# A review on robust principal component analysis

Eunju Lee<sup>a</sup>, Mingyu Park<sup>a</sup>, Choongrak Kim<sup>1,a</sup>

<sup>a</sup>Department of Statistics, Pusan National University

#### **Abstract**

Principal component analysis (PCA) is the most widely used technique in dimension reduction, however, it is very sensitive to outliers. A robust version of PCA, called robust PCA, was suggested by two seminal papers by Candès *et al.* (2011) and Chandrasekaran *et al.* (2011). The robust PCA is an essential tool in the artificial intelligence such as background detection, face recognition, ranking, and collaborative filtering. Also, the robust PCA receives a lot of attention in statistics in addition to computer science. In this paper, we introduce recent algorithms for the robust PCA and give some illustrative examples.

Keywords: dimension reduction, low dimension, singular values decomposition, sparse matrix

### 1. 서론

자원축소(dimension reduction)는 통계학이 지향하는 가장 큰 목표중의 하나이며, 차원 축소의 방법중에서 오래 전부터 가장 널리 사용되는 것은 바로 주성분분석(principal component analysis, PCA)이다. 주성분분석을 다룬 책은 매우 많이 있으며 그 중에서도 Jolliffe (2002)가 가장 자주 인용되는 책 중의 하나이다. 주성분분석은 여러 가지 장점에도 불구하고 이상치(outliers)에 매우 민감하여 이를 강건화(robustify)하기 위한 연구가 오랫동안 지속되었는데 강건화의 방법으로 영향력 함수의 이용, 다변량 다듬기(multivariate trimming), 교차최소법(alternating minimization) 등을 들 수 있다. 하지만 이러한 방법들은 계산가능성의 관점에서 제대로 된 해결책을 제시하지 못하였는데 Candès 등 (2011)과 Chandrasekaran 등 (2011)은 거의 같은 시기에 서로 독립적인 연구에 의해 이 문제의 해결책을 제시하였으며 이후 이러한 연구 방법을 강건 주성분분석(robust PCA)라고 부르게 되었고 이 두 논문을 강건 주성분분석의 효시로 삼고 있다. 두 연구는 같은 주제에 대한 것이지만 접근법에 차이가 있으며 해를 구하는 알고리즘도 다르다. 이후 이 분야의 연구는 대부분 Candès 등 (2011)의 방법을 계승 발전시키는 방향으로 진행되고 있다.

우리가 관측하는 자료는 흔히 반복 측정(표본)을 나타내는 행(row)과 변수를 나타내는 열(column)로 구성된 행렬 Y로 표현된다. 기존의 주성분분석은 관측한 행렬의 차수(변수의 갯수)를 줄여주는 방법인데 앞에서 언급한 것 처럼 이상치에 매우 민감하다 (Jolliffe, 2002). 강건 주성분분석은 관측한 자료 행렬을 차수가 낮은 행렬 L과 이상치로 구성된 성긴(sparse) 행렬 S의 합으로 표현해 주는 방법이다. 이러한 강건 주성분분석의 성질을 이용하여 여러 가지 인공지능에 이용되는데 대표적인 몇 가지 예는 다음과 같다. 먼저 비디오 감시 (video surveillance)문제를 생각해 보자. 어느 주어진 공간에서 책상 등 고정되어 있는 부분(background)과 사람 등 움직이는 부분(foreground)을 분리하는 문제를 들 수 있는데 장시간 녹화한 이러한 비디오는 엄청난 갯수의 픽셀로 구성되며 고정되어 있는 부분은 차수 낮은 행렬 L로 간주하고 움직이는 사람은 성긴(sparse)

This work was supported by a 2-year Research Grant of Pusan National University.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Corresponding author: Department of Statistics, Pusan National University, Busandaehak-ro 63 beon-gil 2, Gumjeonggu, Busan 46288, Korea. E-mail: crkim@pusan.ac.kr

행렬 S로 간주할 수 있다. 또 다른 예로 안면인식(face recognition)을 들 수 있다. 사람의 얼굴은 그 형태가 비슷하여 낮은 차원의 공간으로도 잘 근사시킬 수 있다. 하지만 실제의 경우 본인의 코 등에 의한 그림자(self shadowing)나 주변 빛의 밝기 등에 의해 안면 인식이 힘든 경우가 많다. 얼굴 사진 Y에서 그림자 등의 이상치 S를 제거한 사진 L을 찾기 위해 강건 주성분분석을 사용한다. 그 외에도 설명력이 낮은 정보를 삭제하고 설명력이 높은 정보를 선택하는 목적의 잠재의미분석(latent semantic indexing), 영화, 게임, 도서 등에서 어떤 개인의 취향을 단편적으로 모아 이를 분석한 다음 이를 바탕으로 다른 제품을 소개하는 시스템 순위와 협력적 필터링(ranking and collaborative filtering) 등에도 강건 주성분분석이 유용하게 사용된다.

본 논문에서는 강건 주성분분석을 소개하고 2011년 두 논문이 발표된 이후 지금까지 이 분야의 연구 동향을 소개하고자 한다. 2절에서 강건 주성분 분석을 정의한 다음 강건 주성분분석을 위해 지금까지 제안된 알고리 즘들을 간략히 소개하고, 그 중에서도 Zhang과 Yang (2018)이 제안한 다양체(manifold)를 이용한 알고리즘을 자세히 소개한다. 이 알고리즘은 지금까지 제안된 것중에서 가장 효율적인 알고리즘으로 알려져 있다. 또한, 가상적 자료에 의한 간단한 예를 소개하고, 실제 자료에 근거한 강건 주성분분석의 활용을 소개한다. 3절에서 결론 및 현재 논의되는 중요한 문제들을 제시한다.

## 2. 강건 주성분분석

#### 2.1. 기호와 정의

우리가 관측하는  $n \times p$  자료 행렬 Y는 흔히 오차 또는 이상치로 인해 오염된 자료(corrupted observations)인 경우가 많다. 또한, 인공지능을 위한 기계학습에서 n과 p는 매우 큰 값을 가지는 경우가 많으며 흔히 수 천에서 수 억에 이를 수 있는데 영상자료, 마이크로어레이 자료 등이 이에 해당된다. 관측된 자료 Y로 부터 찾고자하는 행렬은 우리가 원하는 시그널(signal)을 나타내는 오염되지 않은 행렬로서 차수가 낮은(low rank) 행렬이라 가정하며 L로 나타낸다. 한편, 오차 및 이상치 등 오염(corruption)을 나타내는 행렬은 0 아닌 원소가 매우작다(sparse)고 가정하고 이를 S라 하자. Y = L + S라 가정하며 강건 주성분분석은 관측된 Y로 부터 L과 S를 찾아내는 것이다. 그러나 낮은 차수 행렬의 집합은 비볼록(nonconvex) (Candès 등, 2011; Zhang과 Yang, 2018)이므로 해를 찾을 수 있는 계산가능한 알고리즘이 존재하지 않는다(NP- hard 문제). 이 문제를 극복하기위하여 Candès 등 (2011)과 Chandrasekaran 등 (2011)은 볼록완화(convex relaxation)된 형태로 다음과 같은 목적 함수를 제시하였다.

$$\underset{LS}{\operatorname{arg \, min}} \ \|L\|_* + \lambda \|S\|_1 \quad s.t. \quad Y = L + S \tag{2.1}$$

여기서,  $\|A\|_{\bullet}$ 는 행렬 A의 뉴클리어 노름(nuclear norm) 또는 Schatten 1-노름을 나타낸다. 즉, 행렬 A의 정칙치 (singular values)들의 합이다. 한편,  $\|A\|_{\bullet}$ 는 행렬 A의  $l_1$ -노름으로 행렬 A의 원소들의 절댓값을 모두 합한 것이며,  $\lambda$ 는 조율모수(tuning parameter)를 나타낸다. 한편, 기존의 주성분분석은 주어진 행렬 Y에 대해,

$$\underset{L}{\arg\min} \|Y - L\|_2 \quad s.t. \quad \operatorname{rank}(L) \le k \tag{2.2}$$

를 찾는 것이다. 단, 여기서  $\|A\|_2$ 는 행렬 A의 2-노름(2-norm)을 나타낸다. 즉, 행렬 A의 가장 큰 정칙치를 나타내고, k는 n에 비해 매우 작은 양수다.

L을 정칙치분해(singular values decomposition)하면

$$L = U\Sigma V^{T} = \sum_{i=1}^{r} \sigma_{i} u_{i} v_{i}^{T}, \qquad (2.3)$$

로 표현할 수 있는데 여기서 r은 L의 차수,  $\sigma_1, \ldots, \sigma_r$ 은 양의 정칙치,  $U = (u_1, \ldots, u_r)$ 와  $V = (v_1, \ldots, v_r)$ 은 각각 좌정칙 벡터와 우정칙 벡터들로 이루어진 행렬들이다. 식(2.1)의 식별성(identifiability)을 가능하게 하기

위해 강건 주성분분석에서는 흔히 두 가지 가정이 필요하다 (Candès 등, 2011; Netrapalli 등, 2014; Yi 등, 2016; Zhang과 Yang, 2018).

- 가정 1 : 주어진  $0 < \gamma < 1$ 에 대하여 S의 각 행은 기껏해야  $\gamma n$ 개의 0아닌 원소를 가지고, 각 열은 기껏해야  $\gamma p$ 개의 0아닌 원소를 가진다.
- 가정 2 : L은  $\mu$ -일치(coherent)해야 한다. 즉, 정칙치 분해에 의해  $L = U\Sigma V^T$ 로 표현할 경우, 다음과 같은 조건을 만족하는 불일치 모수(incoherence parameter)  $\mu$ 가 존재한다.

$$||U||_{2,\infty} \le \sqrt{\frac{\mu r}{n}}, \quad ||V||_{2,\infty} \le \sqrt{\frac{\mu r}{p}}, \tag{2.4}$$

을 만족하는 불일치 모수(incoherence parameter)  $\mu$ 가 존재한다. 단, 여기서  $\|\cdot\|_{2,\infty} = \max_{\|Z\|_2=1} \|Az\|_{\infty}$ 이고,  $\|x\|_{\infty} = \max_i |x_i|$ 이다. 하지만 이러한 볼록 완화는 매 반복시  $O(np \min(n,p))$ 만큼의 계산량을 요구하므로 만약 n과 p가 클 경우 거의 계산이 불가능해 진다. 이를 위해 그간 계산량을 줄일 수 있는 다양한 연구들이 진행되어 왔으며 그 중에서도 대표적인 몇 가지 연구 결과는 다음과 같다.

Netrapalli 등 (2014)는 교차투사(alternating projection)법을 이용한 알고리즘으로 계산량을  $O(r^2np)$ 로 조금 줄였으며, Yi 등 (2016)은 L을 두 행렬의 곱으로 분해한 뒤 교차 기울기 하강 알고리즘(alternating gradient descent algorithm)을 제안하였으며 계산량을 O(rnp)로 더욱 줄였다. Cai 등 (2019)은 교차투사법을 보다 효율적으로 계산할 수 있는 가속교차투사법(accelerated alternating projections)을 제안하기도 하였다. 한편, Zhang과 Yang (2018)은 이 L의 다양체(manifold)상에서 기울기 하강 알고리즘을 제안하였으며 계산량은 O(rnp)이지만 Yi 등 (2016)의 알고리즘보다 L의 조건수(condition number)를 나눈 만큼 줄었고 수렴속도 또한 더 빨라졌음을 보였다. 최근에는 Chen 등 (2021)이 강건 주성분분석의 최적화(optimization)에 대하여 이론적으로 뒷받침하는 연구가 시행되었다. 본 논문에서는 지금까지 제안된 여러 알고리즘 중에서 가장 효율적이라고 알려져 있는 Zhang과 Yang (2018)의 알고리즘을 자세히 소개한다.

#### 2.2. 평활 다양체 알고리즘

평활 다양체(smooth manifold)  $M \subset \mathbb{R}^p$  와 미분가능한 함수  $f: M \to \mathbb{R}$ 가 주어져 있을 때,

$$\min_{x \in \mathcal{M}} f(x) \tag{2.5}$$

를 찾기위한 기울기 하강 알고리즘(gradient descent algorithm)은 다음과 같은 3가지 단계로 이루어진다 (Figure 1 참조).

- 단계 1. 유클리디언 기울기(Euclidean gradient)  $\nabla f(x)$ 를 계산한다.
- 단계 2. 리만 기울기(Riemannian gradient)  $P_{T_xM}\nabla f(x)$ 를 계산한다. 여기서,  $P_{T_xM}$ 는 접공간(tangent space)  $T_xM$ 에 대한 사영 연산자(projection operator)를 나타낸다.
- 단계 3. 철회 작용소(retraction operator)  $R_x:T_xM\to M$ 를 정의한다. 이는 접공간에서 다양체로 보내는 함수로서 x는,

$$x^{+} = R_{x} \left( -\eta P_{T_{x} \mathcal{M}} \nabla f(x) \right) \tag{2.6}$$

로 갱신(update)되는데 여기서  $\eta$ 는 학습율(learning rate)을 나타낸다.

이제 이러한 기울기 하강 알고리즘을 낮은 차수 행렬에 적용하기 위해 M을 차수 r인 모든  $n \times p$  행렬에 대한 다양체라 하자. 이제 차수 r인 행렬  $Y \in M$ 가 주어졌을 때 접공간  $P_{T_yM}$ 와 철회 작용소  $R_y$ 의 구체적 형태는 다음과 같음을 보일 수 있다 (Absil 등, 2009; Absil와 Oseledets, 2015). 먼저 정칙치분해(singular values

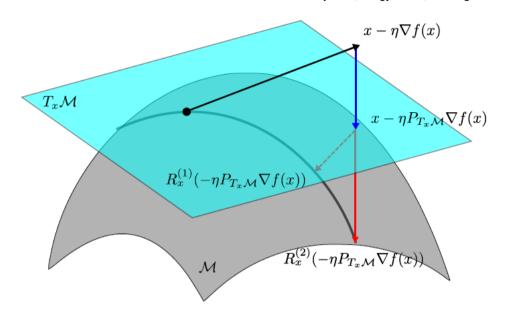


Figure 1: The gradient descent algorithm to solve  $\min_{x \in \mathcal{M}} f(x)$ , where  $\mathcal{M} \subset R^p$  is a smooth manifold and  $f: \mathcal{M} \to R$  is a differentiable function (Source: Figure 1 in Zhang and Yang (2018)).

decomposition)에 의하여  $Y = U\Sigma V^T$ 로 표현할 수 있으며 이 때 접공간  $T_v M$ 은,

$$T_{y}\mathcal{M} = \left\{ \mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{V}^{T} + \mathbf{U}\mathbf{U}^{T}\mathbf{B}, \ \mathbf{A} \in R^{n \times p}, \ \mathbf{B} \in R^{n \times p} \right\}$$

와 같이 정의된다. 또한, 사영 연산자  $P_{T_vM}$ 는,

$$P_{T_{y}M}(\boldsymbol{D}) = \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{T}\boldsymbol{D} + \boldsymbol{D}\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{T} - \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{T}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{T}, \ \boldsymbol{D} \in R^{n \times p}$$

으로 주어진다. Zhang과 Yang (2018)은 평활 다양체의 성질을 이용하여 낮은 차수 행렬 L을 구하는 알고리즘으로  $f(L)=1/2\|g(L-Y)\|_F^2$ 를 최소화하는 것을 제안하였는데 여기서  $g:R^{n\times p}\to R^{n\times p}$ 는 강절단(hard thresholding)을 나타내는 함수이며,  $\|A\|_F$ 는 행렬 A의 Frobenius 노름이다. Zhang과 Yang (2018)은 다양한 자료를 통해 기존의 다른 알고리즘보다 더 빠르고 정확도가 더 뛰어난 것이라고 주장하였으며 이 알고리즘은 R패키지 morpca를 통해 구현된다.

#### 2.3. 예제

두번째 예는 https://personal.ie.cuhk.edu.hk/ ccloy/downloads\_mall\_dataset.html 에서 가져온 동영상자료(Y) 로서 고정된 부분(L)과 움직이는 사람(S)을 분리해 내는 것으로 이 또한 강건 주성분분석이 매우 성공적으로

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 37 \\ 107 & 4 & 6 & 8 \\ 3 & 6 & 9 & 12 \\ 4 & 8 & 143 & 16 \\ 5 & 10 & 15 & 20 \\ 6 & 79 & 18 & 24 \end{pmatrix} \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 6 & 8 \\ 3 & 6 & 9 & 12 \\ 4 & 8 & 12 & 16 \\ 5 & 10 & 15 & 20 \\ 6 & 12 & 18 & 24 \end{pmatrix} \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 33 \\ 105 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 131 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 67 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Figure 2: The corrupted matrix Y is decomposed into the low-dimensional matrix L and the sparse matrix S using the robust PCA.



Figure 3: The robust PCA decomposes the original video surveillance data (Y) into the background (L) and the foreground (S).

적용됨을 알 수 있다. 이러한 영상자료에 강건 주성분분석을 적용하지 않으면 기존의 주성분분석으로는 고정 된 부분과 움직이는 부분을 결코 분리해 낼 수 없다.

### 3. 결론 및 향후 연구과제

차원 축소를 위한 통계적 방법중에 주성분분석이 가장 널리 사용되고 있으나 주성분 분석의 여러 가지 장점에도 불구하고 이상치에 매우 민감하여 이를 강건화 하기 위한 여러 가지 방법이 제시되었다. 그 중에서도 Candès 등 (2011)과 Chandrasekaran 등 (2011)이 제안한 강건 주성분분석이 계산 가능하며 가장 효율적인 방법으로 알려져 있으며 최근 비디오 감시, 안면인식, 잠재의미분석 등의 인공지능분야에 많이 사용되고 있다. 본 논문에서는 강건 주성준 분석의 개념과 최근 제안된 가장 효율적인 알고리즘을 소개하였다. 또한, 가상적자료를 통해 강건 주성분분석의 이해를 돕고 실제 자료에 근거한 예제를 소개하였다.

최근 강건 주성분분석을 보다 현실적으로 모형화하기 위해 오차항을 첨가한 모형을 고려하고 있다 (Lyu 등, 2019; Chen 등, 2021).

$$bY = L + S + E,$$

인데 여기서 E의 각 원소는 정규분포를 따른다고 가정한다. 이 가정은 기존의 모형보다 더 현실적인 것으로 서 이를 구현하기 위한 여러 알고리즘 및 추정치의 성질에 대한 연구가 진행중이다. 아울러, Zhang과 Yang (2018)의 다양체를 비선형 다양체(nonlinear manifold)로 확장하는 연구가 시도되고 있다. 또한, 대부분의 알고리즘이 L의 차수를 알려져 있다고 가정하는데 이에 대한 추정 문제도 해결되어야 할 중요한 연구과제라 생각되다.

#### References

- Absil PA, Mahony R, and Sepulchre R (2009). *Optimization Algorithms on Matrix Manifolds*, Princeton University Press.
- Absil PA and Oseledets IV (2015). Low-rank retractions: a survey and new results, *Computational Optimization* and *Applications*, **62**, 5–29.
- Cai HQ, Cai JF, and Wei K (2019). Accelerated alternating projections for robust pricipal component analysis, *Journal of Machine Learning Research*, **20**, 1–33.
- Candès EJ, Li X, Ma Y, and Wright J (2011). Robust principal component analysis? *Journal of the ACM*, **58**, 1–37.
- Chandrasekaran V, Sanghavi S, Parrilo PA, and Willsky AS (2011). Rank-sparsity incoherence for matrix decomposition, *SIAM Journal on Optimization*, **21**, 572–596.
- Chen Y, Fan J, Ma C, and Yan Y (2021). Bridging convex and nonconvex optimization in robust PCA: Noise, outliers, and missing data, *The Annals of Statistics*, **49**, 2948–2971.
- Jolliffe IT (2002). Principal Component Analysis (2nd ed.), Springer.
- Lyu H, Sha N, Qin S, Yan M, Xie Y, and Wang R (2019). *Manifold Denoising by Nonlinear Robust Principal Component Analysis*, arXiv:1911.03831
- Netrapalli P, Niranjan UN, Sanghavi S, Anandkumar A, and Jain P (2014). Non-Convex Robust PCA, arXiv:1410.76
- Zhang T and Yang Y (2018). Robust PCA by manifold optimization, *Journal of Machine Learning Research*, **19**, 1–39.
- Yi X, Park D, Chen Y, and Caramanis C (2016) Fast algorithms for robust PCA via gradient descent. In *Advances in Neural Information Processing Systems* 29: Annual Conference on Neural Information Processing Systems, Barcelona, Spain, 4152–4160.

Received December 23, 2021; Revised January 14, 2022; Accepted January 17, 2022

# 강건 주성분분석에 대한 요약

이은주<sup>a</sup>, 박민규<sup>a</sup>, 김충락<sup>1,a</sup>

<sup>a</sup>부산대학교 통계학과

요 약

차원 축소를 위한 통계적 방법중에 주성분분석이 가장 널리 사용되고 있으나 주성분 분석의 여러 가지 장점에도 불구하고 이상치에 매우 민감하여 이를 강건화 하기 위한 여러 가지 방법이 제시되었다. 그 중에서도 Candès 등 (2011)과 Chandrasekaran 등 (2011)이 제안한 강건 주성분분석이 계산 가능하며 가장 효율적인 방법으로 알려져 있으며 최근 비디오 감시, 안면인식 등의 인공지능분야에 많이 사용되고 있다. 본 논문에서는 강건 주성준 분석의 개념과 최근 제안된 가장 효율적인 알고리즘을 소개한다. 아울러 실제 자료에 근거한 예제를 소개하고 향후 연구분야도 제안한다.

주요용어: 낮은 차수, 성긴 행렬, 정칙치 분해, 차원축소