KFDA Namtaek

권남택, 오정민, 유경민

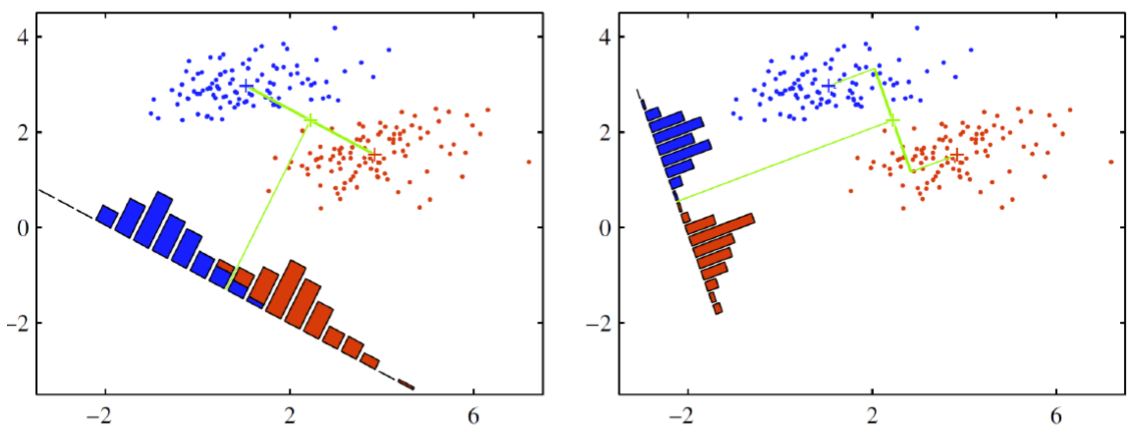
2021년 2월 23일

1 KFDA

KFDA는 Kernel Fisher Disciminant Analysis의 줄임말이다. 판별분석에 커널버전이다. 따라서 판별분석에 대해 먼저 다루고, KFDA를 다루자.

1.1 Linear Discriminant Analysis (선형판별분석)

1.1.1 LDA의 아이디어

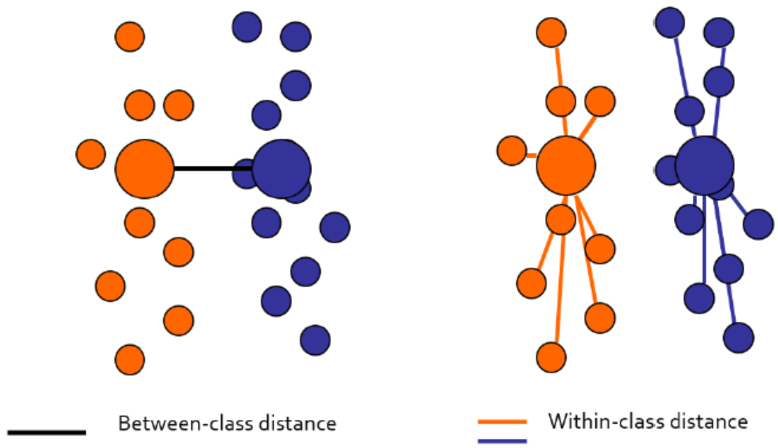


LDA는 두 클래스를 가장 잘 구분하는 하나의 축을 찾는 것이다. PCA같은 경우에는 분산을 최대로 보존하는 여러개의 축을 찾았지만, LDA는 단 하나의 축에 Projection 시킨다. 사진처럼 하나의 축에 Projection 시키는 것은 되게 다양할 수 밖에 없는데, 어떻게 해야 최적의 축 (기저, Basis) 를 찾을 수 있을까?

두 개의 클래스가 있다고 가정하자. 왼쪽의 사진처럼 축을 찾으면, 두 클래스가 겹치는 부분이 많다. 반면에 오른쪽 사진처럼 축을 잡으면, 두 클래스가 비교적 명확하게 나뉘는 것을 확인할 수 있다. 두 클래스는 명확하게 나뉘면서, 동시에 같은 클래스는 충분히 밀집해있어야 좋은 분류가 가능하다고 직관적으로 파악 가능하다.

이를 LDA의 언어로 말하자면,

1) 다른 클래스 사이의 거리 (분산) 는 최대화 하면서,
2) 같은 클래스 사이의 거리 (분산) 는 최소화해야 한다.



1.1.2 Notation

우리가 찾아야하는 축은 w이다. x를 새로운 기저로 Projection을 시키면, 다음과 같다.

$$y = \mathrm{w}^T \mathrm{x}$$

각 클래스의 중심은 다음과 같이 정의하자.

$$\mathrm{m}_1 = \frac{1}{N_1} \sum_{n \in C_1} \mathrm{x}_\mathrm{n}, \qquad \mathrm{m}_2 = \frac{1}{N_2} \sum_{n \in C_2} \mathrm{x}_\mathrm{n}$$

1) 먼저 다른 클래스 사이의 거리를 계산하자.

$$m_2 - m_1 = \mathrm{w}^T (\mathrm{m}_2 - \mathrm{m}_1)$$

2) 그 다음 각각 클래스 내의 분산을 계산하자.

$$s_k^2 = \sum_{n \in C_k} (y_n - m_k)^2$$

클래스 사이의 거리는 커져야하고, 클래스 내의 분산은 작아져야하기 때문에, 각각을 분자와 분모로 넣으면 최대화하는 문제로 바꿀수 있다.

$$J(\mathrm{w}) = \frac{(m_2 - m_1)^2}{s_1^2 + s_2^2} = \frac{\mathrm{w}^T \mathrm{S}_B \mathrm{w}}{\mathrm{w}^T \mathrm{S}_W \mathrm{w}}$$

$$\mathrm{S}_B = (\mathrm{m}_2 - \mathrm{m}_1)(\mathrm{m}_2 - \mathrm{m}_1)^T$$

$$\mathrm{S}_W = \sum_{n \in C_1} (\mathrm{x}_n - \mathrm{m}_1)(\mathrm{x}_n - \mathrm{m}_1)^T + \sum_{n \in C_2} (\mathrm{x}_n - \mathrm{m}_2)(\mathrm{x}_n - \mathrm{m}_2)^T$$

우리는 언제나 최대화/최소화 문제에서 미분값 = 0으로 놓고 문제를 푼다. 목적함수 J가 Convex 문제인지는 우리의 생각으로는 애매할 수 있지만, Convex 문제라고한다…!! 따라서 걱정없이 미분을 때려버리자! 지금의 형태는 $\frac{f}{g}$의 상황이기 때문에, 이를 미분 때리면 $\frac{f'g-fg'}{g^2}$가 된다. 미분값=0으로 해버리면 다음과 같다.

$$(\mathsf{w}^T \mathsf{S}_B \mathsf{w})\mathsf{S}_W \mathsf{w} = (\mathsf{w}^T \mathsf{S}_W \mathsf{w})\mathsf{S}_B \mathsf{w}$$

근데 여기서 $\mathsf{w}^T \mathsf{S}_B \mathsf{w}$와 $\mathsf{w}^T \mathsf{S}_W \mathsf{w}$는 스칼라 값이다. $\mathsf{S}_B \mathsf{w}$의 경우는

$$\mathsf{S}_B \mathsf{w} = (\mathsf{m}_2 - \mathsf{m}_1)(\mathsf{m}_2 - \mathsf{m}_1)^T \mathsf{w} = \beta(\mathsf{m}_2 - \mathsf{m}_1)$$

와 같이 변경될 수 있다.

따라서 각각의 scalar 값을 걍 무시하면 다음과 같은 요약이 가능하다.

$$\mathsf{w} \propto \mathsf{S}_W^{-1}(\mathsf{m}_2 - \mathsf{m}_1)$$

우리가 찾고자하는 축 w는 위의 식에 비례하게 되고, 그냥 스칼라 값은 무시한다음 저 벡터를 유닛벡터로 만들어 주면 끝나게 된다!

1.1.3 LDA의 추가적인 설명

맨처음 LDA의 그림에서 projection 했을 때 이들의 분포가 일종의 정규분포와 같은 형태를 띄는 것을 확인할 수 있다. 이처럼 LDA는 data가 normally distributed되었다는 가정에 기반한다. 각각의 그룹 또한 동일한 공분산 구조를 가진다고 가정하기 때문에, 매우 제약이 쎈 모형이다. 클래스 별로 공분산 구조가 다르다고 가정할 경우, QDA (Quadratic Discriminant Analysis) 가 된다. 이 경우에는 비선형적인 분리가 가능해진다.

그러면 QDA와 KFDA는 어쩌면 비슷하지 않을까, 특정 조건에서는 같지 않을까 생각도 잠깐 해봤는데 (왜냐하면 2차원 혹은 3차원에서의 비선형 분리를 하게되면 시각적으로는 QDA나 KFDA나 큰 차이가 없지 않을까?), QDA의 Kernel 버전도 존재한다. 따라서 아니라고 생각해도 될 것 같다.

1.2 Kernel Fisher Disciminant Analysis

1.2.1 Notation

KFDA는 LDA의 커널화된 버전이다. $\mathsf{x} \to \Phi(\mathsf{x})$로, x를 더 고차원인 $\Phi(\mathsf{x})$ 상에서 projection을 진행한다. 해당 공간에 대한 공분산을 계산하면 다음과 같다.

$$\mathsf{C}^\Phi = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(\Phi(\mathsf{x}_n) - \mathsf{m}^\Phi)(\Phi(\mathsf{x}_n) - \mathsf{m}^\Phi)^T, \qquad \mathsf{m}^\Phi = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\Phi(\mathsf{x}_n)$$

더불어서 고차원으로 매핑된 공간에서의 '클래스 내의 분산'과 '클래스 간의 분산'을 계산하자.

$$\mathsf{S}_W^\Phi = \sum_{i=1,2}\sum_{n=1}^{N_i}(\Phi(\mathsf{x}_n^i) - \mathsf{m}_i^\Phi)(\Phi(\mathsf{x}_n^i) - \mathsf{m}_i^\Phi)^T$$
$$\mathsf{S}_B = (\mathsf{m}_2^\Phi - \mathsf{m}_1^\Phi)(\mathsf{m}_2^\Phi - \mathsf{m}_1^\Phi)^T$$

1.2.2 Objective Function

KFDA의 목적함수는 결국 LDA와 다르지 않지만, 분산 텀 부분만 달라진다.

$$J(\mathsf{w}) = \frac{\mathsf{w}^T \mathsf{S}_B^\Phi \mathsf{w}}{\mathsf{w}^T \mathsf{S}_W^\Phi \mathsf{w}}$$

더불어서 $\mathsf{w} = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \Phi(\mathsf{x}_n)$라고 두게 되면, mean을 다음과 같이 projection할 수 있다.

$$\begin{aligned}\mathsf{w}^T \mathsf{m}_i^\Phi &= \frac{1}{N_i} \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{N_i} \alpha_n (\Phi(\mathsf{x}_n) \cdot \Phi(\mathsf{x}_k^i)) \\ &= \frac{1}{N_i} \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{N_i} \alpha_n \mathsf{K}(\mathsf{x}_n, \mathsf{x}_k^i) = \alpha^T \Box_i\end{aligned}$$

결국 매핑된 공간에서 클래스의 중심은 다음과 같은 커널함수로 바로 나타난다.

$$(\mu_i)_n = \frac{1}{N_i} \sum_{k=1}^{N_i} \mathsf{K}(\mathsf{x}_n, \mathsf{x}_k^i)$$

그렇다면 이제 목적함수를 보자. 목적함수도 결국에는 커널함수로 바로 나타나기 때문에, 이를 미분하게 될 것이고 그 꼴이 커널 트릭의 존재 때문에 매우 간단할 것임을 예상할 수 있다.

목적함수의 분자부분을 먼저 보면,

$$\begin{aligned}\mathsf{w}^T \mathsf{S}_B^\Phi \mathsf{w} &= \mathsf{w}^T (\mathsf{m}_2^\Phi - \mathsf{m}_1^\Phi)(\mathsf{m}_2^\Phi - \mathsf{m}_1^\Phi)^T \mathsf{w} \\ &= \alpha^T (\mu_2 - \mu_1)(\mu_2 - \mu_1)^T \alpha \\ &= \alpha^T \mathsf{M} \alpha, \qquad \text{where } \mathsf{M} = (\mu_2 - \mu_1)(\mu_2 - \mu_1)^T\end{aligned}$$

와 같이 정리될 수 있다.

더불어서 목적함수의 분모부분을 보면 조금 전개가 많이 귀찮다. 따라서 결과만 간단히 요약한다면

$$\begin{aligned}\mathsf{w}^T \mathsf{S}_W^\Phi \mathsf{w} &= (\sum_{i=1}^{N} \alpha_i \Phi(\mathsf{x}_i)) \ (\sum_{j=1,2} \sum_{n=1}^{N_i} (\Phi(\mathsf{x}_n^j) - \mathsf{m}_j^\Phi)(\Phi(\mathsf{x}_n^j) - \mathsf{m}_j^\Phi)^T) \ (\sum_{k=1}^{N} \alpha_k \Phi(\mathsf{x}_k)) \\ &= \sum_{j=1,2} \alpha^T \mathsf{K}_j \mathsf{K}_j^T \alpha - \alpha^T \mathsf{K}_j \, 1_{N_j} \, \mathsf{K}_j^T \alpha \\ &= \alpha^T \mathsf{N} \alpha, \qquad where \ \mathsf{N} = \sum_{j=1,2} \mathsf{K}_j (\mathsf{I} - 1_{N_j}) \mathsf{K}_j^T\end{aligned}$$

다음과 같다.

결국 우리의 목적함수는 다음과 같이 변경된다.

$$J(\alpha) = \frac{\alpha^T \mathsf{M} \alpha}{\alpha^T \mathsf{N} \alpha}$$

이 목적함수에 대해 미분하고 정리를 하면 이전과 결과가 비슷하다. 바로 넘어가보자.

$$\alpha = \mathsf{N}^{-1}\left(\mathsf{M}_2 - \mathsf{M}_1\right)$$

왜 w가 아닌 α를 찾았는가? w는 고차원 공간에서 선형으로 사영하는 것이고, 이를 원래 공간에서 사영해주는 것이 바로 알파이다. 그래서 이를 새로운 데이터 포인트로 매핑하게 되면

$$y(\mathsf{x}) = (\mathsf{w} \cdot \Phi(\mathsf{x})) = \sum_{n=1}^{N} \alpha_n \mathsf{K}(\mathsf{x}_n, \mathsf{x})$$

이런 비선형적인 분리를 다음과 같이 시각화 할 수 있다. 왼쪽은 Polynomial Kernel을 사용한 것이고, 오른쪽은 Gaussian Kernel을 사용한 것이다.