Seoul National University
Ocean Engineering Laboratory

Gyungnam Jo

SVD: Singular Value Decomposition

모든 $m \times n$ 행렬 A 는 아래와 같이 분해된다.

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

U 는 $m \times m$ 정규 직교 행렬(orthonormal matrix)이고 V 는 $n \times n$ 정규 직교 행렬이다. $m \times n$ 행렬인 Σ 는 대각선에만 그 값이 있는데 음이 아닌 실수이다 (즉, 0 또는 양수 nonnegative). 그리고 이 값을 특이값(singular value)이라고 한다. 고유값-고유벡터 분해(eigenvalue-eigenvector decomposition)

$$A = Q\Lambda Q^*$$

는 대칭 행렬(symmetric matrix)에 대해서 사용할 수 있는 반면에(사실은 충분 조건이다.) SVD 는 정방 행렬이 아닌 행렬에도 사용이 가능하다. 위의 두 식을 비교해보자.

행렬 A 는 벡터 공간(vector space)간 선형 사상(linear mapping)으로 볼 수 있다. 여기서 s=min(m, n)이라 하면

$$Y = Ax = U\Sigma V^* x = (v_i^* x)\sigma_i u_i$$

이라 할 수 있다.

위 식에서 $\{v_i\}$ 를 입력 공간의 직교 기저(orthogonal basis)로 보고 $\{u_i\}$ 를 출력 공간의 직교 기저로 볼 수 있다. 그렇다면 $v_i^* x$ 는 입력 벡터 x 를 기저 $\{v_i\}$ 에 대하여 표현(representation)할 때의 좌표가 된다. 그리고 출력 벡터 Y 는 기저 $\{u_i\}$ 의 선형 조합(linear combination)으로 표현되는데 각 계수는 대응하는 입력 좌표와 특이값의 곱이 된다. (넓은 의미로 decouple되었다고 볼 수 있다.) 특이값과 고유값의 정의를 다시 살펴보자. 선형 사상의 관점에서 고유값의 고유 벡터는 특이값 분해의 입출력 벡터가 동일한 경우를 나타내는 것으로 생각할 수 있다. 이 때 고유값의 부호는 입출력 벡터의 방향성을 나타내는 것이므로 특이값과 비교할 때 논외로 하자 (특이값은 음이 아닌 실수이다).

행렬의 크기를 나타내는 값으로 고유값보다 특이값을 사용하는 경우가 더 많다. 간단한 예를 하나 들어 보자.

Gyungnam Jo

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 100 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

이 행렬은 두 개의 0을 고유값으로 갖는다. 하지만 입력으로

$$d = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix}^T$$

을 넣어주면 출력으로

$$y = \begin{bmatrix} 100 & 0 \end{bmatrix}^T$$

을 돌려준다.

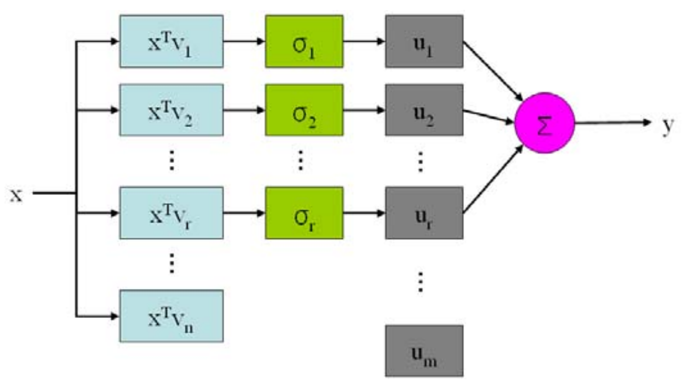
반면 A를 특이값 분해하면 100과 0을 얻는다. 이런 점에서 특이값을 행렬의 크기를 나타내는 값으로 사용하는 것이 보다 좋은 방법이 될 것이다 (행렬의 크기를 나타내는 induced norm 중에서 2-norm의 경우 특이값의 최대값으로 norm을 정의한다).

특이값의 정의에서 식을 아래와 같이 변형하자.

$$\begin{aligned} & AV = U\Sigma \\ & \Rightarrow Av_i = \sigma_i u_i \end{aligned}$$

위 식은 v_i 방향의 입력에 대하여 A에 의한 u_i 방향의 출력을 의미한다.

이런 점에서 특이값은 고유값에 비해 사상의 증폭 크기에 관한 보다 많은 정보를 제공하며 특이값 분해에 의하여 얻어진 사상의 방향은 직교성을 지니고 정방 행렬이 아닌 경우에도 적용할 수 있다는 장점을 갖는다. 이를 그림을 이용하여 설명하면 다음과 같다.



Gyungnam Jo

0이 아닌 특이값이 r 개라 하고 그것을 내림차순으로 정렬하자. 즉,

$$\sigma_1 > \sigma_2 > \cdots > \sigma_r$$

이 된다.

그러면 $\{u_1, u_2, \cdots, u_r\}$ 이 열공간(column space)의 기저가 되고 $\{v_{r+1}, u_{r+2}, \cdots, u_n\}$ 은 영공간(null space)의 기저가 된다. (위 식과 그림을 살펴보라.)

특이값과 입출력 벡터의 관계를 자동차를 이용하여 생각하여 보자. 자동차의 입력에서 전진 방향으로의 이동은 쉽고 측방향으로의 어렵다는 것을 쉽게 상상할 수 있을 것이다. 이를 표현하는 선형 사상을 행렬 A 라하고 위의 설명을 통하여 이해할 수 있다. 즉, 이 사상에 대한 전진 방향으로의 특이값이 측방향으로의 특이값보다 큰 경우라고 생각하면 쉽게 이해가 될 것이다.

이를 선형 방정식의 풀이에 적용하여 의미를 살펴보자.

$$\begin{aligned} &Ax = U\Sigma V^* x = b \\ &\Rightarrow x = A^{-1}b = V\Sigma^+ U^* b \end{aligned}$$

앞에서는 x 가 주어지고 y 를 구하는 경우를 살펴보았지만 이번에는 주어진 y 를 만족하는 x 를 구하는 경우가 된다. 위 식에서 Σ^+ 는 $\{1/\sigma_i\}$ 가 대각선에 있는 $n \times m$ 행렬이다. (역행렬은 정방 행렬에서만 정의되므로 일반적으로 Σ^{-1} 을 사용하지 않고 Σ^+ 라는 표기법을 사용한다.) 위 식에서 $U^* b$ 는 b 를 열공간 $\{u_1, u_2, \cdots, u_r\}$ 에 투영(projection)하는 것을 의미한다. r 보다 큰 열공간은 Σ^+ 에 의하여 제거되므로 걱정할 필요가 없다. 그리고 $V\Sigma^+$ 는 x 중 영공간에 있는 벡터 성분을 0으로 바꿔준다. 따라서 위 결과는 입력 공간과 출력 공간 모두에 대하여 최소 제곱해(least-square solution)을 제공하는 것으로 볼 수 있다. 즉,

$$x = V\Sigma^+ U^* b = A^+ b$$

이 된다. 여기서 $A^+ = V\Sigma^+ U^T$ 이며 A 의 pseudo-inverse 라고 한다.

Gyungnam Jo

SVD를 이용한 영공간 구성의 예

다음의 예를 생각하여 보자.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}$$

행렬 A 의 rank는 2가 된다. 따라서 A 는 1차원의 영공간을 갖는다.

영공간을 구하면 $null(A) = \begin{bmatrix} -0.4082 & 0.8165 & -0.4082 \end{bmatrix}^T$ 가 된다.

이번에는 svd를 이용하여 구해보자.

$$U = \begin{bmatrix} -0.2148 & 0.8872 & 0.4082 \\ -0.5206 & 0.2496 & -0.8165 \\ -0.8263 & -0.3879 & 0.4082 \end{bmatrix}$$

$$S = \begin{bmatrix} 16.8481 & 0 & 0 \\ 0 & 1.0684 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0000 \end{bmatrix}$$

$$V = \begin{bmatrix} -0.4797 & -0.7767 & -0.4082 \\ -0.5724 & -0.7569 & 0.8165 \\ -0.6651 & 0.6253 & -0.4082 \end{bmatrix}$$

결과에서 0이 아닌 특이값의 개수는 rank와 동일한 2개이다(>>[U,S,V]=svd(A)). 그리고 V 의 셋째 열(column)이 영공간과 같다. V 의 첫째 열과 둘째 열은 A 의 행공간(row space)가 된다 (>>orth(A')). 또한 U 의 첫째 열과 둘째 열은 A 의 열공간이다(>>orth(A)). 그리고 U 의 셋째 열은 U 의 왼쪽 영공간(left null space)가 된다 (>>null(A')).

A 의 (3, 3)요소에 잡음으로 0.001을 더해보자.

$$AN = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9.001 \end{bmatrix}$$

matlab™의 null 함수를 이용해서는 구할 수 없다. (이 경우 0에 가까운 고유치가 하나

Gyungnam Jo

생기면서 rank가 3이 되기 때문에 엄밀한 의미에서 영공간은 존재하지 않는다.) 여기서는 (3, 3)요소의 잡음은 round-off 오차에 의해 발생한 것으로 상정하고 svd를 이용하여 본래 A 의 영공간을 예측하여 보자.

$$U = \begin{bmatrix} -0.2148 & 0.8873 & 0.4080 \\ -0.5206 & 0.2495 & -0.8166 \\ -0.8263 & -0.3878 & 0.4083 \end{bmatrix}$$

$$S = \begin{bmatrix} 16.8487 & 0 & 0 \\ 0 & 1.0681 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0002 \end{bmatrix}$$

$$V = \begin{bmatrix} -0.4797 & -0.7767 & 0.4081 \\ -0.5724 & -0.7558 & -0.8165 \\ -0.6651 & 0.6252 & 0.4083 \end{bmatrix}$$

S 의 마지막 특이값은 0에 가까운 값을 갖는다. V 의 셋째 열을 영공간으로 볼 수 있다. 이 결과는 (3, 3) 요소에 잡음이 섞인 영향으로 볼 수 있다. 이 경우 엄밀한 의미에서 $Ax = b$ 의 해는 존재하지만 조건 계수(condition number)가 크게 정의된다. 이러한 문제를 불량한 상태의 문제(ill-posed problem)라 한다. 사실 영공간에 근접한 V 의 셋째 열 방향으로의 입력은 출력에 거의 영향을 주지 못한다.