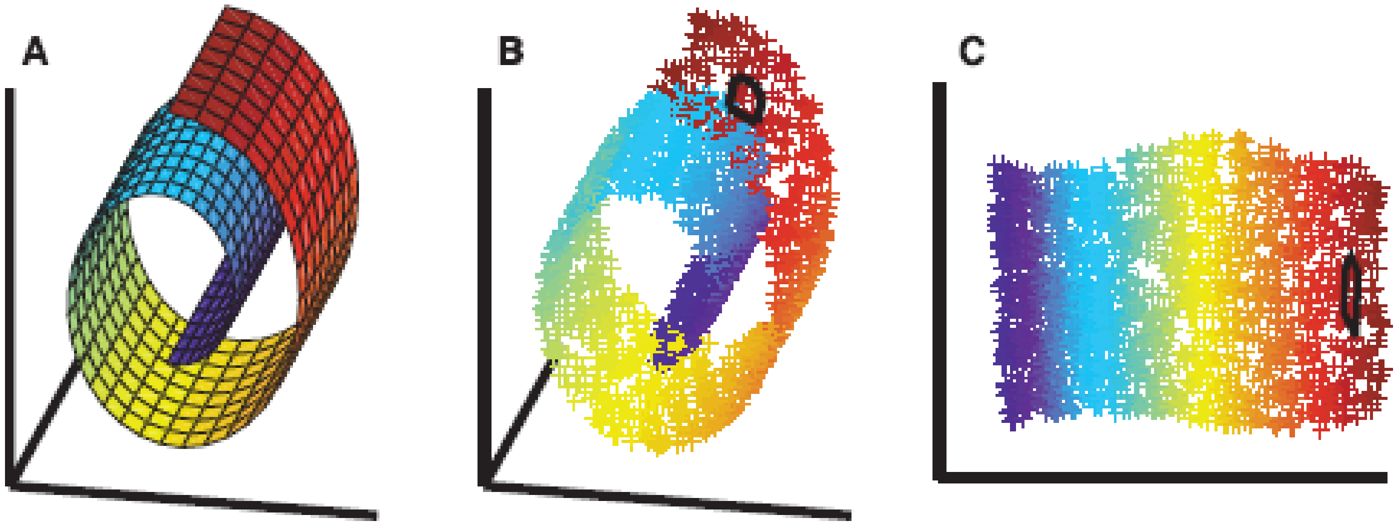
Dimensionality Reduction

❖ Locally Linear Embedding(LLE)

- LLE는 ISOMAP과 같이 비선형 차원 축소 기법이며 매니폴드 학습 기법임
- Unsupervised learning에 해당하며, 고차원 공간에서 서로 인접한 데이터들 사이의 선형적 구조를 보존하면서 저차원으로 축소하는 방법임
- 최적해가 local minima 문제를 포함하지 않는다는 장점이 있음

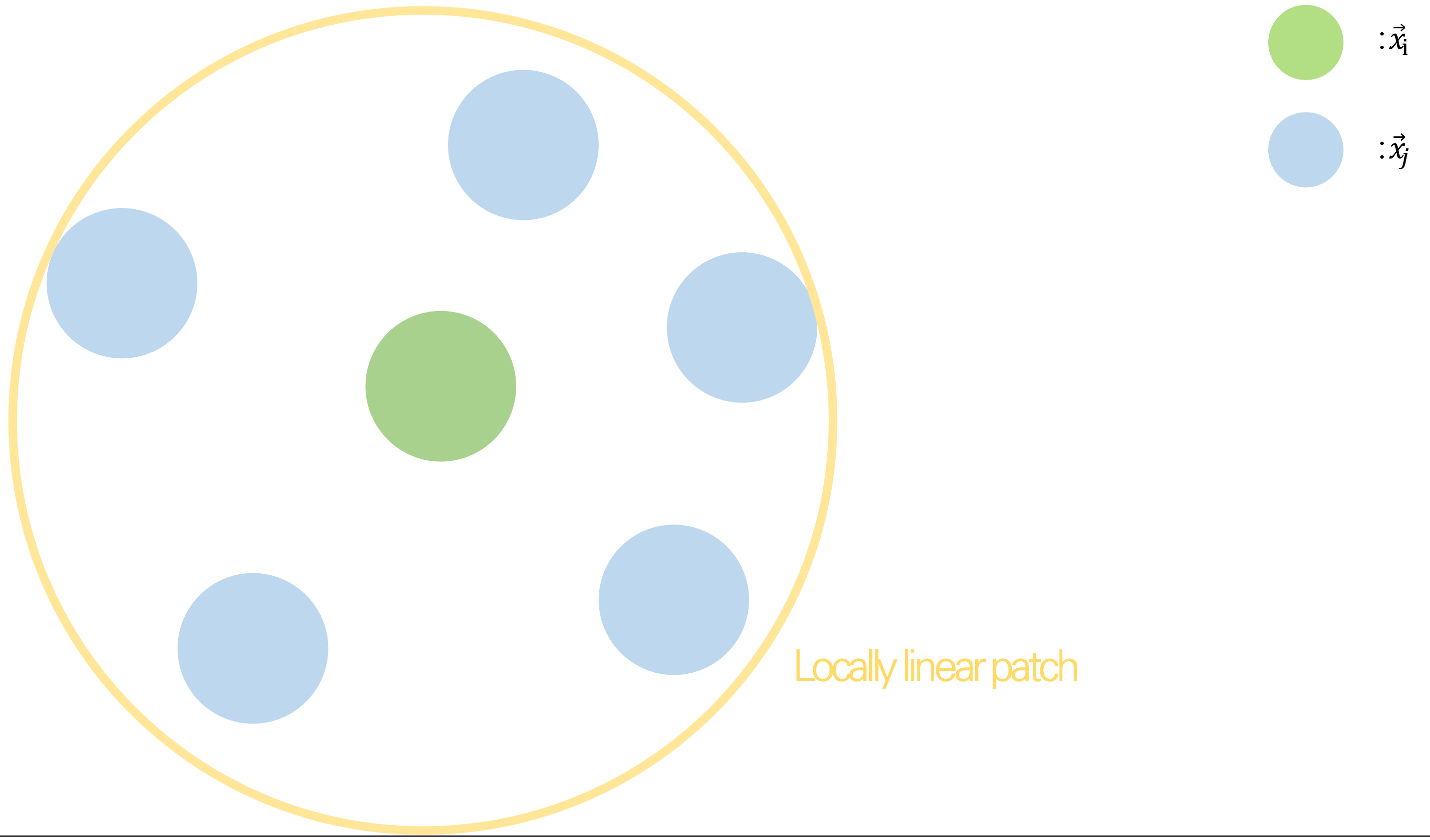


〈Swiss Roll Example〉

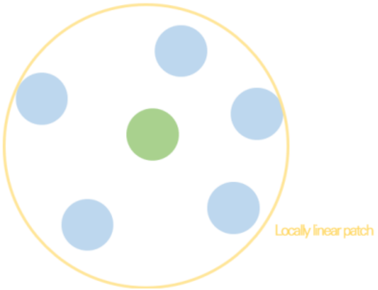
Dimensionality Reduction

❖ Locally Linear Embedding(LLE) – step1: Neighbors 선택

- N 차원(N개의 features)을 가지는 m 개의 데이터셋의 각 데이터 포인트 $\vec{x}_i$가 존재한다고 가정
- 각 데이터 포인트 $\vec{x}_i$와 가장 가까운 k개의 이웃점 $\vec{x}_j, (j = 1, \ldots, k)$를 선택
- K개의 이웃점은 하이퍼 파라미터로 적절한 개수를 탐색해야함

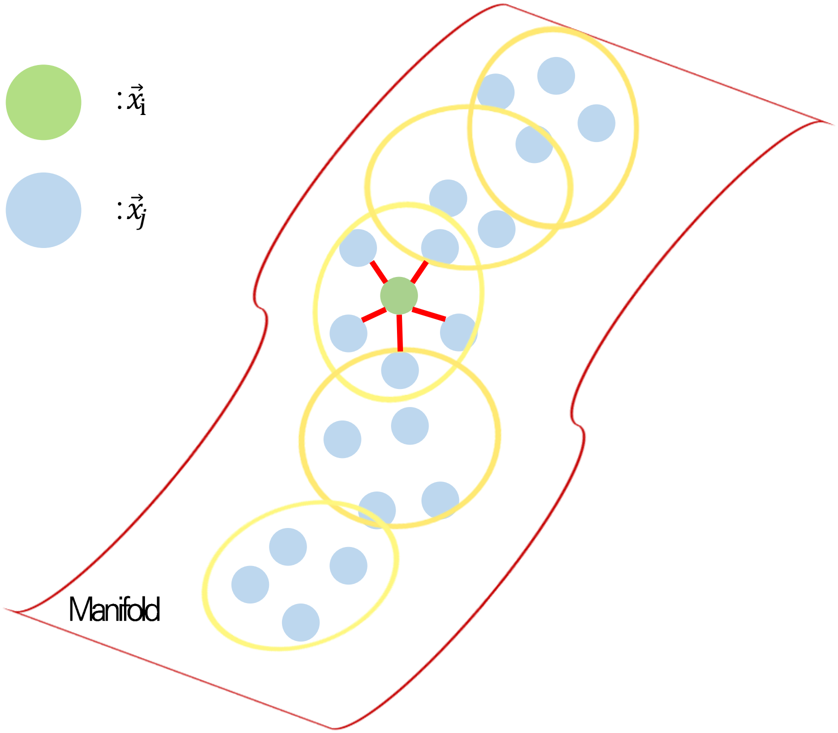


Dimensionality Reduction



❖ Locally Linear Embedding(LLE) – step2: linear weight를 통해서 재구축

- Step1에서 선택한 각 데이터 포인트 $\vec{x}_i$에 가까운 k개의 $\vec{x}_j$는 매니폴드의 locally linear patch 상에 존재하거나 가까이 있을 것이라 가정함
- 위와 같은 가정을 통해서 $\vec{x}_j$로부터 $\vec{x}_i$를 가장 잘 재구축(reconstruction)하는 linear weight w_{ij}를 구함
- 따라서 재구축 오차를 최소화하는 문제로 볼 수 있음



이웃점 $\vec{x}_j$에 대해 w_{ij}와의 행렬 곱을 통해 $\sum_{j=1}^{k} w_{ij}\vec{x}_j \approx \vec{x}_i$ 를 만족하는 w_{ij}를 구하자!

→ $\vec{x}_i$와 $\sum_{j=1}^{k} w_{ij}\vec{x}_j$의 오차를 재구축 오차(reconstruction error)라 하며 최소화하자!

$$\min \varepsilon_i(w) = \left\| \vec{x}_i - \sum_{\substack{j=1,\\ j\neq i}}^{k} w_{ij}\vec{x}_j \right\|^2$$

$$s.t. \sum_{\substack{j=1,\\ j\neq i}}^{k} w_{ij} = 1$$

Dimensionality Reduction

❖ Locally Linear Embedding(LLE) – step2: linear weight를 통해서 재구축

- X는 알고있으니 W를 최적화하면 됨

$$\min \varepsilon_i(w) = \left\| \vec{x}_i - \sum_{\substack{j=1, \\ j\neq i}}^{k} w_{ij}\vec{x}_j \right\|^2$$

$$s.t. \sum_{\substack{j=1, \\ j\neq i}}^{k} w_{ij} = 1$$

- 해당 최적화 문제에서 X 벡터에 어떠한 상수 벡터를 더해도 재구축 오차를 최소화하는 문제에는 영향을 주지 않음

$$\varepsilon_i(w) = \left\| \vec{x}_i + \vec{c} - \sum_{\substack{j=1, \\ j\neq i}}^{k} w_{ij}(\vec{x}_j + \vec{c}) \right\|^2$$

$$= \left\| \vec{x}_i + \vec{c} - \sum_{\substack{j=1, \\ j\neq i}}^{k} w_{ij}\vec{x}_j - \vec{c} \right\|^2$$

$$= \left\| \vec{x}_i - \sum_{\substack{j=1, \\ j\neq i}}^{k} w_{ij}\vec{x}_j \right\|^2 \text{(기존 목적식)}$$

Dimensionality Reduction

❖ Locally Linear Embedding(LLE) – step2: linear weight를 통해서 재구축

- 앞 장의 식 $\varepsilon_i(w) = \left\| \vec{x}_i + \vec{c} - \sum_{j=1, j\neq i}^{k} w_{ij}(\vec{x}_j + \vec{c}) \right\|^2$에서 상수벡터 $\vec{c} = -\vec{x}_i$라고 한다면,

$$\varepsilon_i(w) = \left\| \sum_{j=1, j\neq i}^{k} w_{ij}(\vec{x}_j - \vec{x}_i) \right\|^2 = \left\| \sum_{j=1, j\neq i}^{k} w_{ij}\, \vec{z}_j \right\|^2, \qquad (\vec{z}_j = \vec{x}_j - \vec{x}_i)$$

- 각 데이터 포인트 $\vec{x}_i$에 가까운 k개의 $\vec{x}_j$에 대해서 연산하므로, $W_i = \sum_{j=1}^{k} w_{ij}$는 $(k \times 1)$행렬, $Z = \sum_{j=1}^{k} \vec{z}_j$는 $(k \times N)$행렬

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{j=1, j\neq i}^{k} w_{ij}\, \vec{z}_j \right\|^2 &= (Z^T W_i)^T (Z^T W_i) \\ &= W_i^T Z Z^T W_i \\ &= W_i^T G_i W_i \ \ (G_i = ZZ^T, \text{symmetric matrix}) \end{aligned}$$

- 위와 같이 정리된 최적화 문제를 라그랑지안 함수 L로 나타낼 수 있음

$$L(W_i, \lambda) = W_i^T G_i W_i - \lambda(1^T\, W_i - 1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial W_i} \Longrightarrow \qquad \therefore W_i = \frac{\lambda}{2} G_i^{-1}\, 1$$

Dimensionality Reduction

❖ Locally Linear Embedding(LLE) – step3: 저차원(d-dimensional space)공간으로 매핑

- Step2에서 구한 w_{ij}는 지역 선형 관계(locally linear relationship)를 나타내며, 이를 최대한 보존되도록 저차원 공간으로 매핑
- 앞서 최적화된 W를 통해서 Y를 최적화하는 문제가 됨

$$\min \Phi(Y) = \sum_{i=1}^{m} \left\| \vec{y}_i - \sum_{\substack{j=1,\\ j\neq i}}^{k} w_{ij}\,\vec{y}_j \right\|^2 \qquad s.t. \begin{cases} \dfrac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \vec{y}_j = 0 \Longrightarrow \vec{y}_j\, means : 0 \\ \dfrac{1}{m} Y^T Y = \mathrm{I} \Longrightarrow covariance\colon identity\, matrix \end{cases}$$

$$= Y^T M Y$$

- 위와 같이 정리된 최적화 문제를 라그랑지안 함수 L로 나타낼 수 있음

$$L(W_i, \alpha) = \mathrm{Y}^T\mathrm{MY} - \alpha(\mathrm{m}^{-1}\mathrm{Y}^T Y - \mathrm{I})$$

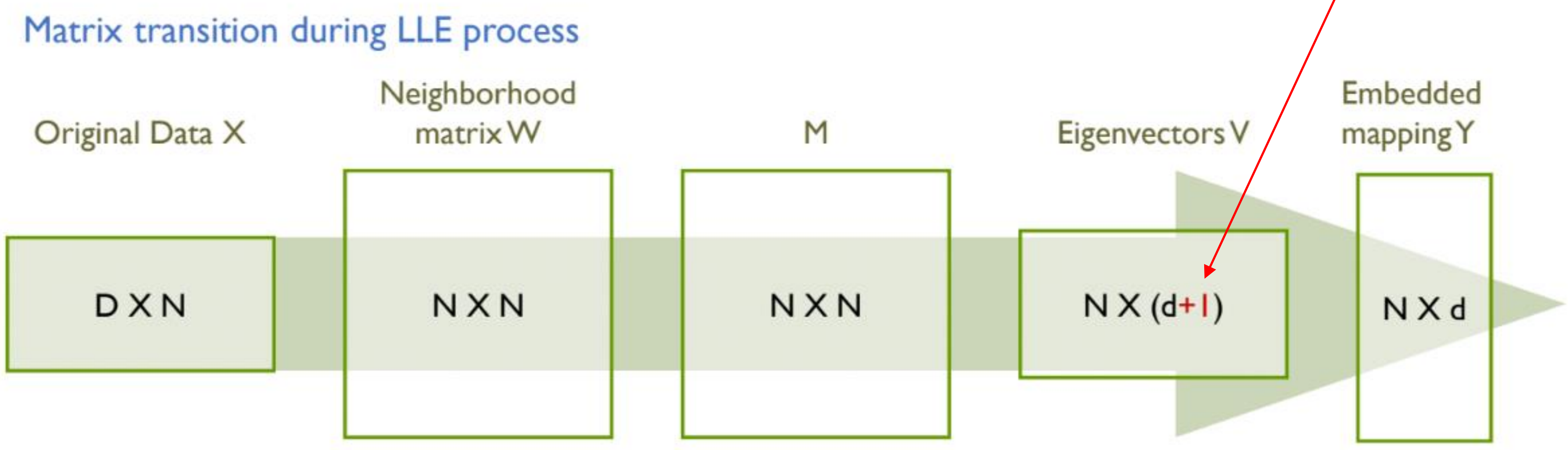
$$\frac{\partial L}{\partial \mathrm{Y}} \Longrightarrow \quad \therefore MY = \frac{\alpha}{\mathrm{m}}\mathrm{Y}$$

Dimensionality Reduction

❖ Locally Linear Embedding(LLE) – step3: 저차원(d-dimensional space)공간으로 매핑

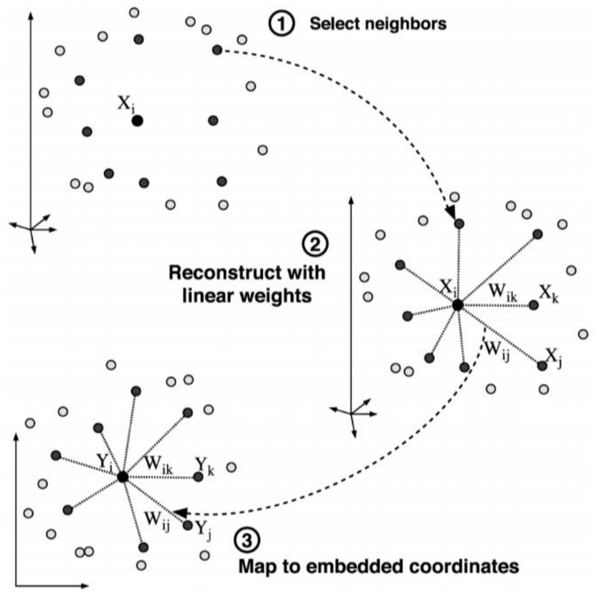
- Y는 M의 eigenvectors, $\frac{\alpha}{m}$은 eigenvalue인 것을 알 수 있음
- Step 2로부터 구해진 w를 통해서 Y를 찾는 것이며, Y 중에서도 가장 값을 최소화하는 eigenvector인 가장 오른쪽에 위치하는 열벡터를 찾는 것

$$\frac{\partial L}{\partial Y} \Rightarrow \quad \therefore MY = \frac{\alpha}{m} Y$$



Dimensionality Reduction

❖ Locally Linear Embedding(LLE) – Example



Original manifold (A)로 부터
data sampling