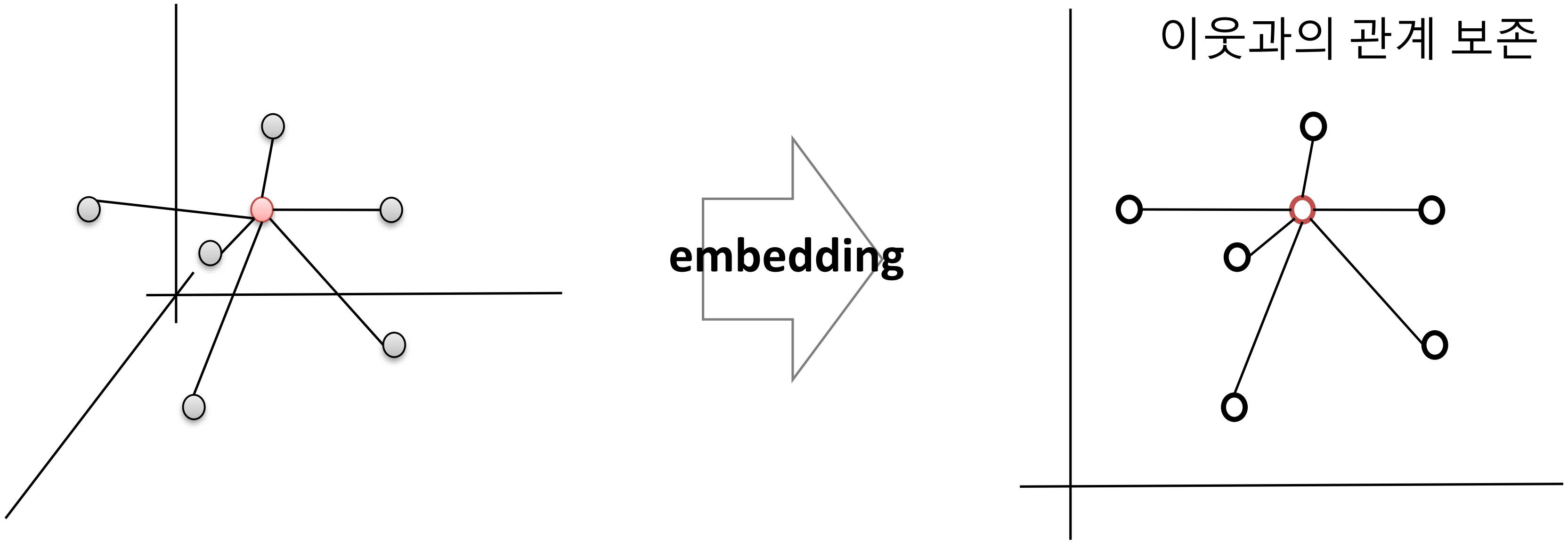
Local Linear Embedding

Methods

❖ Local Linear Embedding (LLE)

- LLE는 eigenvector를 활용하는 비선형 차원 축소 기법 중 하나
- 고차원의 공간에서 인접해 있는 데이터들 사이의 선형적 구조를 보존하면서 저차원으로 임베딩하는 방법론
- Closed-form solution이 존재하기 때문에 적용이 간단하며, local minima 문제에서 자유로움



Local Linear Embedding

Methods

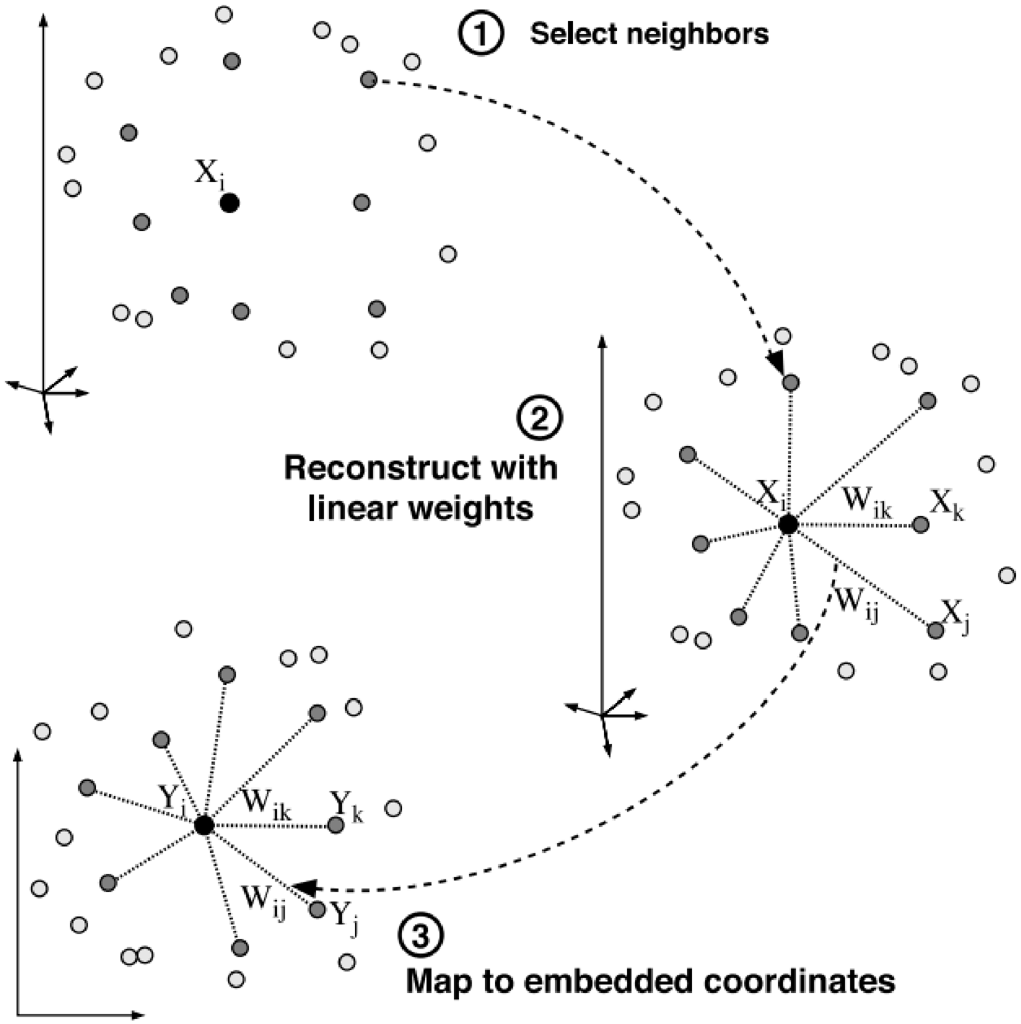
❖ LLE algorithm

- LLE는 총 3개의 단계로 구성되어 있음

1. i번째 관측치인 x_i의 이웃 관측치를 선택

2. 모든 관측치에 대해 x_i를 이웃 관측치의 선형 결합으로 가장 잘 설명할 수 있는 W_{ij} 탐색

3. 선형 관계를 유지하며 저차원으로 매핑되는 좌표 y_i 탐색



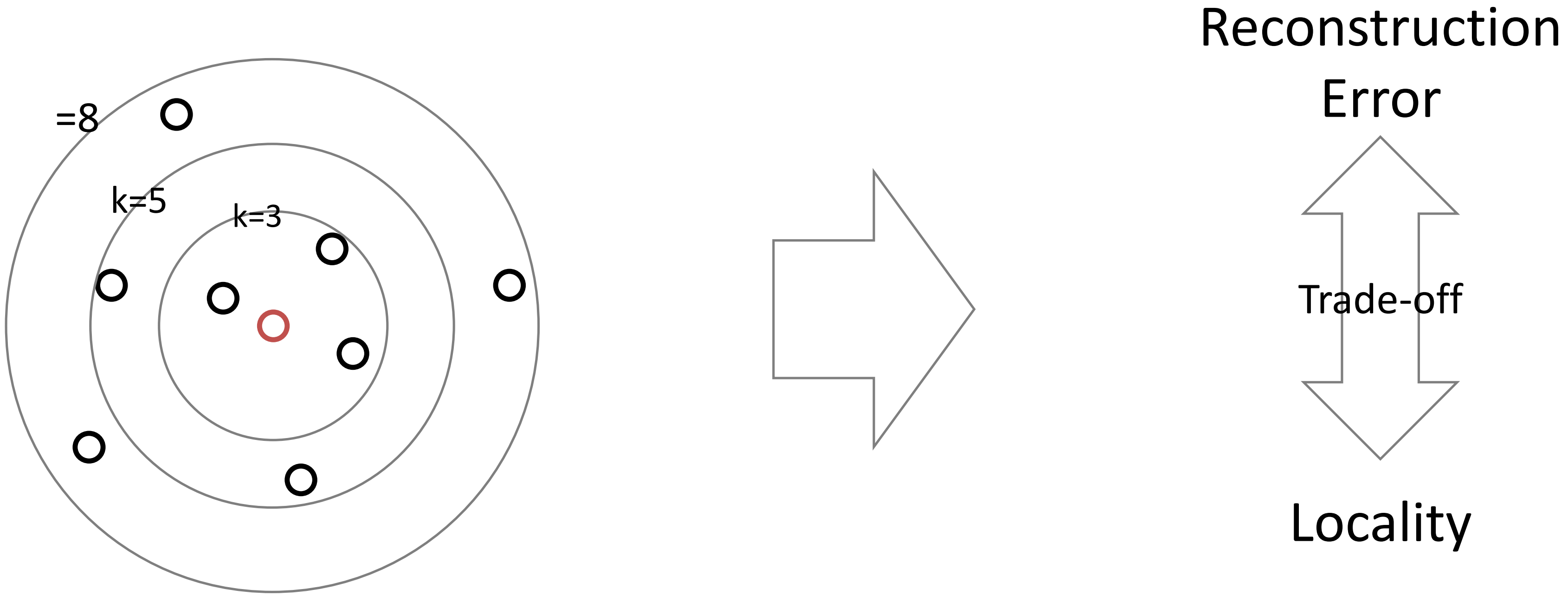
Local Linear Embedding

Methods

❖ LLE algorithm

1. i번째 관측치인 $x_i \in R^d$의 이웃 관측치를 선택

→ 이 때, 몇 개의 nearest neighbors를 사용할지는(a.k.a. k) 사용자가 정하는 hyperparameter



Local Linear Embedding

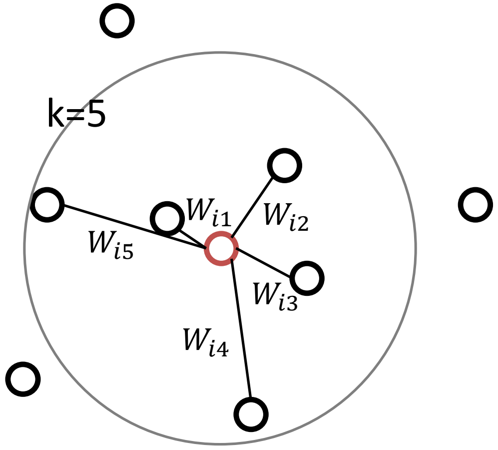
Methods

❖ LLE algorithm

2. 모든 관측치에 대해 x_i를 이웃 관측치의 선형 결합으로 가장 잘 설명할 수 있는 W_{ij} 탐색

→ 모든 관측치마다 W_{ij} 를 계산 ($W \in R^{N \times N}$)

→ convex function이기 때문에 closed-form solution 존재



$$\text{minimize}\, E(W) = \sum_{i=1}^{N} \left| x_i - \sum_{j=1}^{k} W_{ij}\, x_j \right|^2$$

$$s.t.\ W_{ij} = 0, \text{if } x_j \text{ does not belong to the neighbor of } x_i$$

$$\sum_{j=1}^{k} W_{ij} = 1 \text{ for all } i$$

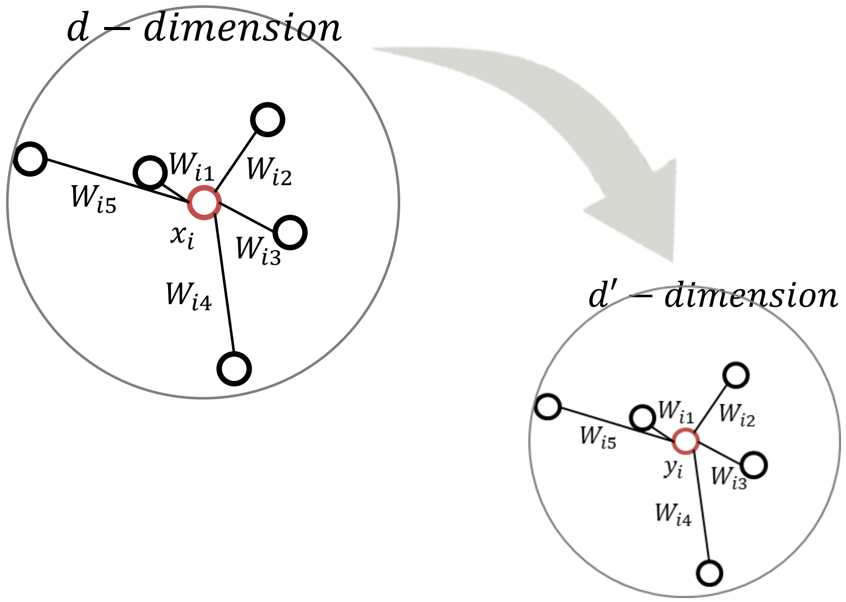
Local Linear Embedding

Methods

❖ LLE algorithm

3. 선형 관계를 유지하며 저차원으로 매핑되는 좌표 $y_i \in R^{d'}$ 탐색

→ 고차원에서의 선형결합을 가장 잘 보존할 수 있는 y_i를 찾는 것이 목적



$$\min_{\mathbf{y}} \Phi(\mathbf{W}) = \sum_i \left| \mathbf{y}_i - \sum_j \mathbf{W}_{ij}\mathbf{y}_j \right|^2 \Rightarrow \Phi(\mathbf{W}) = \sum_{i,j} \mathbf{M}_{ij}(\mathbf{y}_i \cdot \mathbf{y}_j)$$

$$\text{where } \mathbf{M}_{ij} = \delta_{ij} - \mathbf{W}_{ij} - \mathbf{W}_{ji} + \sum_k \mathbf{W}_{ki}\mathbf{W}_{kj},\ \delta_{ij} = 1 \text{ if } i = j,\ 0 \text{ otherwise}$$

$$s.t.\ \sum_i \mathbf{y}_i = 0,\ \frac{1}{n}\sum_i \mathbf{y}\mathbf{y}^T = \mathbf{I}$$

Local Linear Embedding

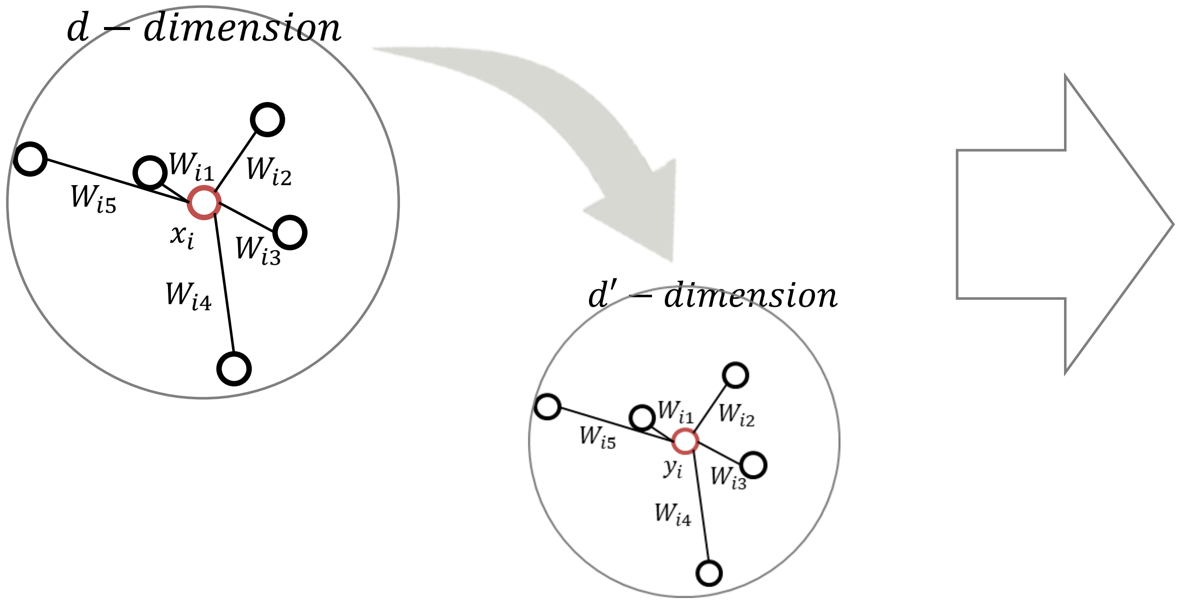
Methods

❖ LLE algorithm

3. 선형 관계를 유지하며 저차원으로 매핑되는 좌표 $y_i \in R^{d'}$ 탐색

→ 고차원에서의 선형결합을 가장 잘 보존할 수 있는 y_i를 찾는 것이 목적

→ Rayleitz-Ritz theorem에 의해서 y의 closed-form solution이 M 행렬의 가장 작은 d개의 eigenvectors가 됨



$$\min_{\mathbf{y}} \Phi(\mathbf{W}) = \sum_i \left| \mathbf{y}_i - \sum_j \mathbf{W}_{ij}\mathbf{y}_j \right|^2$$

$$= \left[(\mathbf{I}-\mathbf{W})\mathbf{y}\right]^T (\mathbf{I}-\mathbf{W})\mathbf{y}$$

$$= \mathbf{y}^T(\mathbf{I}-\mathbf{W})^T(\mathbf{I}-\mathbf{W})\mathbf{y}$$

$$= \mathbf{y}^T\mathbf{M}\mathbf{y}$$

Local Linear Embedding

Methods

❖ Dimensionality Reduction using LLE