hagenberg

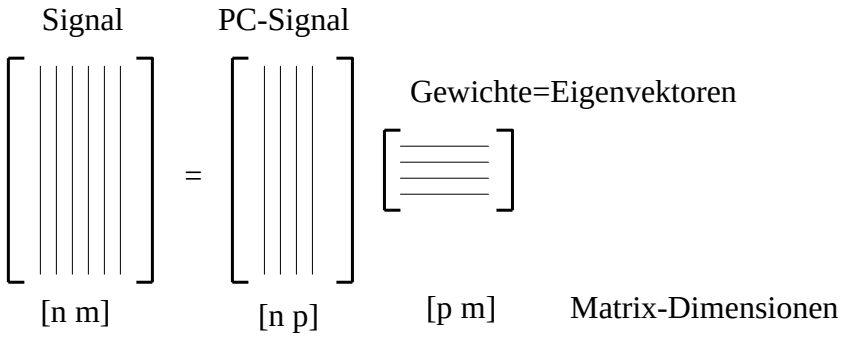
## PCA: Prinzipien




- Koordinaten-Trafo
- Ursprung im Mittelwert
- PC1 in Richtung größter Varianz
- Höhere Dimensionen normal auf alle anderen
- Unkorrelierte Variablen

Backfrieder-Hagenberg

## Datenmodell




- *m* Signale mit je *n* Samples
- *p<m* Principal Components
- Signal ist gewichtete Summe der PCs

$$S_i = \sum_{k=1}^{p} v_{ki} PC_k$$

Backfrieder-Hagenberg

## Anzahl der PCs

- p ist Anzahl der Komponenten
- Spur der Covarianz-Matrix enthält die Varianzen
- Summe der Spur ist Gesamtvarianz des Systems
- So viele Eigenwerte auswählen, dass gilt:

$$\frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{n} \lambda_i} \geq 0.95$$

- Wahl des Signifikanzniveaus willkürlich

Backfrieder-Hagenberg

## Berechnung der PC-Signale

- *S* Signalmatrix, Spalten enthalten Signale
- *U* Spalten enthalten *p* PC-Signale
- *V* enthält *p* Eigenvektoren multipliziert mit Wurzel der Eigenwerte
- $S=UV^T$ => $SV=UV^TV$ =>
- $U=SV(V^TV)^{-1}$
- Least Squares Lösung für Signal-Matrix



## PC-Interpretation

- PC-Signale sind *nicht korreliert*
- Zerlegung des Signals in unabhängige Variablen
- 1. PC ist mittleres Signal
- 2. PC orthogonale Abweichung ...
- PCs > p „sollen" nur Rauschen enthalten
- Rekonstruktion der ursprünglichen Signale aus p-Hauptkomponenten
  - Entfernen des Rauschens => PC Filter