3.4 특잇값 분해

정방행렬은 고유분해로 고윳값과 고유벡터를 찾을 수 있었다. 정방행렬이 아닌 행렬은 고유분해가 불가능하다. 하지만 대신 고유분해와 비슷한 특이분해를 할 수 있다.

특잇값과 특이벡터

$N \times M$ 크기의 행렬 A를 다음과 같은 3개의 행렬의 곱으로 나타내는 것을 **특이분해(singular-decomposition)** 또는 **특잇값 분해(singular value decomposition)**라고 한다.

$$A = U\Sigma V^T$$

여기에서 U, Σ, V는 다음 조건을 만족해야 한다.

- 대각성분이 양수인 대각행렬이어야 한다. 큰 수부터 작은 수 순서로 배열한다.

$$\Sigma \in \mathbf{R}^{N \times M}$$

- U는 N차원 정방행렬로 모든 열벡터가 단위벡터이고 서로 직교해야 한다.

$$U \in \mathbf{R}^{N \times N}$$

- V는 M차원 정방행렬로 모든 열벡터가 단위벡터이고 서로 직교해야 한다.

$$V \in \mathbf{R}^{M \times M}$$

위 조건을 만족하는 행렬 Σ의 대각성분들을 **특잇값(singular value)**, 행렬 U의 열벡터들을 **왼쪽 특이벡터**(left singular vector), 행렬 V의 행벡터들을 **오른쪽 특이벡터**(right singular vector)라고 부른다.

> **[정리] 특이분해는 모든 행렬에 대해 가능하다. 즉 어떤 행렬이 주어지더라도 위와 같이 특이분해할 수 있다.**

증명은 이 책의 범위를 벗어나므로 생략한다.

특이값 분해 행렬의 크기

특잇값의 개수는 행렬의 열과 행의 개수 중 작은 값과 같다. 특이분해된 형태를 구체적으로 쓰면 다음과 같다.

만약 $N > M$이면 Σ 행렬이 M개의 특잇값(대각성분)을 가지고 다음처럼 아랫 부분이 영행렬이 된다.

$$A = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & u_3 & \cdots & u_M & \cdots & u_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sigma_M \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \\ \vdots \\ v_M^T \end{bmatrix}$$

반대로 $N < M$이면 Σ 행렬이 N개의 특잇값(대각성분)을 가지고 다음처럼 오른쪽 부분이 영행렬이 된다.

Contents

$$
A = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sigma_N & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \\ v_3^T \\ \vdots \\ v_N^T \\ \vdots \\ v_M^T \end{bmatrix}
$$

행렬의 크기만 표시하면 다음과 같다.

$$
N\{ \overbrace{A}^{M} = N\{ \overbrace{U}^{N} \overbrace{\Sigma}^{M} \overbrace{V^T}^{M} \}M
$$

또는

$$
N\{ \overbrace{A}^{M} = N\{ \overbrace{U}^{N} \overbrace{\Sigma}^{M} \overbrace{V^T}^{M} \}M
$$

예제

행렬 A

$$
A = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}
$$

는 다음처럼 특이분해할 수 있다.

$$
A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{2}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{30}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{5}{\sqrt{30}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{12} & 0 \\ 0 & \sqrt{10} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}
$$

특잇값 분해의 축소형

특잇값 대각행렬에서 0인 부분은 사실상 아무런 의미가 없기 때문에 대각행렬의 0 원소 부분과 이에 대응하는 왼쪽(혹은 오른쪽) 특이벡터들을 없애고 다음처럼 축소된 형태로 해도 마찬가지로 원래 행렬이 나온다.

N이 M보다 큰 경우에는 왼쪽 특이벡터 중에서 $u_{M+1}, \cdots, u_N$을 없앤다.

$$
A = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sigma_M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \\ \vdots \\ v_M^T \end{bmatrix}
$$

N이 M보다 작은 경우에는 오른쪽 특이벡터 중에서 $v_{N+1}, \cdots, v_M$을 없앤다.

$$
A = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sigma_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \\ \vdots \\ v_N^T \end{bmatrix}
$$

축소형의 경우에도 행렬의 크기만 표시하면 다음과 같다.

$$
N\{ \overbrace{A}^{M} = N\{ \overbrace{U}^{M} \overbrace{\Sigma}^{M} \overbrace{V^T}^{M} \}M
$$

또는

$$
N\{ \overbrace{A}^{M} = N\{ \overbrace{U}^{N} \overbrace{\Sigma}^{N} \overbrace{V^T}^{M} \}N
$$

예제

행렬 A

$$
A = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}
$$

의 특이분해 축소형은 다음과 같다.

$$
A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \\ -\frac{2}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{12} & 0 \\ 0 & \sqrt{10} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}
$$

파이썬을 사용한 특이분해

numpy.linalg 서브패키지와 scipy.linalg 서브패키지에서는 특이분해를 할 수 있는 `svd()` 명령을 제공한다. 오른쪽 특이행렬은 전치행렬로 출력된다는 점에 주의하라.

```
from numpy.linalg import svd

A = np.array([[3, -1], [1, 3], [1, 1]])
U, S, VT = svd(A)
```

```
U
```

```
array([[-4.08248290e-01,  8.94427191e-01, -1.82574186e-01],
       [-8.16496581e-01, -4.47213595e-01, -3.65148372e-01],
       [-4.08248290e-01, -2.06937879e-16,  9.12870929e-01]])
```

```
S
```

```
array([3.46410162, 3.16227766])
```

```
np.diag(S, 1)[:, 1:]
```

```
array([[3.46410162, 0.        ],
       [0.        , 3.16227766],
       [0.        , 0.        ]])
```

```
VT
```

```
array([[-0.70710678, -0.70710678],
       [ 0.70710678, -0.70710678]])
```

```
U @ np.diag(S, 1)[:, 1:] @ VT
```

```
array([[ 3., -1.],
       [ 1.,  3.],
       [ 1.,  1.]])
```

축소형을 구하려면 인수 `full_matrices=False`로 지정한다.

```
U2, S2, VT2 = svd(A, full_matrices=False)
```

```
U2
```

```
array([[-4.08248290e-01,  8.94427191e-01],
       [-8.16496581e-01, -4.47213595e-01],
       [-4.08248290e-01, -2.06937879e-16]])
```

```
S2
```

```
array([3.46410162, 3.16227766])
```

```
VT2
```

```
array([[-0.70710678, -0.70710678],
       [ 0.70710678, -0.70710678]])
```

```
U2 @ np.diag(S2) @ VT2
```

```
array([[ 3., -1.],
       [ 1.,  3.],
       [ 1.,  1.]])
```

연습 문제 3.4.1

NumPy를 사용하여 다음 행렬을 특잇값 분해를 한다(축소형이 아닌 방법과 축소형 방법을 각각 사용한다). 또한 다시 곱해서 원래의 행렬이 나오는 것을 보여라.

$$B = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & -2 \end{bmatrix}$$

$$C = \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 1 & 3 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

특잇값과 특이벡터의 관계

행렬 V는 정규직교(orthonormal)행렬이므로 전치행렬이 역행렬이다.

$$V^T = V^{-1}$$

특이분해된 등식의 양변에 V를 곱하면,

$$AV = U\Sigma V^T V = U\Sigma$$

$$A \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots \\ 0 & \sigma_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

행렬 A를 곱하여 정리하면 M이 N보다 클 때는

$$\begin{bmatrix} Av_1 & Av_2 & \cdots & Av_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 u_1 & \sigma_2 u_2 & \cdots & \sigma_N u_N \end{bmatrix}$$

이 되고 N이 M보다 클 때는

$$\begin{bmatrix} Av_1 & Av_2 & \cdots & Av_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 u_1 & \sigma_2 u_2 & \cdots & \sigma_M u_M \end{bmatrix}$$

이 된다.

즉, i번째 특잇값 σ_i와 특이벡터 u_i, v_i는 다음과 같은 관계가 있다.

$$Av_i = \sigma_i u_i \;\; (i = 1, \cdots, \min(M, N))$$

이 관계는 고유분해와 비슷하지만 고유분해와는 달리 좌변과 우변의 벡터가 다르다.

예제

위에서 예로 들었던 행렬의 경우,

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \sqrt{12} \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{2}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \sqrt{10} \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} \\ -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ 0 \end{bmatrix}$$

가 성립한다.

연습 문제 3.4.2

NumPy를 사용하여 다음 행렬에 대해

$$Av_i = \sigma_i u_i$$

가 성립한다는 것을 계산으로 보여라.

$$B = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & -2 \end{bmatrix}$$

$$C = \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 1 & 3 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

특이분해와 고유분해의 관계

행렬 A의 분산행렬 A^TA는

$$A^TA = (V\Sigma^TU^T)(U\Sigma V^T) = V\Lambda V^T$$

가 되어 행렬 A의 특잇값의 제곱(과 0)이 분산행렬 A^TA의 고유값, **행렬 A의 오른쪽 특이벡터가 분산행렬 A^TA의 고유벡터**가 된다.

위 식에서 Λ은 N이 M보다 크면

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_M^2 \end{bmatrix}$$

이고 N이 M보다 작으면

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_N^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} = \text{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_N^2, 0, \cdots, 0)$$

이다.

마찬가지 방법으로 **행렬 A의 왼쪽 특이벡터가 행렬 AA^T의 고유벡터**가 된다는 것을 증명할 수 있다.

```
w, V = np.linalg.eig(A.T @ A)
```

```
w  # A.T A의 고윳값
```

```
array([12., 10.])
```

```
S ** 2  # A의 특잇값의 제곱
```

```
array([12., 10.])
```

```
V  # A.T A의 고유벡터
```

```
array([[ 0.70710678, -0.70710678],
       [ 0.70710678,  0.70710678]])
```

```
VT.T  # A의 오른쪽 특이벡터
```

```
array([[-0.70710678,  0.70710678],
       [-0.70710678, -0.70710678]])
```

연습 문제 3.4.3

NumPy를 사용하여 행렬 A의 왼쪽 특이벡터가 행렬 AA^T의 고유벡터가 된다는 것을 보여라.

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

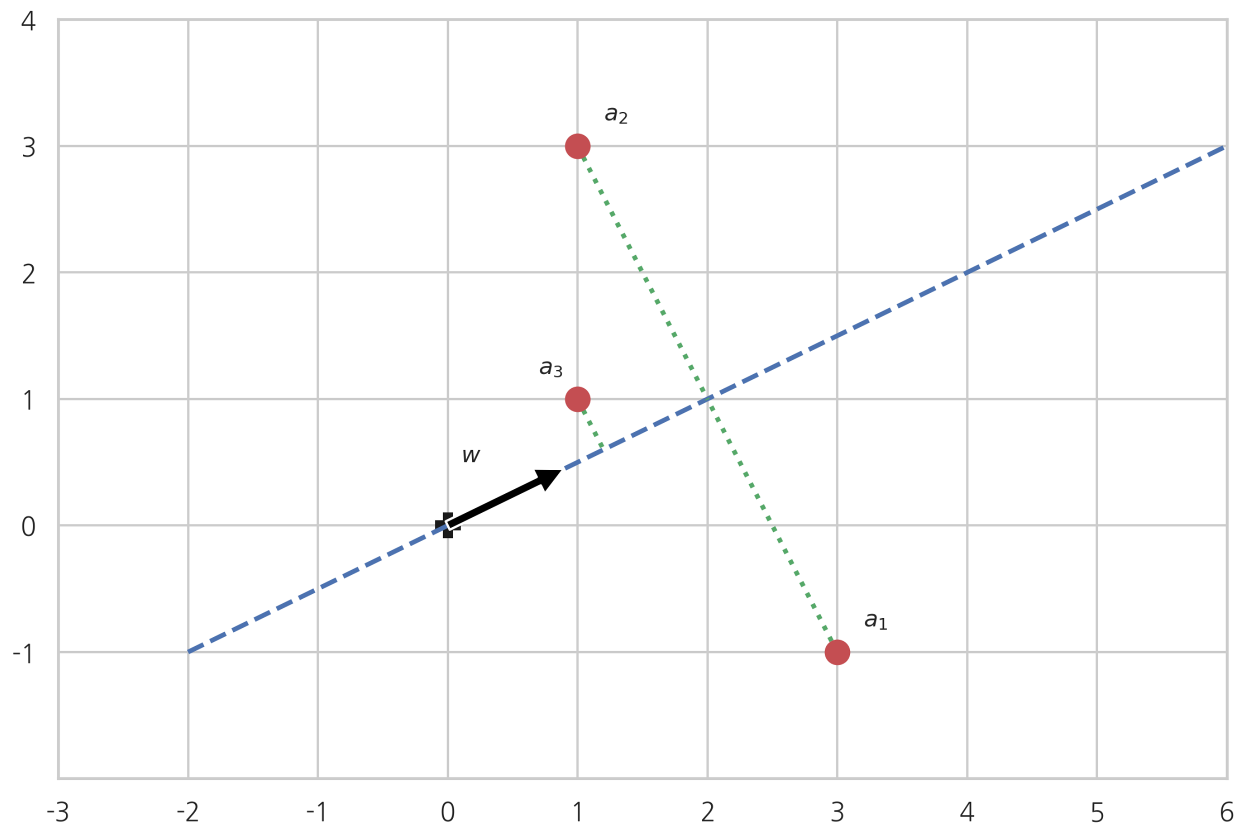
1차원 근사

2차원 평면 위에 3개의 2차원 벡터 a_1, a_2, a_3가 있다. 원점을 지나면서 모든 점들과 가능한 한 가까이 있는 직선을 만들고 싶다면 직선의 방향을 어떻게 해야 할까? 직선의 방향을 나타내는 단위 벡터를 w라고 하자.

```
w = np.array([2, 1]) / np.sqrt(5)
a1 = np.array([3, -1])
a2 = np.array([1, 3])
a3 = np.array([1, 1])

black = {"facecolor": "black"}

plt.figure(figsize=(9, 6))
plt.plot(0, 0, 'kP', ms=10)
plt.annotate('', xy=w, xytext=(0, 0), arrowprops=black)
plt.plot([-2, 8], [-1, 4], 'b--', lw=2)
plt.plot([a1[0], 2], [a1[1], 1], 'g:', lw=2)
plt.plot([a2[0], 2], [a2[1], 1], 'g:', lw=2)
plt.plot([a3[0], 1.2], [a3[1], 0.6], 'g:', lw=2)
plt.plot(a1[0], a1[1], 'ro', ms=10)
plt.plot(a2[0], a2[1], 'ro', ms=10)
plt.plot(a3[0], a3[1], 'ro', ms=10)
plt.text(0.1, 0.5, "$w$")
plt.text(a1[0] + 0.2, a1[1] + 0.2, "$a_1$")
plt.text(a2[0] + 0.2, a2[1] + 0.2, "$a_2$")
plt.text(a3[0] - 0.3, a3[1] + 0.2, "$a_3$")
plt.xticks(np.arange(-3, 15))
plt.yticks(np.arange(-1, 5))
plt.xlim(-3, 6)
plt.ylim(-2, 4)
plt.show()
```



벡터 w와 점 a_i의 거리의 제곱은 다음처럼 계산할 수 있다.(연습 문제 3.1.9)

$$\| a_i^{\perp w} \|^2 = \| a_i \|^2 - \| a_i^{\parallel w} \|^2 = \| a_i \|^2 - (a_i^T w)^2$$

벡터 a_1, a_2, a_3를 행벡터로 가지는 행렬 A를 가정하면

$$A = \begin{bmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ a_3^T \end{bmatrix}$$

행벡터의 놈의 제곱의 합은 행렬의 놈이므로 모든 점들과의 거리의 제곱의 합은 행렬의 놈으로 계산된다. (연습 문제 2.3.2)

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{3} \| a_i^{\perp w} \|^2 &= \sum_{i=1}^{3} \| a_i \|^2 - \sum_{i=1}^{3} (a_i^T w)^2 \\ &= \| A \|^2 - \| Aw \|^2 \end{aligned}$$

점 a_i의 위치가 고정되어 있으므로 행렬 A의 놈 값은 고정되어 있다. 따라서 이 값이 가장 작아지려면 $\| Aw \|^2$의 값이 가장 크게 만드는 w를 찾아야 한다.이 문제는 다음처럼 수식으로 쓸 수 있다.

$$\arg\max_w \| Aw \|^2$$

1차원 근사의 풀이

위에서 예로 든 행렬 $A \in \mathbf{R}^{3 \times 2}$를 특이분해하면 2개의 특잇값, 왼쪽/오른쪽 특이벡터를 가진다. 이를 각각 다음처럼 이름붙인다.

- 첫 번째 특잇값: σ_1, 첫 번째 왼쪽 특이벡터 $u_1 \in \mathbf{R}^3$, 첫 번째 오른쪽 특이벡터 $v_1 \in \mathbf{R}^2$
- 두 번째 특잇값: σ_2, 두 번째 왼쪽 특이벡터 $u_2 \in \mathbf{R}^3$, 두 번째 오른쪽 특이벡터 $v_2 \in \mathbf{R}^2$

첫 번째 특잇값 σ_1은 두 번째 특잇값 σ_2보다 같거나 크다.

$$\sigma_1 \geq \sigma_2$$

또한 위에서 알아낸 것처럼 A에 오른쪽 특이벡터를 곱하면 왼쪽 특이벡터 방향이 된다.

$$Av_1 = \sigma_1 u_1$$

$$Av_2 = \sigma_2 u_2$$

오른쪽 특이벡터 v_1, v_2는 서로 직교하므로 (같은 방향이 아니라서) 선형독립이고 2차원 평면공간의 기저벡터가 될 수 있다.

우리는 $\| Aw \|$의 값이 가장 크게 만드는 w를 찾아야 하는데 w는 2차원 벡터이므로 2차원 평면공간의 기저벡터인 v_1, v_2의 선형조합으로 표현할 수 있다.

$$w = w_1 v_1 + w_2 v_2$$

단, w도 단위벡터이므로 w_1, w_2는 다음 조건을 만족해야 한다.

$$w_1^2 + w_2^2 = 1$$

이때 $\| Aw \|$의 값은

$$\begin{aligned}
\| Aw \|^2 &= \| A(w_1 v_1 + w_2 v_2) \|^2 \\
&= \| w_1 A v_1 + w_2 A v_2 \|^2 \\
&= \| w_1 \sigma_1 u_1 + w_2 \sigma_2 u_2 \|^2 \\
&= \| w_1 \sigma_1 u_1 \|^2 + \| w_2 \sigma_2 u_2 \|^2 \quad \text{(orthogonal)} \\
&= w_1^2 \sigma_1^2 \| u_1 \|^2 + w_2^2 \sigma_2^2 \| u_2 \|^2 \\
&= w_1^2 \sigma_1^2 + w_2^2 \sigma_2^2 \quad \text{(unit vector)}
\end{aligned}$$

$\sigma_1 > \sigma_2 > 0$ 이므로 $w_1^2 + w_2^2 = 1$라는 조건을 만족하면서 위 값을 가장 크게 하는 w_1, w_2값은

$$w_1 = 1, w_2 = 0$$

이다. 즉, 첫 번째 오른쪽 특이벡터 방향으로 하는 것이다.

$$w = v_1$$

이때 $\| Aw \|$는 첫 번째 특잇값이 된다.

$$\| Aw \| = \| Av_1 \| = \| \sigma_1 u_1 \| = \sigma_1 \| u_1 \| = \sigma_1$$

위에서 예로 들었던 행렬

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

첫 번째 오른쪽 특이벡터

$$v_1 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

가 가장 거리의 합이 작은 방향이 된다. 그리고 이때의 거리의 제곱의 합은 다음과 같다.

$$\| A \|^2 - \| Aw \|^2 = \| A \|^2 - \sigma_1^2$$

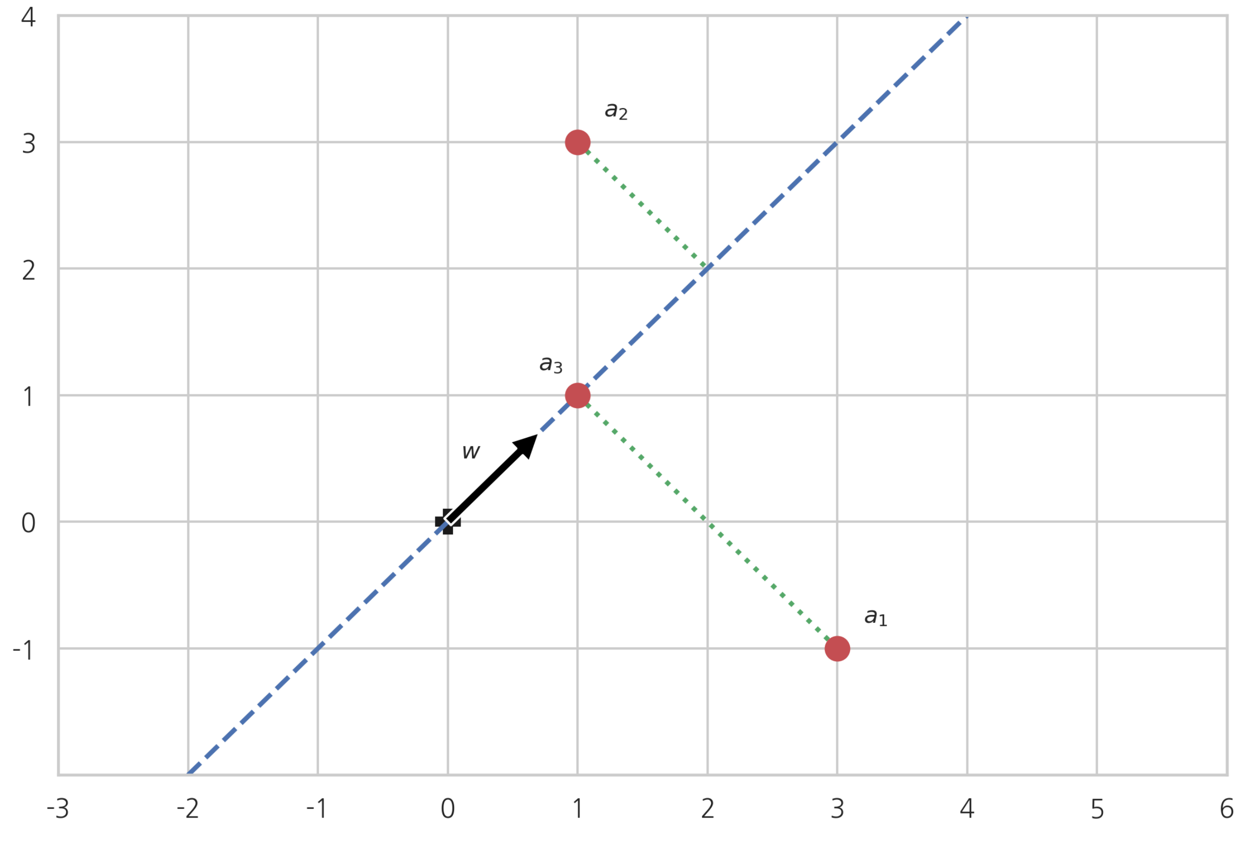
```
np.linalg.norm(A)**2 - S[0]**2
```

```
9.999999999999998
```

```
w = np.array([1, 1]) / np.sqrt(2)
a1 = np.array([3, -1])
a2 = np.array([1, 3])
a3 = np.array([1, 1])

black = {"facecolor": "black"}

plt.figure(figsize=(9, 6))
plt.plot(0, 0, 'kP', ms=10)
plt.annotate('', xy=w, xytext=(0, 0), arrowprops=black)
plt.plot([-2, 4], [-2, 4], 'b--', lw=2)
plt.plot([a1[0], 1], [a1[1], 1], 'g:', lw=2)
plt.plot([a2[0], 2], [a2[1], 2], 'g:', lw=2)
plt.plot(a1[0], a1[1], 'ro', ms=10)
plt.plot(a2[0], a2[1], 'ro', ms=10)
plt.plot(a3[0], a3[1], 'ro', ms=10)
plt.text(0.1, 0.5, "$w$")
plt.text(a1[0] + 0.2, a1[1] + 0.2, "$a_1$")
plt.text(a2[0] + 0.2, a2[1] + 0.2, "$a_2$")
plt.text(a3[0] - 0.3, a3[1] + 0.2, "$a_3$")
plt.xticks(np.arange(-3, 15))
plt.yticks(np.arange(-1, 5))
plt.xlim(-3, 6)
plt.ylim(-2, 4)
plt.show()
```



일반적인 풀이

만약 $N = 3$이 아니라 일반적인 경우에는 다음처럼 풀 수 있다.

$$
\begin{aligned}
\| Aw \|^2 &= \sum_{i=1}^{N} (a_i^T w)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{N} (a_i^T w)^T (a_i^T w) \\
&= \sum_{i=1}^{N} w^T a_i a_i^T w \\
&= w^T \left(\sum_{i=1}^{N} a_i a_i^T \right) w \\
&= w^T A^T A w
\end{aligned}
$$

분산행렬의 고유분해 공식을 이용하면,

$$
\begin{aligned}
w^T A^T A w &= w^T V \Lambda V^T w \\
&= w^T \left(\sum_{i=1}^{M} \sigma_i^2 v_i v_i^T \right) w \\
&= \sum_{i=1}^{M} \sigma_i^2 (w^T v_i)(v_i^T w) \\
&= \sum_{i=1}^{M} \sigma_i^2 \| v_i^T w \|^2
\end{aligned}
$$

이 된다. 이 식에서 M은 0이 아닌 특잇값 개수다.

즉, 우리가 풀어야 할 문제는 다음과 같다.

$$
\arg\max_w \| Aw \|^2 = \arg\max_w \sum_{i=1}^{M} \sigma_i^2 \| v_i^T w \|^2
$$

이 값을 가장 크게 하려면 w를 가장 큰 특잇값에 대응하는 오른쪽 고유벡터 v_1으로 해야 한다.

랭크-1 근사문제

또 a_i를 w에 투영한 벡터는

$$
a_i^{\Vert w} = (a_i^T w) w
$$

이므로 w 벡터를 이용하면 N개의 M차원 벡터 $a_1, a_2, \cdots, a_N \, (a_i \in \mathbf{R}^M)$를 1차원으로 투영(projection)하여 가장 비슷한 N개의 1차원 벡터 $a_1^{\Vert w}, a_2^{\Vert w}, \cdots, a_N^{\Vert w} \, (a_i^{\Vert w} \in \mathbf{R}^1)$를 만들 수 있다.

$$
A' = \begin{bmatrix} \left(a_1^{\Vert w}\right)^T \\ \left(a_2^{\Vert w}\right)^T \\ \vdots \\ \left(a_N^{\Vert w}\right)^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1^T w w^T \\ a_2^T w w^T \\ \vdots \\ a_N^T w w^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ \vdots \\ a_N^T \end{bmatrix} w w^T = A w w^T
$$

이 답은 원래 행렬 A에 랭크-1 행렬 ww^T를 곱해서 원래의 행렬 A와 가장 비슷한 행렬 A'을 만드는 문제와 같다.

$$
\arg\min_w \| A - A' \| = \arg\min_w \| A - Aww^T \|
$$

따라서 문제를 **랭크-1 근사문제(rank-1 approximation problem)**라고도 한다.

K차원 근사

이번에는 N개의 M차원 벡터 $a_1, a_2, \cdots, a_N \, (a_i \in \mathbf{R}^M)$를 1차원이 아니라 정규직교인 기저벡터 $w_1, w_2, \cdots, w_K$로 이루어진 K차원 벡터공간으로 투영하여 가장 비슷한 N개의 K차원 벡터 $a_1^{\Vert w}, a_2^{\Vert w}, \cdots, a_N^{\Vert w}$를 만들기 위한 정규직교 기저벡터 $w_1, w_2, \cdots, w_K$를 찾는 문제를 생각하자. 이 문제는 랭크-K 근사문제라고 한다.

기저벡터행렬을 W라고 하자.

$$W = \begin{bmatrix} w_1 & w_2 & \cdots & w_K \end{bmatrix}$$

정규직교 기저벡터에 대한 벡터 a_i의 투영 $a_i^{\Vert w}$는 각 기저벡터에 대한 내적으로 만들 수 있다.

$$a_i^{\Vert w} = (a_i^T w_1) w_1 + (a_i^T w_2) w_2 + \cdots + (a_i^T w_K) w_K = \sum_{k=1}^{K} (a_i^T w_k) w_k$$

벡터 $a_1, a_2, \cdots, a_N$를 행벡터로 가지는 행렬 A를 가정하면

$$A = \begin{bmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ \vdots \\ a_N^T \end{bmatrix}$$

모든 점들과의 거리의 제곱의 합은 다음처럼 행렬의 놈으로 계산할 수 있다.

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N} \Vert a_i^{\perp w} \Vert^2 &= \sum_{i=1}^{N} \Vert a_i \Vert^2 - \sum_{i=1}^{N} \Vert a_i^{\Vert w} \Vert^2 \\ &= \Vert A \Vert^2 - \sum_{i=1}^{N} \Vert a_i^{\Vert w} \Vert^2 \end{aligned}$$

행렬 A는 이미 주어져있으므로 이 값을 가장 작게 하려면 두 번째 항의 값을 가장 크게 하면 된다. 두 번째 항은 K=1일 때와 같은 방법으로 분산행렬 형태로 바꿀 수 있다.

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N} \Vert a_i^{\Vert w} \Vert^2 &= \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \Vert (a_i^T w_k) w_k \Vert^2 \\ &= \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \Vert a_i^T w_k \Vert^2 \\ &= \sum_{k=1}^{K} w_k^T A^T A w_k \end{aligned}$$

분산행렬의 고유분해를 사용하면

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{K} w_k^T A^T A w_k &= \sum_{k=1}^{K} w_k^T V \Lambda V^T w_k \\ &= \sum_{k=1}^{K} w_k^T \left(\sum_{i=1}^{M} \sigma_i^2 v_i v_i^T \right) w_k \\ &= \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{M} \sigma_i^2 \Vert v_i^T w_k \Vert^2 \end{aligned}$$

이 문제도 1차원 근사문제처럼 풀면 다음과 같은 답을 얻을 수 있다.

> **가장 큰 K개의 특잇값에 대응하는 오른쪽 특이벡터가 기저벡터일 때 가장 값이 커진다.**

랭크-K 근사문제

우리가 찾아야 하는 것은 이 값을 가장 크게 하는 K개의 영벡터가 아닌 직교하는 단위벡터 w_k이다. 고유분해의 성질로부터 **오른쪽 기저벡터 중 가장 큰 K개의 특잇값에 대응하는 오른쪽 특이벡터가 우리가 찾는 기저벡터가 된다.**

이 문제는 다음처럼 랭크-K 근사문제의 형태로 만들 수도 있다.

$$
\begin{aligned}
a_i^{\parallel w} &= (a_i^T w_1) w_1 + (a_i^T w_2) w_2 + \cdots + (a_i^T w_K) w_K \\
&= \begin{bmatrix} w_1 & w_2 & \cdots & w_K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_i^T w_1 \\ a_i^T w_2 \\ \vdots \\ a_i^T w_K \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} w_1 & w_2 & \cdots & w_K \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1^T \\ w_2^T \\ \vdots \\ w_K^T \end{bmatrix} a_i \\
&= W W^T a_i
\end{aligned}
$$

이러한 투영벡터를 모아놓은 행렬 A'는

$$
A' = \begin{bmatrix} \left(a_1^{\parallel w}\right)^T \\ \left(a_2^{\parallel w}\right)^T \\ \vdots \\ \left(a_N^{\parallel w}\right)^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1^T W W^T \\ a_2^T W W^T \\ \vdots \\ a_N^T W W^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ \vdots \\ a_N^T \end{bmatrix} W W^T = A W W^T
$$

따라서 이 문제는 원래 행렬 A에 랭크-K 행렬 WW^T를 곱해서 원래의 행렬 A와 가장 비슷한 행렬 A'을 만드는 문제와 같다.

$$
\arg \min_{w_1, \cdots, w_K} \| A - A W W^T \|
$$

By 김도형