Spectral Decomposition

수업 목표

이번 수업의 핵심:

- 대칭 행렬의 Eigendecomposition
- Spectral decomposition의 특성
- Positive definite와 Positive semi-definite의 정의와 성질

핵심 개념

- Spectral decomposition
- Positive definite, Positive semi-definite

대칭 행렬의 Diagonalization

- 일반적인 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$는 n개의 선형 독립 Eigenvector를 가지면 대각화가 가능

$S^{\top} = S$인 대칭 행렬 (Symmetric) $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$의 경우에는…

- S는 항상 대각화가 가능
  - 중복을 포함하여 S는 n개의 실수 Eigenvalue를 가짐

- S는 Orthogonal하게 대각화가 가능
  - Eigenvector가 선형 독립일 뿐만이 아니라 서로 서로 직교함
  - Eigenvector를 적절히 Scale하여 Orthogonal matrix 형태로 만들 수 있음

$$S = UDU^{-1} = UDU^{\top}$$

증명: https://home.cs.colorado.edu/~alko5368/lecturesCSCI2820/mathbook.pdf의 Chapter 7.1을 참조

Spectral Decomposition

- 대칭 행렬의 Eigendecomposition을 Spectral decomposition이라 부름

$$
\begin{aligned}
S = UDU^{-1} = UDU^\top &= [\mathbf{u}_1 \quad \mathbf{u}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{u}_n] \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^\top \\ \mathbf{u}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n^\top \end{bmatrix} \\
&= [\lambda_1\mathbf{u}_1 \quad \lambda_2\mathbf{u}_2 \quad \cdots \quad \lambda_n\mathbf{u}_n] \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^\top \\ \mathbf{u}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n^\top \end{bmatrix} \\
&= \lambda_1\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1^\top + \lambda_2\mathbf{u}_2\mathbf{u}_2^\top + \cdots + \lambda_n\mathbf{u}_n\mathbf{u}_n^\top
\end{aligned}
$$

- 각 항 $\lambda_i\mathbf{u}_i\mathbf{u}_i^\top$는 $\mathbf{u}_i$ 위로 투영시키는 Scaled projection matrix로 볼 수 있음
  - Projection matrix onto $\mathbf{u}_i$: $\frac{\mathbf{u}_i\mathbf{u}_i^\top}{\mathbf{u}_i^T\mathbf{u}_i} = \mathbf{u}_i\mathbf{u}_i^\top$
  - 즉, Orthonormal basis vector를 column vector로 가지는 U를 기준으로, 각 차원을 λ_i만큼 크기를 조절하는 것

Positive Definite Matrices

Positive definite matrix

- $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$는 영행렬이 아닌 모든 $\mathbf{x}$에서 $\mathbf{x}^\top A\mathbf{x} > 0$이면 Positive definite

Positive semi-definite matrix

- $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$는 영행렬이 아닌 모든 $\mathbf{x}$에서 $\mathbf{x}^\top A\mathbf{x} \geq 0$이면 Positive semi-definite

Theorem:

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$가 Positive definite $\Leftrightarrow$ A의 모든 Eigenvalue가 양수

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$가 Positive semi-definite $\Leftrightarrow$ A의 모든 Eigenvalue가 음수가 아님

증명: https://home.cs.colorado.edu/~alko5368/lecturesCSCI2820/mathbook.pdf의 Chapter 7.2을 참조

Symmetric Positive Definite Matrices

- $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$가 대칭이고 Positive definite이면,
  Spectral decomposition의 Eigenvalue가 모두 양수

$$S = UDU^\top = [\mathbf{u}_1 \quad \mathbf{u}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{u}_n] \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^\top \\ \mathbf{u}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n^\top \end{bmatrix}$$

$$= \lambda_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1^\top + \lambda_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2^\top + \cdots + \lambda_n \mathbf{u}_n \mathbf{u}_n^\top \text{ where } \lambda_j > 0, \forall j = 1, \cdots, n$$

- 해당 특징은 이후 Singular Value Decomposition에서 유용하게 사용

요약

- 대칭 행렬에 대한 Eigendecomposition의 성질
- Projection matrix로서의 Spectral decomposition의 의미
- Positive definite 및 Positive semi-definite와 Eigenvalue 간의 관계

$$S = UDU^{-1} = UDU^{\top} = [\mathbf{u}_1 \quad \mathbf{u}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{u}_n] \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1^{\top} \\ \mathbf{u}_2^{\top} \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n^{\top} \end{bmatrix}$$

$$= \lambda_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1^{\top} + \lambda_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2^{\top} + \cdots + \lambda_n \mathbf{u}_n \mathbf{u}_n^{\top}$$