연세대학교 통계 데이터 사이언스 학회 ESC 23-2 SUMMER WEEK2

Singular Value Decomposition and Its Application

[ESC 방학세션 2조] 임승현 장덕재 정석훈 김근영

1. Introduction

Introduction

Why SVD?

· 대용량 디지털 자료를 압축하여 효과적으로 정보를 저장 및 전송을 가능하게 해준다.

· 선형계의 문제를 풀기 위해 사용할 수 있는 계산 알고리즘의 기초가 된다.

Ex) ill – conditioned 혹은 nearly rank-deficient로 인해 unstable한 solution

→ SVD를 통해 stable(혹은 less sensitive)한 solution으로 만들어준다.

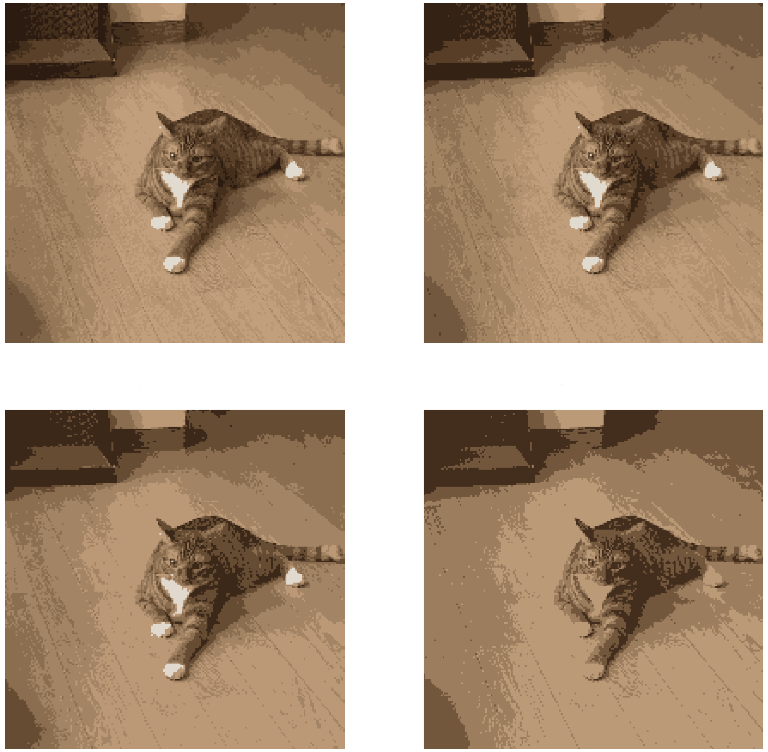


Figure 1

2.Singular Value Decomposition

Singular Value Decomposition

Full SVD

Rank가 k인 $m \times n$ 행렬 A에 대해

$$A = U\Sigma V^T = [\mathbf{u}_1\ \ \mathbf{u}_2\ \ \cdots\ \ \mathbf{u}_k \mid \mathbf{u}_{k+1}\ \ \cdots\ \ \mathbf{u}_m] \left[\begin{array}{cccc|c} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 & \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 & O_{k\times(n-k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_k & \\ \hline \multicolumn{4}{c|}{O_{(m-k)\times k}} & O_{(m-k)\times(n-k)} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \mathbf{v}_1^T \\ \mathbf{v}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_k^T \\ \hline \mathbf{v}_{k+1}^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^T \end{array}\right]$$

Figure 2

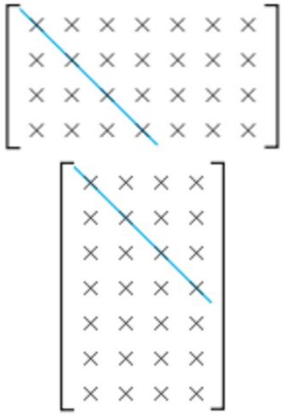


Figure 3

주대각성분 (Main diagonal)

- $U \in \mathbb{C}^{m\times m}$, $V^T \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 이고 각각은 unitary matrices
- $\Sigma \in \mathbb{C}^{m\times n}$ 는 singular values들을 주대각성분으로 가지고 나머지 원소는 0
- $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_k \geq 0$
- $\{\boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_k\}$: left singular vectors
- $\{\boldsymbol{v}_1, \cdots, \boldsymbol{v}_k\}$: right singular vectors
- $A\boldsymbol{v}_j = \sigma_j \boldsymbol{u}_j$ 가 성립

Singular Value Decomposition

Example

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

i) $A^T A$의 eigenvalue, eigenvector 구하기

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\lambda^2 - 4\lambda + 3 = (\lambda - 3)(\lambda - 1)$$

$$\sigma_1 = \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{3}, \quad \sigma_2 = \sqrt{\lambda_2} = 1$$

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \text{ and } \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

내림차 순으로 eigen value를 정렬하고 대응되는 eigen vector을 normalizing!

ii) $\sigma, \boldsymbol{v}$를 통해 $\boldsymbol{u}$ 구하기

$A\boldsymbol{v}_j = \sigma_j \boldsymbol{u}_j$ 관계로 인해

$$\mathbf{u}_1 = \frac{1}{\sigma_1} A\mathbf{v}_1 = \frac{\sqrt{3}}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{6}}{3} \\ \frac{\sqrt{6}}{6} \\ \frac{\sqrt{6}}{6} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{u}_2 = \frac{1}{\sigma_2} A\mathbf{v}_2 = (1) \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

Singular Value Decomposition

Example

iii) $\boldsymbol{u_3}$확장하기

U는 $\mathbb{C}^{3\times3}$인 unitary 행렬인데 1개의 basis 부족! -> $\boldsymbol{u}_1$, $\boldsymbol{u}_2$ 에 대해 orthonormal 한 vector 추가해주기

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{u}_3 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix}$$

최종적으로, $\mathrm{A} = U\Sigma V^T$ 는 아래의 형태이다. 여기서, $U \in \mathbb{C}^{3\times3}$ $\Sigma \in \mathbb{C}^{3\times2}$ $V^T \in \mathbb{C}^{2\times2}$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{6}}{3} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{\sqrt{6}}{6} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{\sqrt{6}}{6} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

Singular Value Decomposition

Full SVD

$$A = U\Sigma V^T = [\mathbf{u}_1 \quad \mathbf{u}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{u}_k \mid \mathbf{u}_{k+1} \quad \cdots \quad \mathbf{u}_m] \left[\begin{array}{cccc|c} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 & \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 & O_{k\times(n-k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_k & \\ \hline & O_{(m-k)\times k} & & & O_{(m-k)\times(n-k)} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \mathbf{v}_1^T \\ \mathbf{v}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_k^T \\ \hline \mathbf{v}_{k+1}^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^T \end{array}\right]$$

Figure 2

1. 행렬 A는 k개의 singular value를 가짐 (rank가 k 이므로)
2. 이를 통해 $\{\boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_k\}$, $\{\boldsymbol{v}_1, \cdots, \boldsymbol{v}_k\}$를 얻을 수 있음.
3. 하지만 $U \in \mathbb{C}^{m\times m}$, $V^T \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 인 unitary matrix로 확장해야 함.

   → 따라서 U 에는 $(m-k)$개, V에는 $(n-k)$개만큼의

   arbitrary orthonormal columns를 추가해야 함.

5. Σ는 주 대각성분 외에 0으로 채워 넣기

따라서

· $\{\boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k+1}}, \cdots, \boldsymbol{u}_m\}$은 $\{\boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_k\}$로부터 R^m의 정규직교기저로 확장한 것이다.

· $\{\boldsymbol{v}_1, \cdots, \boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k+1}}, \cdots, \boldsymbol{v}_n\}$은 $\{\boldsymbol{v}_1, \cdots, \boldsymbol{v}_k\}$로부터 R^n의 정규직교기저로 확장한 것이다.

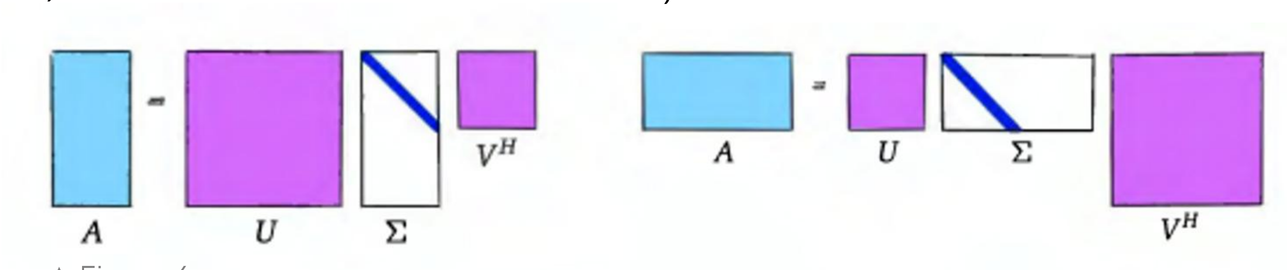
Singular Value Decomposition

Full SVD and Reduced SVD

·Full SVD의 형태

i) n<m

ii) m<n



▲ Figure 4

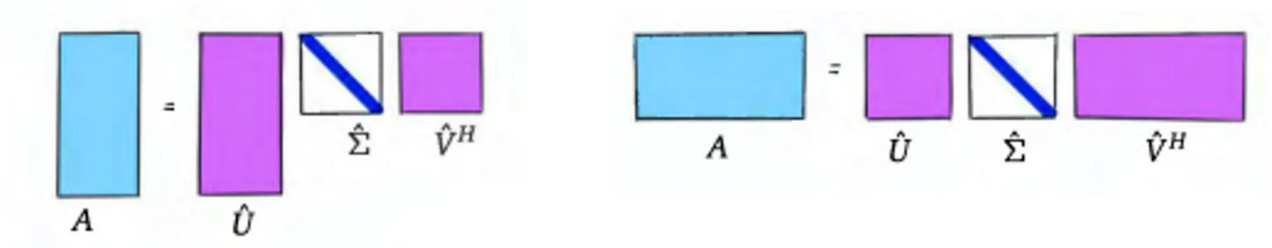
Σ의 zero rows 또는 zero columns인 부분들은 생략해서 쓸 수 있다!

→ 사라지는 벡터들을 생략해 작성하자 → Reduced SVD

·Reduced SVD의 형태

i) n<m

ii) m<n



▲ Figure 5

이때, $U \in \mathbb{C}^{m \times k}$, $V^T \in \mathbb{C}^{k \times n}$로 축소

Singular Value Decomposition

SVD의 차원축소 과정

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -2 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad A = U\Sigma V^T$$

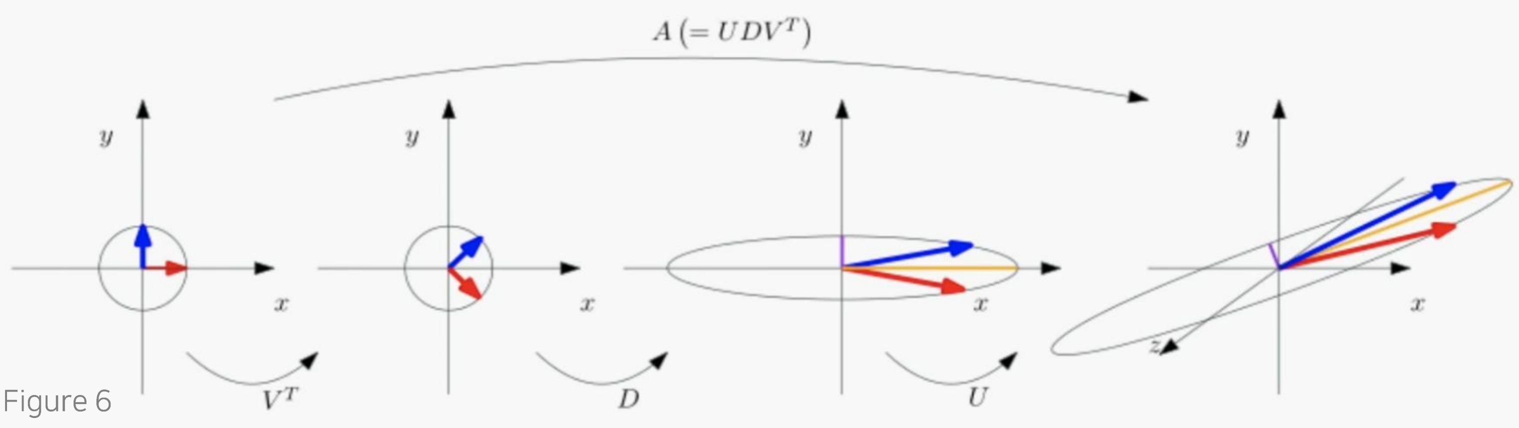


Figure 6

그림에서 주목해야 할 점은, SVD가 행렬이 벡터에 대해 선형변환을 하는 과정을 설명해준다는 것!

- 이 단위 원 위의 벡터들은 V^T, Σ, U에 의해 rotation – extension – rotation 과정을 거쳐 hyperellipse로 mapping 된다.
- 양변에 2 x 2 identity matrix를 곱하는 상황을 생각 → 그림의 빨강, 파랑벡터는 각각 $(1,0)'$, $(0,1)'$를 의미한다.
- 즉, A로 인해 $(1,0)', (0,1)'$가 $\left(2,\ -\frac{1}{2},\ -2\right)'$, $\left(2,\ \frac{1}{2},\ -2\right)'$로 mapping 되는 과정을 알 수 있다!

Singular Value Decomposition

SVD의 차원축소 과정

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -2 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

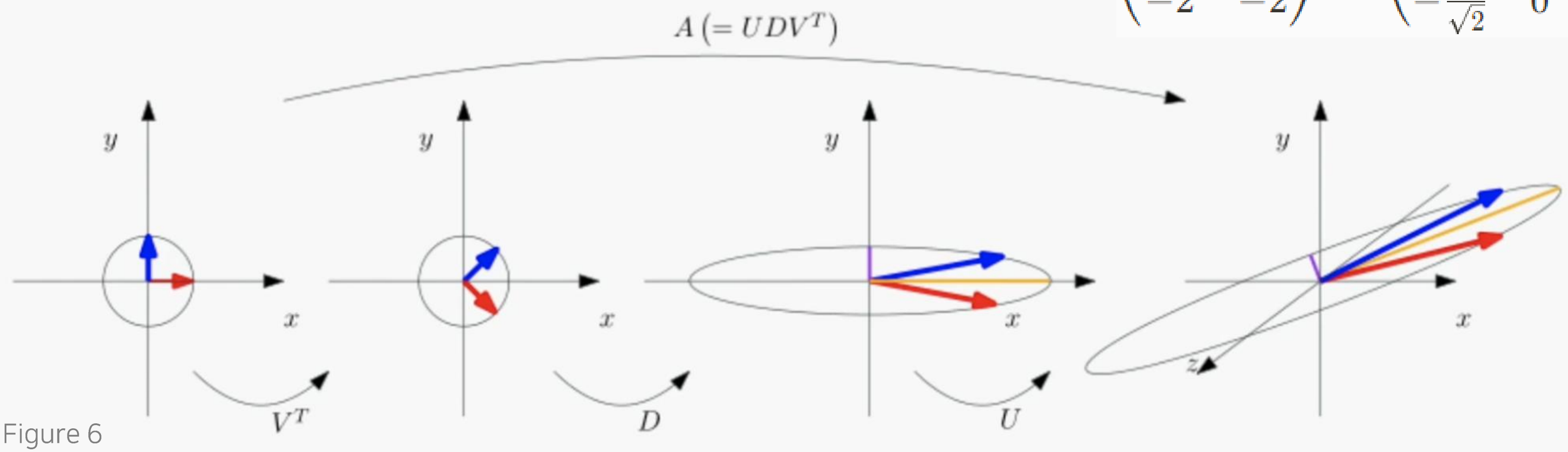


Figure 6

- 직관적으로 mapping된 빨강, 파랑 벡터의 정보 손실을 최소화하면서 잘 요약해주는 벡터 방향은 두 벡터의 평균치임.
- 이 평균치는 $(2,\ 0,\ -2)'$이며 이를 정규화 한 것은 $\boldsymbol{u}_1$과 일치한다!
- 따라서 데이터의 feature 수를 줄이고 싶다면, singular value가 가장 큰 4에 대응하는 left singular vector인 $\boldsymbol{u}_1$으로 projection해야 정보손실을 최소화 할 수 있다.

Singular Value Decomposition

SVD의 차원축소 과정

$\boldsymbol{u}_1$을 이용해, 즉 1개의 singular value를 이용해 A를 압축한 결과는 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} (4) \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 0 & 0 \\ -2 & -2 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad U'_{3\times1}\,\Sigma'_{1\times1}\,V'^{T}_{1\times2} = A'_{3\times2}$$

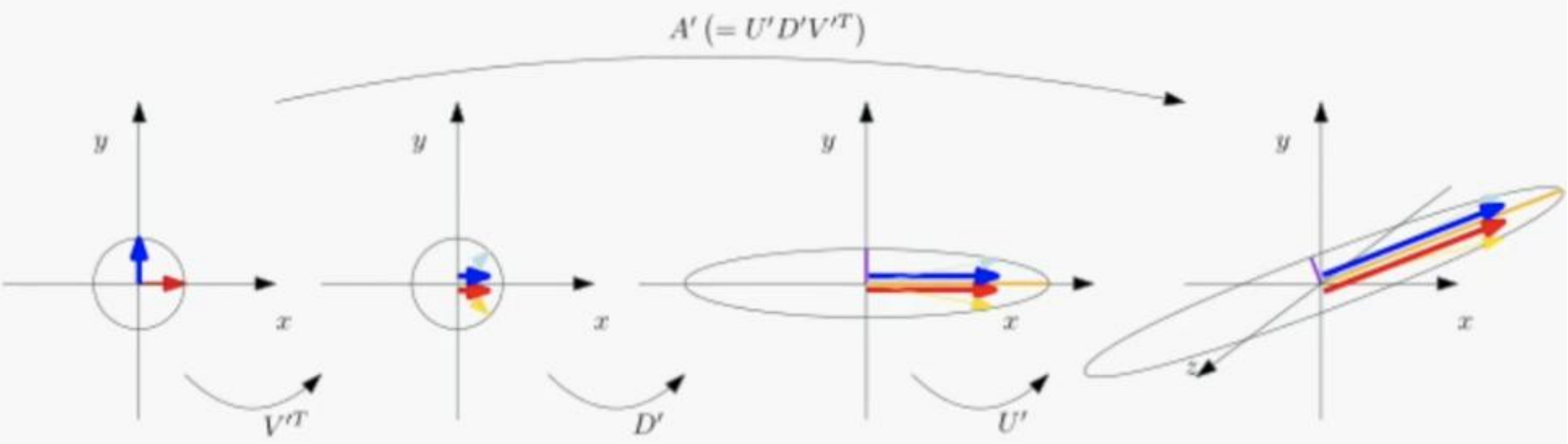


Figure 7

· 따라서 가장 큰 singular value 한 개를 통해 A'을 만들 수 있으며, 빨강, 파랑 벡터들이 해당 방향으로 동일하게 mapping 되는 것 확인할 수 있다.

· 단위 원 안의 어느 벡터를 행렬 A를 통해 mapping한 결과는 $\boldsymbol{u}_1$ 방향으로 정보가 압축된다.

Singular Value Decomposition

Low Rank Approximation

이 개념을 확장한 것이 바로 low rank approximation, 이는 rank k인 A의 Reduced SVD를 풀어서 작성한 것이다.

$$A = [\mathbf{u}_1 \quad \mathbf{u}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{u}_k] \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \\ \mathbf{v}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_k^T \end{bmatrix}$$

Figure 8

$$\rightarrow \quad A = \sigma_1 \mathbf{u_1} \mathbf{v_1}' + \sigma_2 \mathbf{u_2} \mathbf{v_2}' + \ldots + \sigma_k \mathbf{u_k} \mathbf{v_k}'$$

- Thm1. 어떤 $0 \le v \le k$인 v에 대해, $A_v = \sum_{j=1}^{v} a_j u_j v_j^T$ 라고 정의하자.
  그러면, $\|A - A_v\|_2 = inf\|A - B\|_2 = \sigma_{v+1}$ 이다. (이때, $B \in \mathbb{C}^{m \times n}, rank(B) \le v$)
  이 때 $v = p = \min\{m, n\}$이면, $\sigma_{v+1} = 0$
- Thm2. 어떤 $0 \le v \le k$인 v에 대해, 위에서 정의한 A_v는
  $\|A - A_v\|_F = inf\|A - B\|_F = \sqrt{\sigma_{v+1}^2 + \cdots + \sigma_k^2}$ 을 만족한다. (이 때 $B \in \mathbb{C}^{m \times n}, rank(B) \le v$)

Singular Value Decomposition

Low Rank Approximation

▶ Thm1. 어떤 $0 \le v \le k$인 v에 대해, $A_v = \sum_{j=1}^{v} a_j u_j v_j^T$ 라고 정의하자.

그러면, $\|A - A_v\|_2 = inf\|A - B\|_2 = \sigma_{v+1}$ 이다. (이때, $B \in \mathbb{C}^{m \times n}, rank(B) \le v$)

이 때 $v = p = \min\{m, n\}$ 이면, $\sigma_{v+1} = 0$

▶ Thm2. 어떤 $0 \le v \le k$인 v에 대해, 위에서 정의한 A_v는

$\|A - A_v\|_F = inf\|A - B\|_F = \sqrt{\sigma_{v+1}^2 + \cdots + \sigma_k^2}$ 을 만족한다. (이 때 $B \in \mathbb{C}^{m \times n}, rank(B) \le v$)

· 이때, singular value는 내림차순으로 정렬되므로 σ_{v+1}를 상당히 작게 할 수 있다.

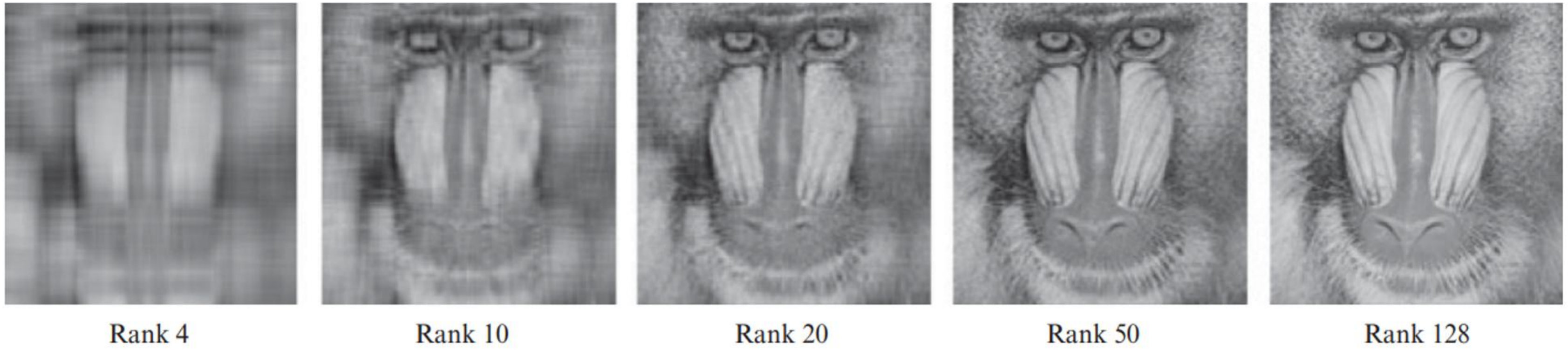
· 이는 A'과 A의 norm 차이가 상당히 작을 수 있다는 것을 암시한다.

· 따라서, 우리는 모든 singular value 를 쓰지 않아도 low rank approximation을 통해 A를 A'으로 충분히 근사 가능하다!

Singular Value Decomposition

Low Rank Approximation

Ex) 1000 x 1000이고 rank가 200인 원숭이 그림



▲ Figure 9

· 원본 이미지를 저장한다면 $m \times n = 1{,}000 \times 1{,}000 = 1{,}000{,}000$의 저장공간이 필요 (상당히 비효율적)

· rank가 200이므로 reduced SVD를 사용하면 $U\Sigma V^T$ 에서 U는 1000x200, V^T는 200x1000, Σ는 200개의 singular values로 이루어진다.
그러므로 $k(m+n+1) = 200(1{,}000 + 1{,}000 + 1) = 400{,}200$개의 저장 공간만 필요

· 추가적으로 low rank approximation을 이용한다면 (r개의 singular value를 선택)
$r(m+n+1)$개의 저장공간만 활용 -> 상당히 효율적이다! [1]

3.Application

Application

Matrix Properties via the SVD

A는 m x n 차원의 행렬, r은 A의 rank, p = min(m, n)는 A의 0이 아닌 singular value들의 개수(r≤p)라 할 때

- Thm1. A의 rank는 r, 즉 0이 아닌 singular value들의 개수이다
- Thm2, $range(A) = span(u_1, u_2, \dots, u_r)$이고, $null(A) = span(v_{r+1}, v_{r+2}, \dots, v_n)$이다
- Thm3. $||A||_2 = \sigma_1$이고, $||A||_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \dots + \sigma_r^2}$이다
- Thm4. $cond_2(A) = \sigma_{max}/\sigma_{min}$

Application

Pseudoinverse(유사 역행렬)

1. 0이 아닌 스칼라의 pseudoinverse는 그것의 역수이다. 0의 pseudoinverse는 그대로 0이다.

2. m x n 대각 행렬의 pseudoinverse는 각 원소(스칼라)에 pseudoinverse를 취하고 전체를 transpose해서 구한다

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad A^\dagger = \begin{pmatrix} 1/a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/c & 0 \end{pmatrix}$$

3. 역행렬이 존재하는 행렬의 pseudoinverse는 그것의 역행렬과 같다

$$A^\dagger = A^{-1}$$

4. 일반적인 행렬의 pseudoinverse는 다음과 같다.

$$A^\dagger = (U\Sigma V^T)^\dagger = V\Sigma^\dagger U^T$$

Application

Pseudoinverse를 통해 Least Square Solution 구하기

$Ax \doteq b$

$x_{LS} = (A^T A)^{-1} A^T b = A^\dagger b$

증명:

$r^2(x) = ||Ax - b||_2^2 = ||U^T(U\Sigma V^T x - b)||_2^2 = ||\Sigma V^T x - U^T b||_)2^2 =$

$|| \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_L^T \\ V_R^T \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} U_L^T \\ U_R^T \end{bmatrix} b||_2^2 = ||S V_L^T x - U_L^T b||_2^2 - ||U_R^T b||_2^2$

$S V_L^T x - U_L^T b = 0 \rightarrow x = V_L S^{-1} U_L^T b$

이때, $V_L S^{-1} U_L^T$는 $V\Sigma^\dagger U^T$의 Reduced SVD이므로, $V_L S^{-1} U_L^T = V\Sigma^\dagger U^T = A^\dagger$

따라서 $x_{LS} = A^\dagger b$

참고:

$A^\dagger = V\Sigma^\dagger U^T$

$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} U_L & U_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_L & V_R \end{bmatrix}^T$

ESC

Application

Conditioning & Pseudoinverse

$$A = \begin{bmatrix} 0.913 & 0.659 \\ 0.780 & 0.563 \\ 0.457 & 0.330 \end{bmatrix},\ \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1.572 \\ 1.343 \\ 0.787 \end{bmatrix},\ \tilde{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} 1.57 \\ 1.34 \\ 0.78 \end{bmatrix}$$

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} 0.91298 & 0.65902 \\ 0.77999 & 0.56302 \\ 0.45706 & 0.32992 \end{bmatrix}$$

$$A^\dagger = \begin{bmatrix} 1417.326 & 1255.577 & -4972.410 \\ -1962.757 & -1738.785 & 6888.017 \end{bmatrix}$$

$$\hat{A}^\dagger = \begin{bmatrix} 0.364 & 0.311 & 0.182 \\ 0.262 & 0.224 & 0.131 \end{bmatrix}$$

$$A^\dagger b = \begin{bmatrix} 0.99 \\ 1.01 \end{bmatrix}\ A^\dagger \tilde{b} = \begin{bmatrix} 29.19 \\ -38.07 \end{bmatrix}$$

$$\hat{A}^\dagger b = \begin{bmatrix} 1.132 \\ 0.817 \end{bmatrix}\ \hat{A}^\dagger \tilde{b} = \begin{bmatrix} 1.129 \\ 0.815 \end{bmatrix}$$

Application

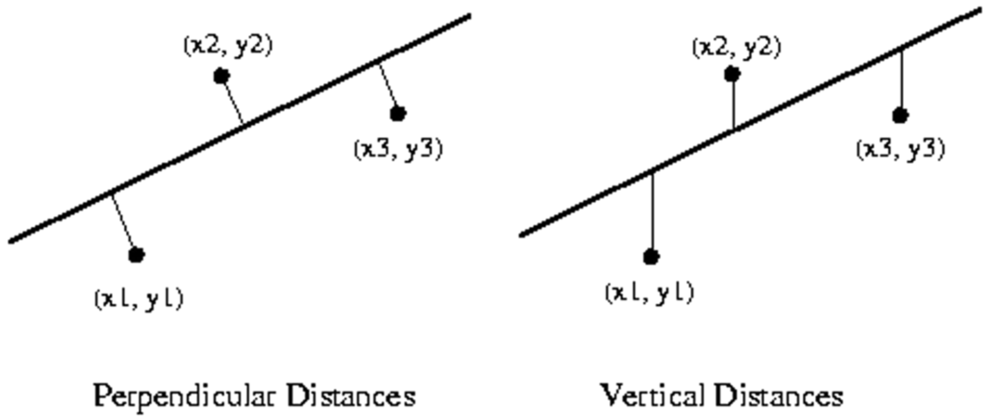
Total Least Square(TLS)

Ordinary Least Square(OLS)

- $Ax \cong b$를 풀 때, A는 변경하지 않고 b만 $proj_{col(A)}b$로 바꿔서 solution을 구한다
- Data point와 curve 간의 vertical distance를 최소화한다

Total Least Square(TLS)

- B뿐만 아니라 행렬 A도 바꿔서 solution을 구한다
- Data point와 curve 간의 orthogonal(perpendicular) distance를 최소화한다



▲ Figure 10

Application

Solution of Total Least Square

- 행렬 A를 rank가 n인 m x n 행렬이라고 하자
- 그러면 [A b]의 rank는 n+1일 것이다(b가 Col(A) 안에 있지 않다면)
- [A b]를 SVD 한 후 lowest singular value를 0으로 만들어 rank를 n으로 만들어 준다
- 그렇게 만들어진 행렬을 [$\hat{A}$ y]라 하자
- $\hat{A}x = y$ → [$\hat{A}$ y]$\begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix}$ = 0
- $\begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix}$는 [$\hat{A}$ y]의 null space 안에 있음
- [$\hat{A}$ y]의 null space는 span(v_{n+1})이다
- 따라서 $\begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix}$ 는 span(v_{n+1})안에 있고, $\begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix}$는 v_{n+1}선형 결합으로 표현이 가능하다.

Application

Solution of Total Least Square

- $$\begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \\ -1 \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} v_{1,n+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ v_{n,n+1} \\ v_{n+1,n+1} \end{bmatrix} \rightarrow$$ 마지막 원소가 -1이 되어야 하므로 a = $-\frac{1}{v_{n+1,n+1}}$
- $$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix} = -\frac{1}{v_{n+1,n+1}} \begin{bmatrix} v_{1,n+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ v_{n,n+1} \end{bmatrix}$$

Application

TLS 예제

다음의 data point들이 있을 때 linear model f(t,x) = xt의 기울기 x를 찾고자 한다

t	-2	-1	3
y	-1	3	-2

풀이:

$$\begin{bmatrix} -2 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} -1 \\ 3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$[\boldsymbol{A} \quad \boldsymbol{b}] = [\boldsymbol{t} \quad \boldsymbol{y}] = \begin{bmatrix} -2 & -1 \\ -1 & 3 \\ 3 & -2 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} -0.154 & 0.802 & 0.577 \\ -0.617 & -0.535 & 0.577 \\ 0.772 & -0.267 & 0.577 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4.583 & 0 \\ 0 & 2.646 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.707 & -0.707 \\ -0.707 & -0.707 \end{bmatrix} = \boldsymbol{U\Sigma V}^T,$$

$$v_{n+1} = v_2 = \begin{bmatrix} -0.707 \\ -0.707 \end{bmatrix}$$

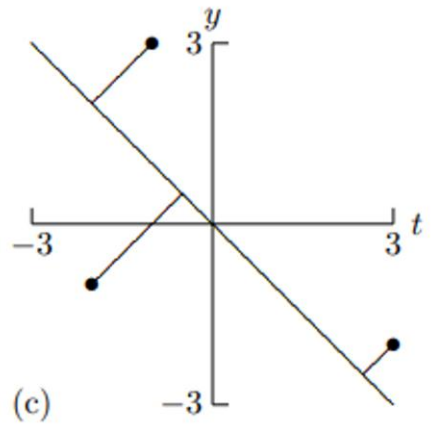
$$x = -\frac{1}{-0.707} - 0.707 = -1$$

Application

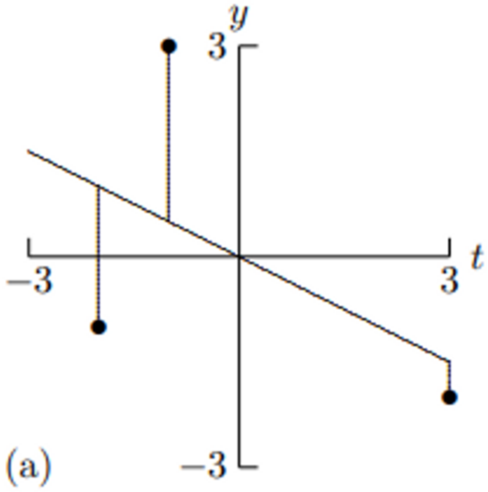
TLS 예제

TLS는 data point와 curve 간의 orthogonal distance를 최소화하므로 data point들과 curve를 좌표평면에 표현하면 다음과 같이 나타난다

비교) OLS의 solution



▲ Figure 11



▲ Figure 12

Application

Eigenvalue Decomposition

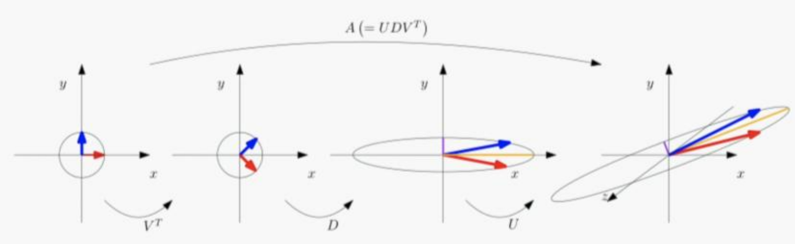
$X \in \mathbb{C}^{m \times m}$의 열벡터들이 matrix A ∈ $\mathbb{C}^{m \times m}$의 선형 독립인 eigenvectors로 구성될 때, A의 eigenvalue decomposition은 $A = X\Lambda X^{-1}$이다. 이때 Λ는 대각성분이 A의 eigenvalues로 구성된 m x m diagonal matrix이다.

Application

SVD vs Eigenvalue Decomposition

$A = U\Sigma V^{\mathrm{T}}$	$A = X\Lambda X^{-1}$
두 개의 기저 사용 $[T]_{B,B} = [I]_{B,U}[T]_{U,V}[I]_{V,B}$	한 개의 기저 사용 $[T]_{B,B} = [I]_{B,X}[T]_{X,X}[I]_{X,B}$
Orthonormal basis	Linearly independent한 eigenvector들로 구성된 basis(일반적으로 orthonormal하지 않음)
모든 matrix에 적용 가능 (rectangular한 모양일 때도)	어떤 matrix에는 적용 불가능 (square한 모양일지라도)
A 자체에 관한 문제일 때 주로 사용	A의 iterated form에 관한 문제일 때 주로 사용 Ex) A^k, e^{tA}

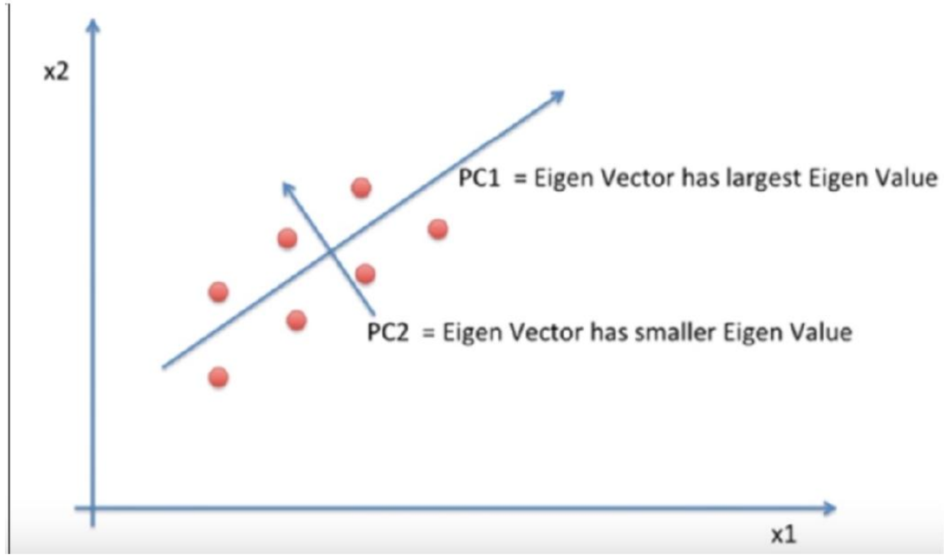
$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -2 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$



Application

PCA

- 차원 축소에 사용되는 대표적인 알고리즘으로, SVD가 사용되는 예시 중 하나
- 계산 비용이 많고, 분석에 필요한 시각화가 어려운 고차원 데이터를 계산 비용이 비교적 작고 준수한 성능의 저차원 데이터로!
- 원 데이터의 표현력을 잘 보존하기 위해 분산을 최대로 하는 주축을 찾는다. 이때 주축은 표본들의 공분산 행렬의 eigenvector들



▲ Figure 13

Application

PCA에서 주축이 공분산 행렬의 eigenvector들이 되는 수식적 증명

- $\mathbf{z_i} = (x_1, \ldots, x_p), i = 1, \ldots, n, ||\mathbf{w}|| = 1\ , \boldsymbol{h_i} = (\boldsymbol{z_i} \cdot \boldsymbol{w})\boldsymbol{w}$
- $(\mathbf{z_i} \cdot \boldsymbol{w})$의 분산을 최대화하는 w를 찾기
- $(\mathbf{z_i} \cdot \boldsymbol{w})$들의 분산: $\sigma_{\boldsymbol{w}}^2, Z = \begin{bmatrix} \boldsymbol{z}_1^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{z}_n^T \end{bmatrix}$
- $\sigma_{\vec{w}}^2 = (1/n)\sum_i(\vec{z_i} \cdot \vec{w})^2 - ((1/n)\sum_i(\vec{z_i} \cdot \vec{w}))^2 = (1/n)\sum_i(\vec{z_i} \cdot \vec{w})^2 = (1/n)(Z\vec{w})^T(Z\vec{w}) = (1/n)\vec{w}^T Z^T Z\vec{w} = \vec{w}^T((Z^T Z)/n)\vec{w} = \vec{w}^T C\vec{w}$
- 제약조건 $w^T w = 1$에서 $w^T Cw$의 최대값을 찾는 문제 → 라그랑주 승수법
- $u = \vec{w}^T C\vec{w} - \lambda(\vec{w}^T\vec{w} - 1)$
- u를 최대로 하는 w는 $\frac{\partial u}{\partial w}$ = 0이 되게 하는 값, 즉

$$\partial u/\partial\vec{w} = 2C\vec{w} - 2\lambda\vec{w} = 0$$
$$C\vec{w} = \lambda\vec{w}$$

Application

SVD 사용하는 이유, python code

공분산행렬은 대칭행렬, 즉

$$A = U\Sigma V^T = PDP^T$$

Eigenvalue decomposition대신 SVD를 사용하는 이유? scikit-learn에서 SVD의 계산 속도가 eigenvalue decomposition의 계산 속도보다 빠름!

```python
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
url = "https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/iris/iris.data"
df = pd.read_csv(url, names=['sepal length','sepal width','petal length','petal width','target'])
print(df)
```

	sepal length	sepal width	petal length	petal width	target
0	5.1	3.5	1.4	0.2	Iris-setosa
1	4.9	3.0	1.4	0.2	Iris-setosa
2	4.7	3.2	1.3	0.2	Iris-setosa
3	4.6	3.1	1.5	0.2	Iris-setosa
4	5.0	3.6	1.4	0.2	Iris-setosa
..	...	...	...	...	...
145	6.7	3.0	5.2	2.3	Iris-virginica
146	6.3	2.5	5.0	1.9	Iris-virginica
147	6.5	3.0	5.2	2.0	Iris-virginica
148	6.2	3.4	5.4	2.3	Iris-virginica
149	5.9	3.0	5.1	1.8	Iris-virginica

▲ Figure 15

```python
from sklearn.preprocessing import StandardScaler  # 표준화 패키지 라이브러리
x = df.drop(['target'], axis=1).values # 독립변인들의 value값만 추출
y = df['target'].values # 종속변인 추출
x = StandardScaler().fit_transform(x) # x객체에 x를 표준화한 데이터를 저장
features = ['sepal length', 'sepal width', 'petal length', 'petal width']
pd.DataFrame(x, columns=features).head()
print(pd.DataFrame(x, columns=features))
```

	sepal length	sepal width	petal length	petal width
0	-0.900681	1.032057	-1.341272	-1.312977
1	-1.143017	-0.124958	-1.341272	-1.312977
2	-1.385353	0.337848	-1.398138	-1.312977
3	-1.506521	0.106445	-1.284407	-1.312977
4	-1.021849	1.263460	-1.341272	-1.312977
..	...	...	...	...
145	1.038005	-0.124958	0.819624	1.447956
146	0.553333	-1.281972	0.705893	0.922064
147	0.795669	-0.124958	0.819624	1.053537
148	0.432165	0.800654	0.933356	1.447956
149	0.068662	-0.124958	0.762759	0.790591

[150 rows x 4 columns]

▲ Figure 16

Application

python code

```python
from sklearn.decomposition import PCA
#3번 4번 성분은 0.04정도로 설명 가능한 분산량이 얼마 증가하지 않기 때문에,
#주성분은 2개로 결정하는 것이 적절하다.
#점점 작아지도록 정렬되어 있음을 알 수 있다.
pca = PCA(n_components=4)
printcipalComponents = pca.fit_transform(x)
principalDf = pd.DataFrame(data=printcipalComponents, columns = ['principal component1', 'principal component2', '3','4'])
print(pca.explained_variance_ratio_)
```

```
[0.72770452 0.23030523 0.03683832 0.00515193]
```

```python
pca = PCA(n_components=2) # 주성분을 몇개로 할지 결정
printcipalComponents = pca.fit_transform(x)
principalDf = pd.DataFrame(data=printcipalComponents, columns = ['principal component1', 'principal component2'])
print(pca.explained_variance_ratio_)
```

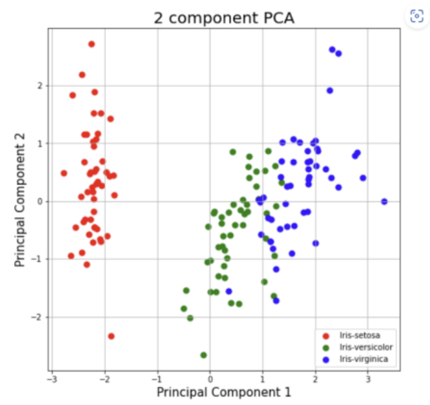
```
[0.72770452 0.23030523]
```

```python
print(principal_components)
```

	principal component1	principal component2
0	-2.264542	0.505704
1	-2.086426	-0.655405
2	-2.367950	-0.318477
3	-2.304197	-0.575368
4	-2.388777	0.674767
..	...	...
145	1.870522	0.382822
146	1.558492	-0.905314
147	1.520845	0.266795
148	1.376391	1.016362
149	0.959299	-0.022284

[150 rows x 2 columns]

▲ Figure 17



▲ Figure 18

END

References

[1] Howard Anton, Chris Rorres - Elementary Linear Algebra, Applications Version-Wiley (2013), 523p

Figure

[1] https://github.com/Hoon34

[2 – 3, 8, 9] Howard Anton, Chris Rorres - Elementary Linear Algebra, Applications Version-Wiley (2013)

[4, 5] Darve and Wootters - Numerical Linear Algebra with Julia

[6, 7] https://velog.io/@dltjrdud37/Day9-벡터와-직교분해-SVD-PC

[10] https://services.math.duke.edu/education/modules2/materials/test/test/part4.html

[11, 12] Michael T. Heath - Scientific Computing

[13, 15, 16, 17, 18] https://velog.io/@swan9405/PCA

[14] https://darkpgmr.tistory.com/m/110