6.7 Singular Value Decomposition

- 특이값 분해 (Singular Value Decomposition, SVD)
  - 임의의 선형변환에 해당하는 행렬 A가 주어졌을 때, SVD는 열벡터 공간의 직교하는 기저에 mapping될 수 있는 행벡터 공간의 직교하는 기저를 찾는 문제임
- Example
  - 입력 공간이 $\mathbf{R}^3$, 출력 공간은 $\mathbf{R}^2$, 기존 좌표축을 기저로 사용하는 선형변환이 행렬 $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$의 형태로 주어졌다고 가정.
  - 입력 공간의 직교하는 두 벡터 (1,0,0), (0,0,1)에 해당하는 출력 공간의 벡터는 직교하는가?
  - $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \\ \\ \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \\ \\ \end{bmatrix}$
  - "직교하는 기저" ➔ "직교하는 기저"의 장점
  - 좌표값에 일종의 eigenvalue만 곱하면 됨 ➔ 직교하지 않으니 포기?

6.7 Singular Value Decomposition

- 특이값 분해 (Singular Value Decomposition, SVD)
  - $A = U\Sigma V^T$ (여기서 U, V는 직교행렬, Σ는 대각 행렬임)
  - 위와 같은 형태를 목표로 다시 도전
  - $A^TA = V\Sigma^T U^{-1} U\Sigma V^T = V\Sigma^T\Sigma V^T = V\begin{bmatrix}\sigma_1^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r^2\end{bmatrix}V^T$
- Example
  - 입력 공간이 $\mathbf{R}^3$, 출력 공간은 $\mathbf{R}^2$,
  - $A^TA = \begin{bmatrix}1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{[illegible]}\end{bmatrix}$ ➔ 대칭행렬 우연?
  - Eigenvalue & eigenvector:$\lambda = 3, 2, 0, \begin{bmatrix}1 \\ 1 \\ 1\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}-1 \\ 1 \\ 0\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}1 \\ 1 \\ -2\end{bmatrix}$

6.7 Singular Value Decomposition

- (계속) Example $A = U\Sigma V^T$
  - $A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$
  - Eigenvalue & eigenvector: $\lambda = 3, 2, 0, \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{bmatrix}$
  - $V = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}, \Sigma^T \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & & \\ & \sigma_2^2 & \\ & & \sigma_3^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}$
  - 만약 eigenvalue가 음수이면?
  - $AV = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{3} & 0 & -2/\sqrt{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}$

6.7 Singular Value Decomposition

- (계속) Example $A = U\Sigma V^T$
  - 일반적으로 U를 모르므로 $AA^T = U\Sigma V^T V \Sigma^T U^T = U\Sigma\Sigma^T U^T$
  - $AA^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}$
  - Eigenvalue & eigenvector: $\lambda = 3, 2, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$
  - $U = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}, \Sigma\Sigma^T = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \\ & \sigma_2^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}$
  - Using $AV = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{3} & 0 & -2/\sqrt{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix}$

    $$= [\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \quad \sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \quad \cdots \quad \sigma_r \boldsymbol{u}_r] = [\boldsymbol{u}_1 \quad \boldsymbol{u}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{u}_r] \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{bmatrix}$$

  - $A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}$
  - 부호가 왜 틀린 것일까?
  - 행렬의 크기?

6.7 Singular Value Decomposition

- 특이값 분해 (Singular Value Decomposition, SVD)
  - $A = U\Sigma V^T$, 여기서 U, V는 직교행렬, Σ는 대각 행렬임
  - A는 정사각 행렬일 필요가 없음
  - A가 대칭, positive definite 행렬의 경우 $A = Q\Lambda Q^T$는 SVD의 특수한 경우임
  - A가 대칭이 아닐 경우 좀 더 일반적인 경우는 A가 n개의 다른 eigenvector를 가지는 경우 $A = S\Lambda S^{-1}$가 가능함을 배움
  - 행렬 A를 행벡터 공간내 임의의 벡터 $\boldsymbol{v}_1$를 열벡터 공간내 다른 벡터 $\boldsymbol{u}_1 = A\boldsymbol{v}_1$에 mapping하는 함수로 생각할 수 있음.
  - SVD는 열벡터 공간의 직교하는 기저에 mapping될 수 있는 행벡터 공간의 직교하는 기저를 찾는 문제임: $Av_i = \sigma_i u_i$
  - 다음을 만족하는 행벡터 공간의 직교하는 기저 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_r$를 찾아야 함
  - $A[\boldsymbol{v}_1 \quad \boldsymbol{v}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{v}_r] = [\sigma_1\boldsymbol{u}_1 \quad \sigma_2\boldsymbol{u}_2 \quad \cdots \quad \sigma_r\boldsymbol{u}_r] =$
    $$[\boldsymbol{u}_1 \quad \boldsymbol{u}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{u}_r]\begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{bmatrix}$$
  - 여기서 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \dots, \boldsymbol{u}_r$는 열벡터 공간의 직교하는 기저임

6.7 Singular Value Decomposition

- 다음을 만족하는 행벡터 공간의 직교하는 기저 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_r$를 찾아야 함
- $A[\boldsymbol{v}_1 \quad \boldsymbol{v}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{v}_r] = [\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \quad \sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \quad \cdots \quad \sigma_r \boldsymbol{u}_r] = [\boldsymbol{u}_1 \quad \boldsymbol{u}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{u}_r] \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{bmatrix}$
- 여기서 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \dots, \boldsymbol{u}_r$는 열벡터 공간의 직교하는 기저임
- 행벡터 공간의 $\mathbf{R}^n$공간의 부분 공간이지만, nullspace의 기저 $\boldsymbol{v}_{r+1}, , \dots, \boldsymbol{u}_n$ 까지 합친 경우에는 전체 $\mathbf{R}^n$공간을 span할 수 있고, 이때 해당하는 $\sigma_{r+1}, \dots, \sigma_n$은 모두 0임
- $AV = U\Sigma$ ➔ $A = U\Sigma V^T$
- ➔ $A^T A = V\Sigma U^{-1} U\Sigma V^T = V\Sigma^2 V^T = V \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r^2 \end{bmatrix} V^T$

6.7 Singular Value Decomposition

- $AV = U\Sigma$ ➔ $A = U\Sigma V^T$
- ➔ $A^T A = V\Sigma U^{-1} U\Sigma V^T = V\Sigma^2 V^T = V \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r^2 \end{bmatrix} V^T$
- 위의 행렬은 $Q\Lambda Q^T$의 형태이고, $A^T A$는 positive semidefinite 행렬이므로 대각화가 가능함. V는 $A^T A$행렬의 eigenvector이고 σ_i^2는 $A^T A$행렬의 eigenvalue임.
- U행렬 역시 유사한 방식으로 구할 수 있음.

6.7 Singular Value Decomposition

- 계산 과정에서 문제가 없기 위해서는 A^TA와 AA^T가 같은 eigenvalue를 가져야 한다. 이것은 항상 보장되는가?
- 이보다 좀 더 근본적으로 AB와 BA가 항상 같은 eigenvalue를 가짐
  - (증명) 행렬 AB가 $AB\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$를 만족하는 eigenvector $\boldsymbol{x}$와 eigenvalue λ를 가진다고 가정. 이 경우 $B\boldsymbol{x}$는 BA의 eigenvector이고 λ를 eigenvalue 가진다. Why?
  - $BA(B\boldsymbol{x}) = B(AB)\boldsymbol{x} = B(\lambda\boldsymbol{x}) = \lambda(B\boldsymbol{x})$
- 따라서 A^TA와 AA^T는 항상 같은 eigenvalue를 가져야한다.

6.7 Singular Value Decomposition

- Example
  - $A = \begin{bmatrix} 4 & 4 \\ -3 & 3 \end{bmatrix}$

6.7 Singular Value Decomposition

- SVD의 완전히 다른 관점
  - 여러 개의 rank 1인 행렬들의 합으로 분해하는 과정
  - $A\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_r\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 & \cdots & \boldsymbol{u}_r\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r\end{bmatrix}$
  - $A = \begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 & \cdots & \boldsymbol{u}_r\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^T \\ \boldsymbol{v}_2^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_r^T\end{bmatrix}$
  - $= \sigma_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^T + \sigma_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^T + \cdots + \sigma_r\boldsymbol{u}_r\boldsymbol{v}_r^T$
  - 행렬 $\sigma_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^T$의 rank는?