행렬대수 1 - 특이값 분해

시립대학교 통계학과

2019년 5월 27일

1 고유값과 고유벡터

n 차원 대칭행렬 $\boldsymbol{A}$ 의 고유값은 실수이며 고유벡터는 서로 직교하는 성질로부터 다음과 같은 스펙트럴 분해(spectral decomposition)가 얻어진다.

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^t \tag{1}$$

여기서 $\boldsymbol{\Lambda}$는 고유값을 대각원소로 하는 대각행렬이고 $\boldsymbol{P}$는 정규직(orthonormal) 고유벡터들의 열로 구성된 직교행렬이다.

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_k = \lambda_k \boldsymbol{q}_k, \quad k = 1, 2, \ldots, n$$

$$|\boldsymbol{q}_k| = \sqrt{\boldsymbol{q}_k^t \boldsymbol{q}_k} = 1 \quad k = 1, 2, \ldots, n$$

$$\boldsymbol{q}_l^t \boldsymbol{q}_k = 0 \quad l \neq k$$

$$\boldsymbol{P} = [\boldsymbol{q}_1 \ \boldsymbol{q}_2 \ \ldots \ \boldsymbol{q}_n] \text{ and } \boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^t = \boldsymbol{P}^t\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I}$$

$$\boldsymbol{\Lambda} = diag(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$$

대칭행렬과 고유값에 대한 중요한 성질들은 다음과 같다.

- 대칭행렬 $\boldsymbol{A}$가 비음정치 행렬이면 고유값들은 음이 아닌 실수이다.
- 만약 행렬 $\boldsymbol{A}$가 비음정치 행렬이면 스펙트럴 분해를 통해서 다음과 같이 행렬의 곱으로 나타낼 수 있다.
$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^t = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{P}^t\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{P}^t = \boldsymbol{H}\boldsymbol{H}, \quad \text{where } \boldsymbol{H} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{P}^t$$
- 또한 행렬 $\boldsymbol{A}$가 비음정치 행렬이고 그 계수가 r이면 다음과 같이 최대열계수 $n \times r$ 행렬 $\boldsymbol{L}$으로 나타낼 수 있다.

$$A = P\Lambda P^t = P \begin{bmatrix} D_r^{1/2} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_r^{1/2} & \mathbf{0}^t \end{bmatrix} P^t = LL^t$$

위에서 $\Lambda = diag\{D_r, \mathbf{0}\}$ 이다.

또한 A가 $m \times n$ 행렬이라면(정방행렬이 아닐 수도 있다) $A^t A$와 AA^t는 비음정치 행렬이다.

2 R을 이용한 고유값과 고유벡터 계산

교과서 p381-383 R을 이용한 행렬계산 기초를 읽으세요!

2.1 예제 6.14

```
A = matrix(c(37, -2, -24, -2, 13, -3, -24, -3, 17),3,3)
A
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]   37   -2  -24
## [2,]   -2   13   -3
## [3,]  -24   -3   17
```

```
eigen(A)
```

```
## eigen() decomposition
## $values
## [1] 5.300000e+01 1.400000e+01 7.105427e-15
##
## $vectors
##            [,1]       [,2]       [,3]
## [1,]  0.8320503  0.1482499 -0.5345225
## [2,]  0.0000000 -0.9636241 -0.2672612
## [3,] -0.5547002  0.2223748 -0.8017837
```

```
Lambda = diag(eigen(A)$values)
Lambda
```

```
##      [,1] [,2]         [,3]
## [1,]   53    0 0.000000e+00
## [2,]    0   14 0.000000e+00
## [3,]    0    0 7.105427e-15
```

```
P = eigen(A)$vectors
P
```

```
##            [,1]       [,2]       [,3]
## [1,]  0.8320503  0.1482499 -0.5345225
## [2,]  0.0000000 -0.9636241 -0.2672612
## [3,] -0.5547002  0.2223748 -0.8017837
```

```
P %*% t(P)
```

```
##               [,1]         [,2]          [,3]
## [1,]  1.000000e+00 5.551115e-17 -1.665335e-16
## [2,]  5.551115e-17 1.000000e+00  1.942890e-16
## [3,] -1.665335e-16 1.942890e-16  1.000000e+00
```

```
P %*% Lambda %*% t(P)
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]   37   -2  -24
## [2,]   -2   13   -3
## [3,]  -24   -3   17
```

2.2 정리 6.9

```
Lambda2 = sqrt(Lambda[1:2,1:2])
Lambda2
```

```
##         [,1]     [,2]
## [1,] 7.28011 0.000000
## [2,] 0.00000 3.741657
```

```
P2 = P[,c(1,2)]
```

```r
P2
```

```
##            [,1]       [,2]
## [1,]  0.8320503  0.1482499
## [2,]  0.0000000 -0.9636241
## [3,] -0.5547002  0.2223748
```

```r
L = P2 %*% Lambda2
L
```

```
##           [,1]       [,2]
## [1,]  6.057418  0.5547002
## [2,]  0.000000 -3.6055513
## [3,] -4.038278  0.8320503
```

```r
L %*% t(L)
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]   37   -2  -24
## [2,]   -2   13   -3
## [3,]  -24   -3   17
```

3 특이값 분해의 정의

3.1 특이값과 특이벡터

고유값과 고유벡터는 정방행렬인 경우 정의되는 것으로서 행렬이 정방행렬이 아닌 경우에는 구할 수 없다. 이제 고유값과 유사한 성질을 가지는 특이값을 일반행렬에서 정의해보자.

$\boldsymbol{A}$가 $m \times n$ 일반행렬이라고 가정하고 그 계수 r이라고 하자 ($r(\boldsymbol{A}) = r$). 이제 서로 직교하는 n-차원의 벡터들의 집합 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n$과 다른 직교하는 m-차원의 벡터들의 집합 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_m$을 생각하자.

행렬 $\boldsymbol{A}$의 특이값(sigular values) $\sigma_1 \ge \sigma_2 \ge \cdots \ge \sigma_r > 0$과 왼쪽 특이벡터(left singular vectors) $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_m$ 그리고 오른쪽 특이벡터(right singular vectors) $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ 는 다음과 같은 성질을 만족한다.

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 = \sigma_1 \boldsymbol{u}_1, \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 = \sigma_2 \boldsymbol{u}_2, \quad \ldots \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_r = \sigma_r \boldsymbol{u}_r, \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_{r+1} = \boldsymbol{0}, \quad \ldots, \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_n = \boldsymbol{0} \tag{2}$$

$n \times n$ 정방행렬 $\boldsymbol{V}$와 $m \times m$ 정방행렬 $\boldsymbol{U}$ 를 각각 서로 직교하는 정규벡터 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ 과 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_m$

으로 구성되는 직교행렬이라고 하자.

$$\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2\ \ldots\ \boldsymbol{v}_n], \quad \boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1\ \boldsymbol{u}_2\ \ldots\ \boldsymbol{u}_m]$$

식 (2)에 나타난 관계를 행렬 $\boldsymbol{V}$와 $\boldsymbol{U}$로 나타내면 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\boldsymbol{AV} = \boldsymbol{U\Sigma} \tag{3}$$

위에서 $m \times n$ 행렬 $\boldsymbol{\Sigma}$는 다음과 같은 형태를 가진다.

$$\boldsymbol{\Sigma} = \left[\begin{array}{cccc|c} \sigma_1 & & 0 & & \\ & \sigma_2 & & & \\ & & \ddots & & \mathbf{0} \\ & 0 & & \sigma_r & \\ \hline & & \mathbf{0} & & \mathbf{0} \end{array}\right] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

3.2 특이값 분해

이제 행렬 $\boldsymbol{V}$가 직교행렬을 이용하면 다음과 같은 특이값 분해(singular value decomposition)을 정의할 수 있다.

$$\underset{m\times n}{\boldsymbol{A}} = \underset{m\times m}{\boldsymbol{U}}\ \underset{m\times n}{\boldsymbol{\Sigma}}\ \underset{n\times n}{\boldsymbol{V}^t} \tag{4}$$

위의 식 (4)을 전개하면 다음과 같이 계수가 1인 행렬 $\boldsymbol{u}_k\boldsymbol{v}_k^t$ 들의 선형조합으로 행렬 $\boldsymbol{A}$를 나타낼 수 있다.

$$\boldsymbol{A} = \sigma_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^t + \sigma_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^t + \ldots \sigma_r\boldsymbol{u}_r\boldsymbol{v}_r^t \tag{5}$$

또한 식 (3)에서 $\boldsymbol{\Sigma}$에서 0이 되는 값을 제외하면 처음 r개의 요소들만 이루어진 부분으로만 축소된 특이값 분해를 구할 수 있다.

$$\boldsymbol{AV}_r = \boldsymbol{U}_r\boldsymbol{\Sigma}_r, \quad \boldsymbol{A}[\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2\ \ldots\ \boldsymbol{v}_r] = [\boldsymbol{u}_1\ \boldsymbol{u}_2\ \ldots\ \boldsymbol{u}_r]\begin{bmatrix} \sigma_1 & & 0 & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & 0 & & \sigma_r \end{bmatrix} \tag{6}$$

위의 식 (6)에서 주의할 점은 행렬 $\boldsymbol{V}_r$과 $\boldsymbol{U}_r$은 정방행렬이 아니고 직교행렬도 아니다. $\boldsymbol{V}_r^t\boldsymbol{V}_r = \boldsymbol{I}$와 $\boldsymbol{U}_r^t\boldsymbol{U}_r = \boldsymbol{I}$이 성립하지만 일반적으로 $\boldsymbol{V}_r\boldsymbol{V}_r^t \neq \boldsymbol{I}$, $\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{U}_r^t \neq \boldsymbol{I}$이다.

4 특이값과 특이벡터의 계산

$m \times n$ 행렬 $\boldsymbol{A}$의 특이값 분해 (4)로 부터 행렬 $\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}$와 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^t$를 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^t\boldsymbol{U}^t)(\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^t) = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^t\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^t \tag{7}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^t = (\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^t)(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^t\boldsymbol{U}^t) = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\Sigma^t\boldsymbol{U}^t \tag{8}$$

정방행렬의 역행렬은 다음과 같이 행렬식과 여인자 행렬을 이용하여 구한다. 예를 들어 다음과 같은 2×2 행렬 A의 역행렬은

위에서 $\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}$와 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^t$는 모두 대칭행렬이지만 서로 차원이 다르다. 또한 식 (7) 과 (8)을 보면 두 행렬이 모두 $\boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{Q}^t$의 형식으로 분해되는 것을 알 수 있다. 즉 다음과 같은 사실을 알 수 있다.

- $n \times n$ 비음정치행렬 $\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}$의 고유벡터 행렬은 $\boldsymbol{V}$이다.
- $m \times m$ 비음정치행렬 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^t$의 고유벡터 행렬은 $\boldsymbol{U}$이다.
- 행렬 $\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}$와 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^t$의 0이 아닌 고유값은 $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \ldots, \sigma_r^2$ 이다.

따라서 다음과 같은 방법으로 특이값과 특이벡터를 계산할 수 있다. 위의 방법은 두 행렬 $\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}$와 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^t$를 모두 구하지 않고 $\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}$의 고유값과 고유벡터만으로 특이값 분해를 구하는 방법이다 (만약 행렬 $\boldsymbol{A}$가 100000×5이라면 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^t$는 100000×100000이다!)

먼저 $\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}$의 고유벡터 $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r$을 다음과 같은 고유값과 고유벡터의 정의로 먼저 구한다.

$$\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_k = \lambda_k\boldsymbol{v}_k = \sigma_k^2\boldsymbol{v}_k, \quad k = 1, 2, \ldots, r \tag{9}$$

다음으로 다음의 식으로 $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_r$ 를 구한다.

$$\boldsymbol{u}_k = \frac{\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_k}{\sigma_k}, \quad k = 1, 2, \ldots, r \tag{10}$$

식 (10)에서 다음과 같이 $\boldsymbol{u}_k$가 행렬 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^t$의 고유벡터임을 확인할 수 있다.

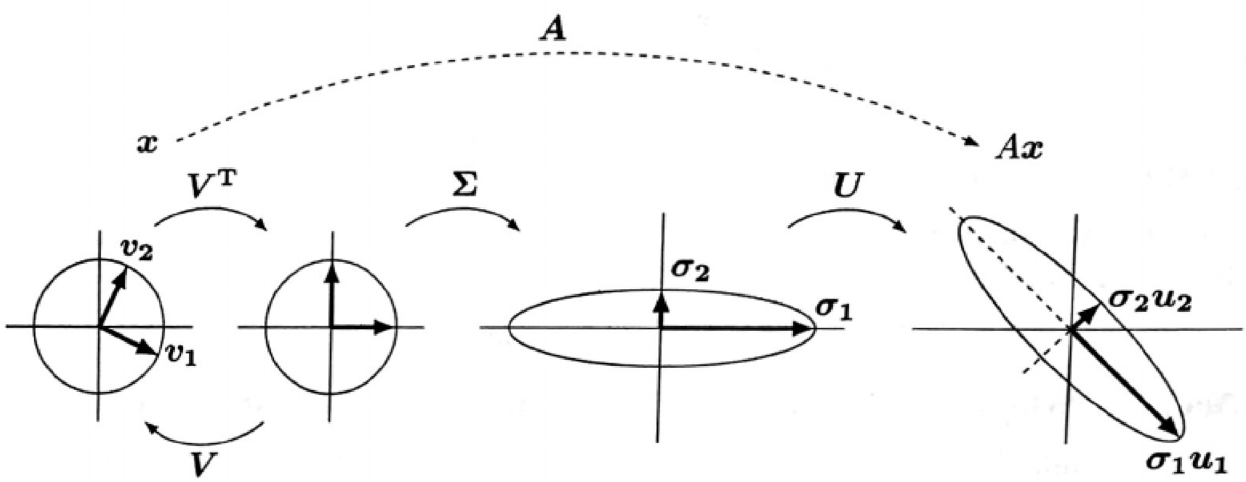
$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{u}_k = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^t\left(\frac{\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_k}{\sigma_k}\right) = \boldsymbol{A}\left(\frac{\sigma_k^2\boldsymbol{v}_k}{\sigma_k}\right) = \sigma_k^2\boldsymbol{u}_k$$

또한 식 (9)에서 $\boldsymbol{v}_k$는 정규직교벡터이므로 다음과 같이 $\boldsymbol{u}_k$도 정규직교행려임을 보일 수 있다.

$$\boldsymbol{u}_k^t\boldsymbol{u}_l = \left(\frac{\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_k}{\sigma_k}\right)^t\left(\frac{\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_l}{\sigma_l}\right) = \frac{\boldsymbol{v}_k^t(\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_l)}{\sigma_k\sigma_l} = \frac{\sigma_l}{\sigma_k}\boldsymbol{v}_k^t\boldsymbol{v}_l = \begin{cases} 1 & \text{if } k = l \\ 0 & \text{if } k \neq l \end{cases}$$

위에서 구한 r개의 $\boldsymbol{v}_k$와 $\boldsymbol{u}_k$외에 $n-r$과 $m-r$ 개의 서로 직교하는 나머지 $\boldsymbol{v}$와 $\boldsymbol{u}$도 구할 수 있다 (아직 배우지 않았지만 받아들이자!).

5 특이값 분해의 기하학적 의미



6 예제

6.1 예제 7.3

```
A = matrix(c(2,0, 1,1,0,2,1,1,1,1,1,1),3,4,byrow=T)
A

##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,]    2    0    1    1
## [2,]    0    2    1    1
## [3,]    1    1    1    1

res <- svd(A, nu=3, nv =4)
res

## $d
## [1] 3.464102 2.000000 0.000000
##
## $u
```

```
##            [,1]          [,2]       [,3]
## [1,] 0.5773503  7.071068e-01 -0.4082483
## [2,] 0.5773503 -7.071068e-01 -0.4082483
## [3,] 0.5773503 -1.110223e-16  0.8164966
##
## $v
##      [,1]          [,2]       [,3]       [,4]
## [1,]  0.5  7.071068e-01 -0.3535534 -0.3535534
## [2,]  0.5 -7.071068e-01 -0.3535534 -0.3535534
## [3,]  0.5  1.110223e-16  0.8535534 -0.1464466
## [4,]  0.5  1.110223e-16 -0.1464466  0.8535534
```

```
U <- res$u
U
```

```
##            [,1]          [,2]       [,3]
## [1,] 0.5773503  7.071068e-01 -0.4082483
## [2,] 0.5773503 -7.071068e-01 -0.4082483
## [3,] 0.5773503 -1.110223e-16  0.8164966
```

```
V <- res$v
V
```

```
##      [,1]          [,2]       [,3]       [,4]
## [1,]  0.5  7.071068e-01 -0.3535534 -0.3535534
## [2,]  0.5 -7.071068e-01 -0.3535534 -0.3535534
## [3,]  0.5  1.110223e-16  0.8535534 -0.1464466
## [4,]  0.5  1.110223e-16 -0.1464466  0.8535534
```

```
D <- diag(res$d,3,4)
D
```

```
##          [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,] 3.464102    0    0    0
## [2,] 0.000000    2    0    0
## [3,] 0.000000    0    0    0
```

```
U %*% D %*% t(V)
```

```
##                [,1]          [,2] [,3] [,4]
## [1,]  2.000000e+00 -1.110223e-16    1    1
## [2,] -2.220446e-16  2.000000e+00    1    1
## [3,]  1.000000e+00  1.000000e+00    1    1
```

6.2 예제 7.3- 고유값, 고유벡터의 응용

```
A = matrix(c(2,0, 1,1,0,2,1,1,1,1,1,1),3,4,byrow=T)
AtA = t(A) %*% A
AtA
```

```
##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,]    5    1    3    3
## [2,]    1    5    3    3
## [3,]    3    3    3    3
## [4,]    3    3    3    3
```

```
AAt = A %*% t(A)
AAt
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    6    2    4
## [2,]    2    6    4
## [3,]    4    4    4
```

```
eigen(AtA)
```

```
## eigen() decomposition
## $values
## [1] 1.200000e+01 4.000000e+00 8.881784e-15 0.000000e+00
##
## $vectors
##      [,1]          [,2] [,3]          [,4]
## [1,]  0.5  7.071068e-01  0.5  0.000000e+00
```

```
## [2,]  0.5 -7.071068e-01  0.5 -6.824628e-17
## [3,]  0.5  9.436896e-16 -0.5 -7.071068e-01
## [4,]  0.5  8.881784e-16 -0.5  7.071068e-01
```

```r
eigen(AAt)
```

```
## eigen() decomposition
## $values
## [1] 1.20000e+01 4.00000e+00 1.24345e-14
##
## $vectors
##            [,1]          [,2]       [,3]
## [1,] -0.5773503  7.071068e-01 -0.4082483
## [2,] -0.5773503 -7.071068e-01 -0.4082483
## [3,] -0.5773503  1.776357e-15  0.8164966
```

```r
eigvalues <- eigen(AtA)$values
eigvalues
```

```
## [1] 1.200000e+01 4.000000e+00 8.881784e-15 0.000000e+00
```

```r
Sigma  = matrix(0,3,4)
Sigma[1,1] = sqrt(eigvalues[1])
Sigma[2,2] = sqrt(eigvalues[2])
Sigma
```

```
##          [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,] 3.464102    0    0    0
## [2,] 0.000000    2    0    0
## [3,] 0.000000    0    0    0
```

```r
V = eigen(AtA)$vectors
V
```

```
##      [,1]          [,2] [,3]          [,4]
## [1,]  0.5  7.071068e-01  0.5  0.000000e+00
## [2,]  0.5 -7.071068e-01  0.5 -6.824628e-17
## [3,]  0.5  9.436896e-16 -0.5 -7.071068e-01
## [4,]  0.5  8.881784e-16 -0.5  7.071068e-01
```

```r
U = eigen(AAt)$vectors
U
```

```
##            [,1]          [,2]       [,3]
## [1,] -0.5773503  7.071068e-01 -0.4082483
## [2,] -0.5773503 -7.071068e-01 -0.4082483
## [3,] -0.5773503  1.776357e-15  0.8164966
```

```r
U[,1]=-U[,1]  # Caution: Some signs must be changed
U
```

```
##           [,1]          [,2]       [,3]
## [1,] 0.5773503  7.071068e-01 -0.4082483
## [2,] 0.5773503 -7.071068e-01 -0.4082483
## [3,] 0.5773503  1.776357e-15  0.8164966
```

```r
U %*% Sigma %*% t(V)
```

```
##              [,1]          [,2] [,3] [,4]
## [1,] 2.000000e+00 -1.332268e-15    1    1
## [2,] 4.440892e-16  2.000000e+00    1    1
## [3,] 1.000000e+00  1.000000e+00    1    1
```