Kernel PCA

훈련 집합 $\boldsymbol{x}^1, \ldots, \boldsymbol{x}^n \in \mathbb{R}^d$와 변환 $\phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^m$에 대하여

$$\phi(X) = \begin{bmatrix} \phi(\boldsymbol{x}^1)^T \\ \vdots \\ \phi(\boldsymbol{x}^n)^T \end{bmatrix}$$

의 주성분 분해에 대하여 알아보자. 식을 단순화하기 위하여 $\phi(X)$ 대신 일반적인 행렬을 사용하여 계산한다. 앞으로 등장할 행렬 A는 $\phi(X)$라 생각하면 된다.

$A = (a_{ij})$를 $n \times m$ 행렬이라 하고 A의 i 행을 전치한 벡터를 A^i라 하자.

$$A^i = \begin{bmatrix} a_{i1} \\ \vdots \\ a_{im} \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} A^{1T} \\ \vdots \\ A^{nT} \end{bmatrix}$$

또, 두 행렬 C와 K를 각각

$$C = A^T A, \quad K = A A^T$$

라 하자.

C의 고유 값을 $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$, 대응되는 고유 벡터를 $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_m \in \mathbb{R}^m$이라 하자. C가 대칭 행렬이므로 고유 벡터들은 정규 직교 기저를 이룬다. 또, $C\boldsymbol{v}_k = \lambda_k \boldsymbol{v}_k$, $C = \sum_{i=1}^{n} A^i A^{iT}$이므로

$$\lambda_k \boldsymbol{v}_k = \sum_{i=1}^{n} A^i A^{iT} \boldsymbol{v}_k$$

가 성립한다.

$\alpha_k^i = A^{iT} \boldsymbol{v}_k = A^i \cdot \boldsymbol{v}_k$라 하면

$$\lambda_k \boldsymbol{v}_k = \sum_{i=1}^{n} \alpha_k^i A^i$$

와 같이, $\boldsymbol{v}_k$를 A^i의 일차 결합으로 나타낼 수 있다. 여기서

$$\boldsymbol{\alpha}_k = \begin{bmatrix} \alpha_k^1 \\ \vdots \\ \alpha_k^n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

이라 하면

$$\lambda_k \boldsymbol{v}_k = A^T \boldsymbol{\alpha}_k \tag{1}$$

가 성립한다.

◇ 참고로

$$C\boldsymbol{v}_i = \lambda_i \boldsymbol{v}_i, \quad KA\boldsymbol{v}_i = \lambda_i A\boldsymbol{v}_i$$

가 성립한다. C와 K의 역할을 바꾸어도 유사한 관계가 성립한다.

식 $A^T A \boldsymbol{v}_k = \lambda_k \boldsymbol{v}_k$의 양변에 λ_k을 곱하고 식 (1)을 대입하면

$$A^T A A^T \boldsymbol{\alpha}_k = \lambda_k A^T \boldsymbol{\alpha}_k$$

이고, 다시 양변에 A를 곱하여

$$K^2 \boldsymbol{\alpha}_k = \lambda_k K \boldsymbol{\alpha}_k \tag{2}$$

를 얻는다. 양변에서 K를 소거하면

$$K\boldsymbol{\alpha}_k = \lambda_k \boldsymbol{\alpha}_k \tag{3}$$

이다. 곧, $\boldsymbol{\alpha}_k$는 K의 고유 벡터이다.

◇ $\boldsymbol{\alpha}_k$를

$$\boldsymbol{\alpha}_k = cA\boldsymbol{v}_k$$

로 정의하면, $K\boldsymbol{\alpha}_k = \lambda_k \boldsymbol{\alpha}_k$가 성립한다. 이 식을 $\boldsymbol{\alpha}_k$의 정의로 사용하는 것도 한 방법이다.

행렬 A의 행 A^i는 $\mathbb{R}^m$ 위의 벡터이므로 정규 직교 기저 $\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_m$의 일차 결합으로 표시된다. $A^i = \sum_{j=1}^{m} \beta_j^i \boldsymbol{v}_j$라 하면 $\beta_k^i = A^i \cdot \boldsymbol{v}_k = A^{iT}\boldsymbol{v}_k$임을 알 수 있다.

$$\boldsymbol{\beta}_k = \begin{bmatrix} \beta_k^1 \\ \vdots \\ \beta_k^n \end{bmatrix}$$

라 하면 $\boldsymbol{\beta}_k = A\boldsymbol{v}_k$가 성립하고, 식 (1)을 대입하면

$$\boldsymbol{\beta}_k = A\boldsymbol{v}_k = \frac{1}{\lambda_k} AA^T \boldsymbol{\alpha}_k = \frac{1}{\lambda_k} K\boldsymbol{\alpha}_k = \boldsymbol{\alpha}_k \tag{4}$$

를 얻는다.

우리의 목표는 PCA에 있으므로 $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_m$이라 가정하자. 식 (4)에서 $\phi(X)$, 곧 A의 k 차원 주성분은

$$[\boldsymbol{\alpha}_1 \cdots \boldsymbol{\alpha}_k] = \begin{bmatrix} \alpha_1^1 & \cdots & \alpha_k^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_1^n & \cdots & \alpha_k^n \end{bmatrix}$$

임을 알 수 있다. 곧, 커널 행렬 $K = \phi(X)\phi(X)^T$의 고유 벡터들이 $\phi(X)$의 주성분을 이룬다.

예측(prediction)에 대하여 알아보자. 임의의 벡터 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$에 대하여 $\phi(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{R}^m$을 정규 직교 기저 $\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_m$의 일차 결합으로 표현하여 주성분을 구해보자. $\phi(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{m} \gamma_j \boldsymbol{v}_j$라 하면 $\gamma_k = \phi(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{v}_k = \phi(\boldsymbol{x})^T \boldsymbol{v}_k$이다. 식 (1)을 대입하면

$$\gamma_k = \phi(\boldsymbol{x})^T \boldsymbol{v}_k = \frac{1}{\lambda_k} \phi(\boldsymbol{x})^T \phi(X)^T \boldsymbol{\alpha}_k = \frac{1}{\lambda_k} (\phi(X)\phi(\boldsymbol{x})) \cdot \boldsymbol{\alpha}_k$$

를 얻는다. $\phi(X)\phi(\boldsymbol{x})$는

$$\phi(X)\phi(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \phi(\boldsymbol{x}_1) \cdot \phi(\boldsymbol{x}) \\ \vdots \\ \phi(\boldsymbol{x}_n) \cdot \phi(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}) \\ \vdots \\ k(\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}) \end{bmatrix}$$

이다.