

und deshalb:

$$\begin{aligned}
 J &= E\{\|\mathbf{x}\|^2 - \mathbf{e}'_1{}^T (\mathbf{xx}^T) \mathbf{e}'_1\} \\
 &= \underbrace{E\{\|\mathbf{x}\|^2\}}_{\sigma_x^2 \text{ Varianz von } x} - \mathbf{e}'_1{}^T \underbrace{E\{\mathbf{xx}^T\}}_{\mathbf{R}_{xx} \text{ Auto-korrelationsmatrix}} \mathbf{e}'_1
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow J = \text{Spur}(\mathbf{R}_{xx}) - \mathbf{e}'_1{}^T \mathbf{R}_{xx} \mathbf{e}'_1 \stackrel{!}{=} \min_{\mathbf{e}'_1}$$

Als Nebenbedingung geht ein, dass es sich bei dem neuen Basisvektor um einen Einheitsvektor handelt:

$$\|\mathbf{e}'_1\|^2 = \langle \mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_1 \rangle = 1$$

Der erste Term in J ist konstant und somit wird J minimiert, falls der folgende Ausdruck maximiert wird:

$$J' = \mathbf{e}'_1{}^T \mathbf{R}_{xx} \mathbf{e}'_1 \stackrel{!}{=} \max_{\mathbf{e}'_1}$$

Einbindung der Nebenbedingung in die Maximierung von  $J'$  durch einen Lagrange-Ansatz:

$$J'' = \mathbf{e}'_1{}^T \mathbf{R}_{xx} \mathbf{e}'_1 + \lambda(1 - \langle \mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_1 \rangle)$$

mit Hilfe von:  $\frac{\partial \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle}{\partial \mathbf{y}} = 2\mathbf{y}$  und:  $\frac{\partial (\mathbf{y}^T \mathbf{R} \mathbf{y})}{\partial \mathbf{y}} = 2\mathbf{R} \mathbf{y}$

ergibt sich aus der notwendigen Bedingung für ein Extremum:

$$\frac{\partial J''}{\partial \mathbf{e}'_1} = 2(\mathbf{R}_{xx} \mathbf{e}'_1 - \lambda \mathbf{e}'_1) \stackrel{!}{=} \mathbf{0}$$

und daraus die Eigenwertgleichung:

$$\mathbf{R}_{xx} \mathbf{e}'_1 = \lambda \mathbf{e}'_1$$

Eingesetzt in  $J'$  ergibt:  $J' = \lambda \mathbf{e}'_1{}^T \mathbf{e}'_1 = \lambda$

Dieser Ausdruck wird maximal, wenn man unter allen Eigenwerten den maximalen  $\lambda_1 = \lambda_{\max}$  und den dazugehörigen Eigenvektor aussucht.

Man spaltet nun den eindimensionalen Unterraum entlang  $\mathbf{e}'_1$  ab fährt fort in dem verbleibenden Unterraum mit der Suche nach dem zweiten Basisvektor  $\mathbf{e}'_2 \Rightarrow \lambda_2$  und dem zweitgrößten Eigenwert, usw.

## Approximationsfehler

Der Approximationsfehler mit  $M$  Komponenten ( $1 \leq M \leq N$ ) ergibt sich somit zu:

$$J_M = E\{\|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|^2\} = E\{\|\mathbf{x} - \underbrace{\mathbf{A}\mathbf{I}_M\mathbf{A}^T}_{\substack{\text{orthog.} \\ \text{Projektion } \mathbf{P}}} \mathbf{x}\|^2\} \quad \text{mit: } \mathbf{A} = [\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2, \dots, \mathbf{e}'_N]$$

auf den Unterraum, welcher durch die ersten  $M$  Eigenvektoren aufgespannt wird

$$J_M = E\{\|\mathbf{x} - \mathbf{P}\mathbf{x}\|^2\} = E\{\|\mathbf{x}\|^2 - \|\mathbf{P}\mathbf{x}\|^2\} = E\{\|\mathbf{x}\|^2 - \langle \mathbf{P}\mathbf{x}, \mathbf{P}\mathbf{x} \rangle\}$$

es gilt:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I} \quad (\mathbf{A}^T \text{ ist orthogonal})$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{R}_{\mathbf{xx}} \mathbf{A} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) \quad \text{mit: } \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \geq \lambda_N$$

die Projektionsmatrix ist idempotent und symmetrisch und daraus folgt:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{P}\mathbf{x}, \mathbf{P}\mathbf{x} \rangle &= \langle \mathbf{x}, \mathbf{P}^T \mathbf{P}\mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{P}^2 \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{P}\mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{A}\mathbf{I}_M\mathbf{A}^T \mathbf{x} \rangle \\ &= \langle \mathbf{I}_M \mathbf{A}^T \mathbf{x}, \mathbf{A}^T \mathbf{x} \rangle = \text{Spur}(\mathbf{I}_M \mathbf{A}^T (\mathbf{x}\mathbf{x}^T) \mathbf{A}) \end{aligned}$$

# Approximationsfehler

und eingesetzt in das Gütemaß ergibt:

$$\begin{aligned} J_M &= E\{\text{Spur}(\mathbf{xx}^T)\} - E\{\text{Spur}(\mathbf{I}_M \mathbf{A}^T (\mathbf{xx}^T) \mathbf{A})\} \\ &= \text{Spur}(\mathbf{R}_{\mathbf{xx}} - \mathbf{I}_M \underbrace{\mathbf{A}^T \mathbf{R}_{\mathbf{xx}} \mathbf{A}}_{\text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)}) \\ &= \text{Spur}(\mathbf{R}_{\mathbf{xx}}) - \sum_{i=1}^M \lambda_i = \sum_{i=M+1}^N \lambda_i \end{aligned}$$

d.h., der Approximationsfehler entspricht der Summe der nicht berücksichtigten Eigenwerte.

# Die Karhunen-Loève-Transformation (KLT)

Die Karhunen-Loève-Transformation ist somit definiert als:

$$\boxed{\mathbf{y} = \mathbf{A}^T \mathbf{x}} \quad \text{KLT}$$

$$\boxed{\mathbf{x} = \mathbf{A} \mathbf{y}} \quad \text{KLT}^{-1}$$

und es gilt:

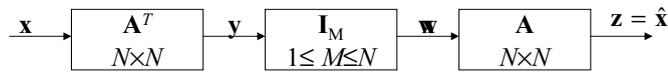
$$\mathbf{R}_{\mathbf{yy}} = E\{\mathbf{yy}^T\} = E\{\mathbf{A}^T (\mathbf{xx}^T) \mathbf{A}\} = \mathbf{A}^T \mathbf{R}_{\mathbf{xx}} \mathbf{A} = \mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N)$$

mit:  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \lambda_N$

Die KLT kann wie hier auf der Grundlage der *Korrelationsmatrix*, oder aber auch aufbauend auf die *Autokovarianzmatrix* berechnet werden (der Erwartungswert wird zuvor abgezogen):

$$\boxed{\mathbf{y} = \mathbf{A}^T (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}})}$$

## Zur Interpretation der KLT



$$z = \mathbf{A} \mathbf{I}_M \underbrace{\mathbf{A}^T \mathbf{x}}_{\substack{\text{Berechnung der} \\ \text{Fourierkoeffizienten } \alpha_i \\ \text{Projektion auf den durch} \\ \text{die } \mathbf{e}'_i \text{ aufgespannten Raum}}} \underbrace{\sum \alpha_i \mathbf{e}'_i}_{\substack{\text{Fourierreihe, Entwicklung nach den } \mathbf{e}'_i \\ \text{Projektion auf den Unterraum}}}$$

Projektion auf den Unterraum:

$$\mathbf{y} = \mathbf{I}_M \mathbf{A}^T \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{e}'_1, \mathbf{x} \rangle \\ \langle \mathbf{e}'_2, \mathbf{x} \rangle \\ \vdots \\ \langle \mathbf{e}'_M, \mathbf{x} \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_M \end{bmatrix}$$

Fourierreihe (Entwicklung nach den Spaltenvektoren von  $\mathbf{A}$ ):

$$z = \mathbf{A} \mathbf{w} = \sum_{i=1}^M \underbrace{\alpha_i}_{\text{FK}} \cdot \underbrace{\mathbf{e}'_i}_{\substack{\text{Spaltenvektoren} \\ \text{von } \mathbf{A}}}$$

Minimierung des Fehlers ist gleichbedeutend mit der Maximierung der Energie (Länge<sup>2</sup>) im transformierten Bereich oder der Maximierung der Quadratsumme der Fourierkoeffizienten.

## KLT für Bilder (2D)

Obiger Ansatz lässt sich direkt übertragen auf einen Vektor, welcher aus *gestapelten Zeilenvektoren* einer *Bildmatrix* der Dimension  $N \times N$  besteht (da es ja nur um den Gesamtsummenfehler geht!). Damit ist jedoch ein Eigenwertproblem für symmetrische Matrizen der Dimension  $N^2 \times N^2$  zu lösen. Ein Eigenwertproblem der für eine Matrix  $N \times N$  benötigt  $O(N^3)$  Berechnungsschritte, also hier:  $O(N^6)$

Lässt sich hingegen ein Ensemble von Bildern  $\mathbf{X} := \{\mathbf{X}_i\}$  der Dimension durch das dyadische Produkt zweier eindimensionaler Ensembles der Dimension  $N \times 1$

$$\mathbf{x}^1 := \{\mathbf{x}_i^1\} \quad \mathbf{x}^2 := \{\mathbf{x}_i^2\}$$

modellieren gemäß:

$$\mathbf{X} := \mathbf{x}^1 \mathbf{x}^{2T}$$

## KLT für Bilder (2D)

d.h.  $\mathbf{X}$  ist separierbar! Damit läßt sich für jedes eindimensionales Ensemble eine KLT berechnen und man erhält:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}^{1T} (\mathbf{x}^1 \mathbf{x}^{2T}) \mathbf{A}^2 = \mathbf{A}^{1T} \mathbf{X} \mathbf{A}^2$$

2D-KLT bei separierbaren Bildern

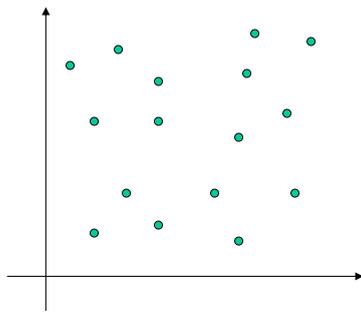
Damit sind nur 2 Eigenwertprobleme der Dimension  $N \times N$  zu berechnen. Dies gibt einen Rechenzeitgewinn von:  $O(N^6) / O(N^3) = O(N^3)$

Die Transformation mit separierbarem Kern reduziert sich ebenfalls im Aufwand, nämlich von  $O(N^4)$  auf  $O(2N^3)$ .

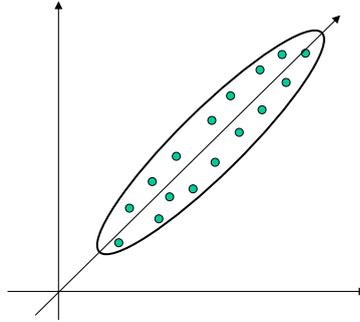
## Eigenschaften der KLT

- Vorteile:
  - Die KLT ist optimal (bzgl. des quadr. Fehlers) im Hinblick auf bestmögliche Darstellung in Unterräumen mit orthogonaler Basis. Falls Vektorelemente stark korreliert sind, ergibt sich eine hohe Informationsverdichtung in wenigen Elementen der KLT. Die KLT profitiert von starken Korrelationen in den Vektorelementen.
  - Da  $\mathbf{R}_{yy}$  eine Diagonalmatrix ist, sind die Werte in  $y$  unkorreliert!
- Nachteile:
  - Die KLT ist *datenabhängig* und muss für jeden Datensatz individuell berechnet werden.
  - Außerdem existiert für die KLT *kein schneller* Algorithmus.

# Datenreduktion in Abhängigkeit vom Korrelationsgrad



Daten unkorreliert (weißer Prozess)  
KLT hat keine Bedeutung

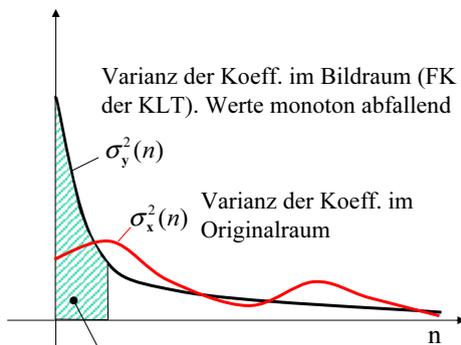


Daten stark korreliert. KLT bringt hohen Gewinn.

Extremfall: Bilder mit konstantem Grauwert  
(hier genügt ein Vektor zur Darstellung)



# Eigenschaften der KLT



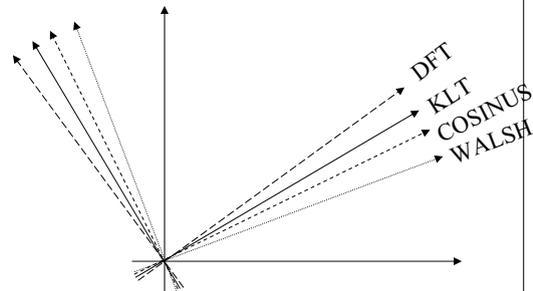
Varianz der Koeff. im Bildraum (FK der KLT). Werte monoton abfallend

$$\sigma_y^2(n)$$

Varianz der Koeff. im Originalraum

$$\sigma_x^2(n)$$

Jede Teilsumme ist unabhängig von  $M$  maximal!



Verhalten unterschiedlicher unitärer Transformationen

# Weitere Eigenschaften der KLT

Die KLT sorgt dafür, dass die Varianzen der transformierten Merkmale (Hauptdiagonalelemente der Kovarianzmatrix) maximal ungleichgewichtig sind (minimale Entropie):

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}^T (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_x)$$

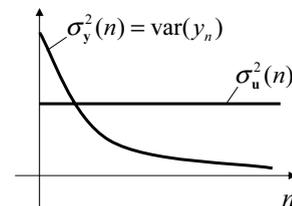
Eine Maximierung der Entropie, oder eine konstante Varianz aller Merkmale erreicht man durch eine **Whitening-Transformation**:

$$\mathbf{u} = \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} \mathbf{A}^T (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_x) \quad \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} = \text{diag}(\lambda_1^{1/2}, \lambda_2^{1/2}, \dots, \lambda_N^{1/2})$$

Alle Merkmale haben die gleiche Varianz  $\text{var}(u_i)=1$  (sphärisch invariante Verhältnisse). Die Energie ist gleichmäßig auf alle Merkmale verteilt.

Durch Multiplikation mit einer Diagonalmatrix bleiben die Variablen unkorreliert!

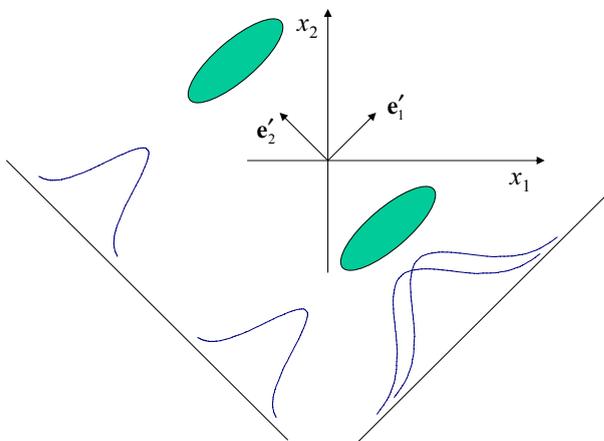
Whitening wird z.Bsp. benötigt, um größtmögliche Robustheit beim Wegfall einer Komponente zu bekommen (z.Bsp. in der Übertragungstechnik).



# Weitere Eigenschaften der KLT

Die Optimalität der KLT bezüglich des minimalen Fehlerquadrats führt zu einer bestmöglichen Informationsverdichtung und erlaubt uns eine Selektion der  $M$  dominanten Merkmalen von  $N$  Beobachtungswerten.

Dies führt jedoch nicht immer zwingend auf eine bestmögliche Klassenseparation. Eine diesbezügliche Optimierung führt zur sogenannten **Diskriminanzanalyse**.



In diesem Beispiel überlappen die Merkmale des ersten Eigenvektors, während das Merkmal des zweiten Eigenvektors die Klassen trennt!