Singular Value Decomposition

수업 목표

이번 수업의 핵심:

- Singular value decomposition의 정의와 그 성질
- Singular value decomposition의 계산 방법
- Singular value decomposition을 활용한 Low-rank approximation

핵심 개념

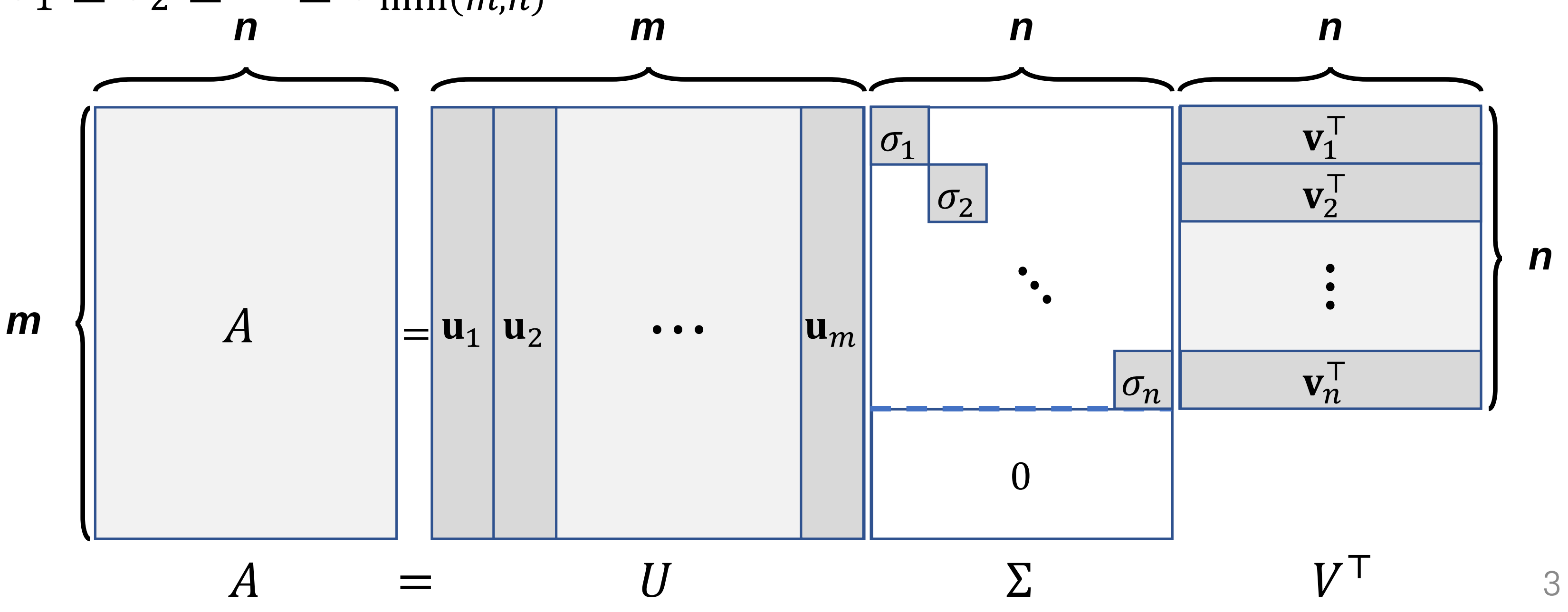
- Singular value decomposition
- Low-rank approximation

Singular Value Decomposition (SVD, 특이값 분해)

직사각행렬 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$의 Singular value decomposition:

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

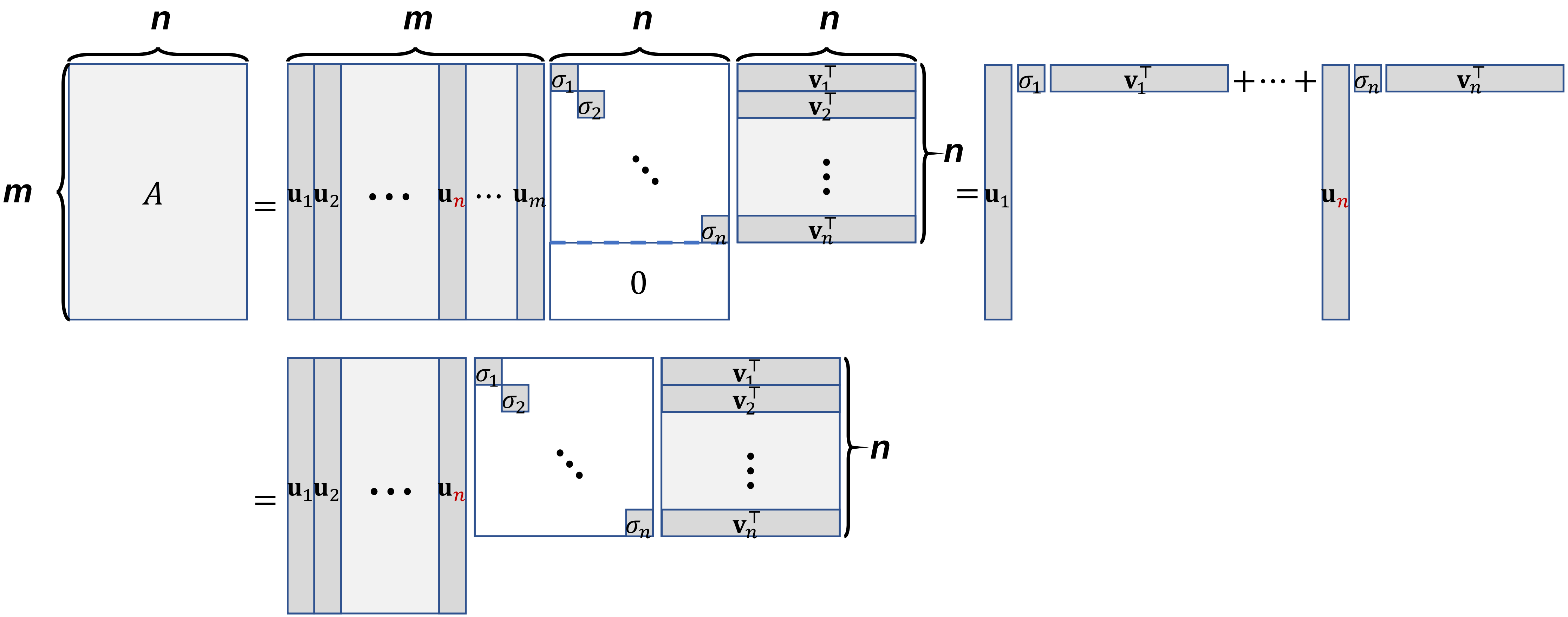
- $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$: Orthonormal한 열을 가지는 행렬
  - 각각 A의 $\mathrm{Col}\ A$와 $\mathrm{Row}\ A$ 의 Orthonormal basis
- $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$: 대각 원소들만 nonzero 값을 가지며, 내림차순으로 정렬된 행렬
  - i.e., $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_{\min(m,n)}$



Reduced Form of SVD

- A의 SVD는 $\mathbf{u}_i$와 $\mathbf{v}_i$ Outer product의 합으로 볼 수 있음

$$A = U\Sigma V^\top = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top, \qquad \text{where } \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n$$



SVD의 또다른 관점

A의 $\mathrm{Col}\ A$와 $\mathrm{Row}\ A$의 Orthonormal Basis $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\}$, $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\}$는 Gram-Schmidt orthogonalization 를 통해 쉽게 찾을 수 있음

← 그러나, 이 경우 Orthonormal basis는 유일하지 않고, $\mathbf{u}_i$와 $\mathbf{v}_i$ 간의 어떤 연관관계가 존재하지 않음

반면, SVD에서는 다음 관계를 만족하는 $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\}$, $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\}$를 Joint하게 찾아야 함:

$$A\mathbf{v}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i, \qquad \forall\, i = 1, \dots, n$$

SVD의 또다른 관점

$A = U\Sigma V^\top$에서 다음과 같이 가정:

$$U = [\mathbf{u}_1 \quad \mathbf{u}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{u}_n] \in \mathbb{R}^{m\times n}, V = [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{v}_n] \in \mathbb{R}^{n\times n}, \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

- $AV = A[\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{v}_n] = [A\mathbf{v}_1 \quad A\mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad A\mathbf{v}_n]$
- $U\Sigma = [\mathbf{u}_1 \quad \mathbf{u}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{u}_n] \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_n \end{bmatrix} = [\sigma_1\mathbf{u}_1 \quad \sigma_2\mathbf{u}_2 \quad \cdots \quad \sigma_n\mathbf{u}_n]$
- $AV = U\Sigma \Leftrightarrow [A\mathbf{v}_1 \quad A\mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad A\mathbf{v}_n] = [\sigma_1\mathbf{u}_1 \quad \sigma_2\mathbf{u}_2 \quad \cdots \quad \sigma_n\mathbf{u}_n]$
- $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$가 Orthonormal한 열을 가지기 때문에 $V^{-1} = V^\top$

따라서 $AV = U\Sigma \Leftrightarrow A = U\Sigma V^\top$

SVD 계산하기

- 주어진 행렬 A에 대해 먼저 $AA^\top$와 $A^\top A$를 계산

$$AA^\top = U\Sigma V^\top V\Sigma^\top U^\top = U\Sigma\Sigma^\top U^\top = U\Sigma^2 U^\top$$

$$A^\top A = V\Sigma^\top U^\top U\Sigma V^\top = V\Sigma^\top\Sigma V^\top = V\Sigma^2 V^\top$$

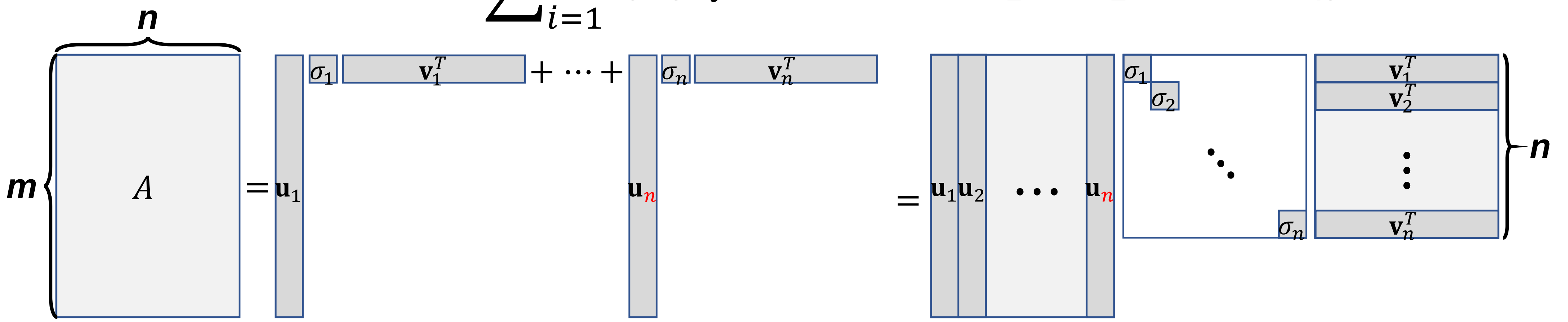
- 이 때, $AA^\top$와 $A^\top A$는 Symmetric positive semi-definite
  - $(AA^T)^T = AA^T,\ (A^TA)^T = A^TA$
  - $\mathbf{x}^T AA^T\mathbf{x} = (A^T\mathbf{x})^T(A^T\mathbf{x}) = \|A^T\mathbf{x}\|^2 \geq 0,\ \mathbf{x}^T A^T A\mathbf{x} = (A\mathbf{x})^T(A\mathbf{x}) = \|A\mathbf{x}\|^2 \geq 0$

- 따라서 $AA^\top$와 $A^\top A$는 항상 orthogonally diagonalizable 하기 때문에, Spectral decomposition이 가능
  - Symmetric → Eigenvector U와 V가 Orthogonal: $U^{-1} = U^\top, V^{-1} = V^\top$
  - Positive semi-definite → Σ^2가 음수가 아님, 즉 항상 실수 Σ를 구할 수 있음

SVD 활용: Low-Rank Approximation

- 직사각행렬 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$의 SVD는 Outer product의 합으로 표현될 수 있음

$$A = U\Sigma V^T = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T , \qquad \text{where } \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n$$



- A를 근사하는 최적의 Low-rank 행렬을 찾는 문제

$$\hat{A}_r = \arg\min_{A_r} \|A - A_r\|_F \ \text{ subject to } \operatorname{rank}(A_r) \leq r$$

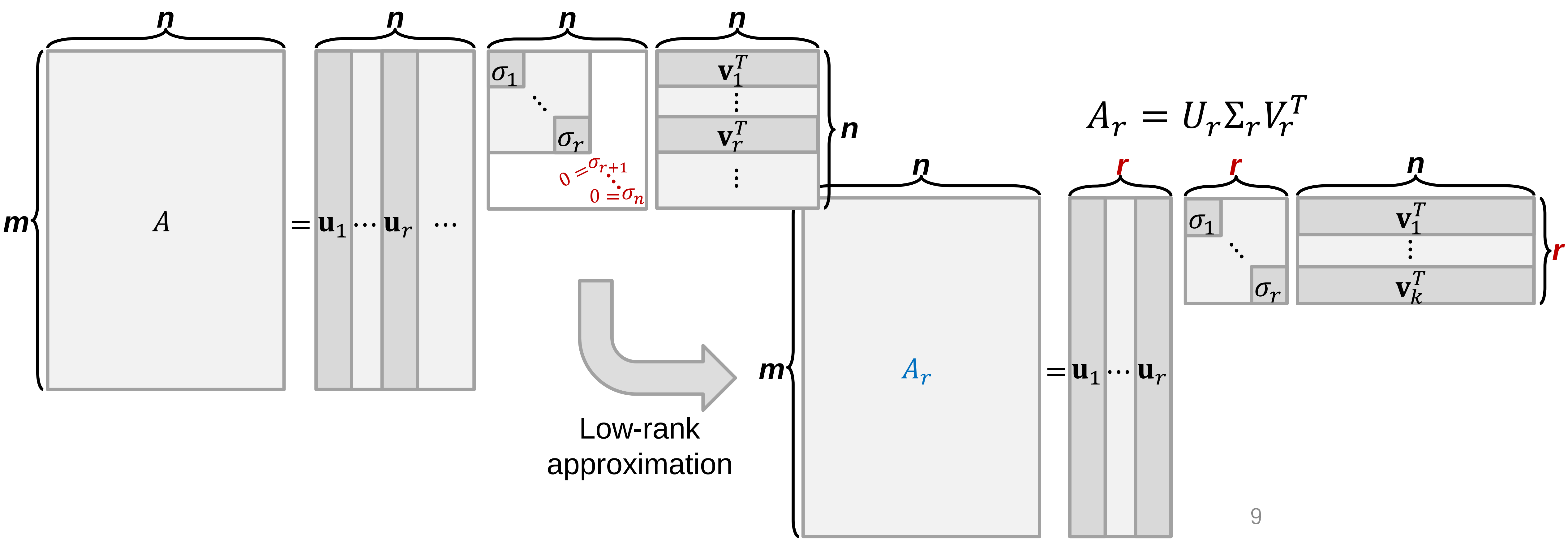
- 위 문제, Low-rank approximation의 최적해:

$$\hat{A}_r = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T , \qquad \text{where } \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r$$

SVD 활용: Low-Rank Approximation

- $\forall i \geq (r+1)$에 대해서 $\sigma_i = 0$로 설정한 A_r로 A를 근사

$$A = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T \simeq A_r = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T = U_r \Sigma_r V_r^T$$



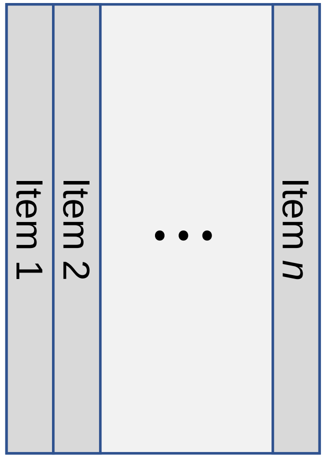
SVD와 Eigendecomposition 관계 및 활용

- 직사각행렬 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$는 SVD가 항상 가능
- 정사각행렬 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$가 Eigendecomposition이 안 되도 SVD는 항상 가능
- Positive positive (semi-)definite한 대칭 행렬 $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$의 Eigendecomposition과 SVD는 사실상 동일

기계학습에선 Symmetric positive (semi-)definite matrix를 자주 다룸

- Item별 Feature를 나타내는 행렬 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$를 가정
- $A^T A$는 Data item간의 유사도 행렬을 나타냄
  - Data item 간의 내적을 일종의 유사도로 사용
- AA^T는 Feature간의 유사도를 나타냄
  - Feature간의 일종의 Correlation을 측정

$A =$



요약

- Singular value decomposition (SVD)의 정의
- Outer product들의 합으로 표현한 SVD의 표현
- Symmetric positive semi-definite 특성을 활용한 SVD 계산
- SVD를 활용한 행렬의 Low-rank approximation