

1. 행렬


행렬은 벡터를 원소로 가지는 2 차원 배열이다. 행과 열이라는 인덱스를 가진다.

수식

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 7 & 5 & 0 \\ -2 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

코드

```
1 X = np.array([[1, -2, 3],
2               [7, 5, 0],
3               [-2, -1, 2]])
```

 numpy 에선 행(row)이 기본 단위입니다

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix} \begin{matrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \\ \mathbf{x}_n \end{matrix}$$

(n 개의 행, m 개의 열)


$\mathbf{X} = (x_{ij})$ 행렬을 x_{ij} 와 같은 표기로 표현할 수도 있다.

전치행렬을 행과 열의 인덱스가 바뀐 행렬을 의미한다. 즉, $n \times m$ 행렬이 $m \times n$ 행렬로 바뀐다. 벡터에 적용하면 행 벡터는 열 벡터가 되고 열 벡터는 행 벡터가 된다.

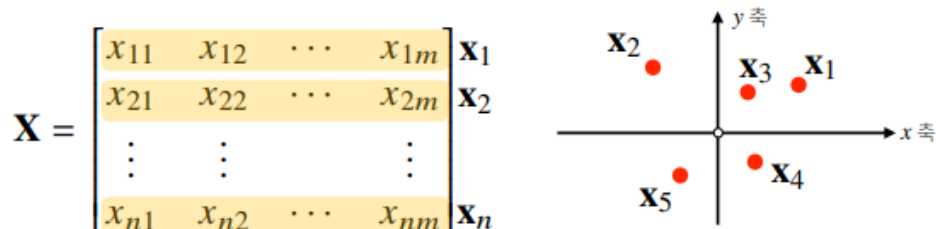
$$\mathbf{X}^T = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix} \begin{matrix} \text{행벡터} \\ \\ \\ \text{열벡터} \end{matrix}$$

$m \times n$ 행렬

$\mathbf{X}^T = (x_{ji})$

 전치행렬(transpose matrix)은 행과 열의 인덱스가 바뀐 행렬을 말합니다


벡터가 공간에서 한 점을 의미했다면 행렬은 여러 점들을 의미한다. 행렬의 행 벡터 \mathbf{x}_i 는 i 번째 데이터를 의미한다. x_{ij} 는 i 번째 데이터의 j 번째 변수 값을 의미한다.



2. 행렬의 연산

행렬은 벡터를 원소로 가지는 2 차원 배열이다. 따라서 벡터와 동일하게 행렬끼리 같은 모양을 가지면 덧셈, 뺄셈을 계산할 수 있다.

$$\mathbf{X} \pm \mathbf{Y} = (x_{ij} \pm y_{ij})$$


 벡터의 덧셈셈과 다르게 없습니다

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1m} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{n1} & y_{n2} & \cdots & y_{nm} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X} \pm \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} x_{11} \pm y_{11} & x_{12} \pm y_{12} & \cdots & x_{1m} \pm y_{1m} \\ x_{21} \pm y_{21} & x_{22} \pm y_{22} & \cdots & x_{2m} \pm y_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} \pm y_{n1} & x_{n2} \pm y_{n2} & \cdots & x_{nm} \pm y_{nm} \end{bmatrix}$$

성분곱도 벡터와 동일하다. 스칼라곱도 마찬가지다.

$$\mathbf{X} \odot \mathbf{Y} = (x_{ij} y_{ij})$$

 성분곱은 각 인덱스 위치끼리 곱합니다

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1m} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{n1} & y_{n2} & \cdots & y_{nm} \end{bmatrix}$$


$$\mathbf{X} \odot \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} x_{11}y_{11} & x_{12}y_{12} & \cdots & x_{1m}y_{1m} \\ x_{21}y_{21} & x_{22}y_{22} & \cdots & x_{2m}y_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1}y_{n1} & x_{n2}y_{n2} & \cdots & x_{nm}y_{nm} \end{bmatrix}$$

3. 행렬의 곱셈

행렬 곱셈(matrix multiplication)은 i 번째 행벡터와 j 번째 열벡터 사이의 내적 성분으로 가지는 행렬을 계산한다. x의 행 길이는 y의 열 길이와 같아야한다.

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1\ell} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2\ell} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{m1} & y_{m2} & \cdots & y_{m\ell} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{XY} = \left(\sum_k x_{ik} y_{kj} \right)$$

 행렬곱은 X의 열의 개수와 Y의 행의 개수가 같아야 한다

아래에서 -8이라는 값은 $1*0 + (-2)*1 + 3*(-2)$ 로 계산된 것이다.

```
1 X = np.array([[1, -2, 3],
2               [7, 5, 0],
3               [-2, -1, 2]])
4
5 Y = np.array([[0, 1],
6               [1, -1],
7               [-2, 1]])
```

```
1 X @ Y
array([[ -8,  6],
       [ 5,  2],
       [-5,  1]])
```

넘파이의 내적 함수인 np.inner()를 사용하면 i 번째 행벡터와 j 번째 행벡터 사이의 내적을

성분으로 가지는 행렬을 계산한다. 즉, x의 행 길이와 y의 행 길이가 같아야한다.

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1m} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{n1} & y_{n2} & \cdots & y_{nm} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{XY}^T = \left(\sum_k x_{ik} y_{jk} \right)$$

-5는 $1*0 + (-2)*1 + 3*(-1)$ 의 결과이다.

```
1 X = np.array([[1, -2, 3],
2               [7, 5, 0],
3               [-2, -1, 2]])
4
5 Y = np.array([[0, 1, -1],
6               [1, -1, 0]])
```

```
1 np.inner(X, Y)
array([[ -5,  3],
       [ 5,  2],
       [-3, -1]])
```

4. 행렬_2

행렬은 벡터공간에서 사용되는 연산자(operator)로 이해할 수 있다. 행렬곱을 사용하면 벡터를 다른 차원의 공간으로 보낼 수 있다. 이런 특징을 이용해 패턴을 추출할 수 있고 데이터를 압축할 수도 있다.

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}$$

$\mathbf{Z} \quad \mathbf{A} \quad \mathbf{X}$

모든 선형변환(linear transform)은 행렬곱으로 계산할 수 있다

5. 역행렬

어떤 행렬 A의 연산을 거꾸로 되돌리는 행렬을 역행렬(inverse matrix)이라고 부르고 A^{-1} 이라 표기한다. 역행렬은 행과 열 숫자가 같고 행렬식이 0이 아닌 경우에만 계산할 수 있다.

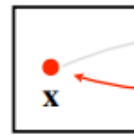
$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}$$

항등행렬

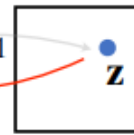
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$



역행렬 연산은 $n = m$ 일 때만 가능하고
행렬 \mathbf{A} 의 행렬식이 0 이 되면 안된다



\mathbb{R}^n : n차원 공간



\mathbb{R}^n : n차원 공간

numpy.linalg.inv()로 구할 수 있다.

```
1 X = np.array([[1, -2, 3],
2               [7, 5, 0],
3               [-2, -1, 2]])

1 np.linalg.inv(X)

array([[ 0.21276596,  0.0212766 , -0.31914894],
       [-0.29787234,  0.17021277,  0.44680851],
       [ 0.06382979,  0.10638298,  0.40425532]])

1 X @ np.linalg.inv(X)

array([[ 1.00000000e+00, -1.38777878e-17,  0.00000000e+00],
       [-2.22044605e-16,  1.00000000e+00, -5.55111512e-17],
       [-2.77555756e-17,  0.00000000e+00,  1.00000000e+00]])
```

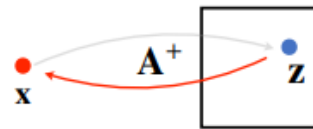
행과 열의 길이가 달라 역행렬을 계산할 수 없다면 유사역행렬(pseudo-inverse) 또는 무어-펜로즈(Moore-Penrose) 역행렬 \mathbf{A}^+ 을 이용할 수 있다.

$$n \geq m \text{ 인 경우 } \mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$$

$$n \leq m \text{ 인 경우 } \mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{A}^T)^{-1}$$



$n \geq m$ 이면 $\mathbf{A}^+ \mathbf{A} = \mathbf{I}$ 가 성립하고
 $n \leq m$ 이면 $\mathbf{A} \mathbf{A}^+ = \mathbf{I}$ 만 성립한다



\mathbb{R}^m : m차원 공간

\mathbb{R}^n : n차원 공간

numpy.linalg.pinv()로 구할 수 있다.

```
1 Y = np.array([[0, 1],
2               [1, -1],
3               [-2, 1]])

1 np.linalg.pinv(Y)

array([[ 5.00000000e-01,  4.09730229e-17, -5.00000000e-01],
       [ 8.33333333e-01, -3.33333333e-01, -1.66666667e-01]])

1 np.linalg.pinv(Y) @ Y

array([[ 1.00000000e+00, -2.22044605e-16],
       [ 0.00000000e+00,  1.00000000e+00]])
```

유사역행렬을 사용해 연립 방정식을 풀 수 있다.

$$\begin{aligned}
 a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1m}x_m &= b_1 \\
 a_{12}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2m}x_m &= b_2 \\
 &\vdots \\
 a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nm}x_m &= b_n
 \end{aligned}$$

$n \leq m$ 인 경우: 식이 변수 개수보다 작거나 같아야 함

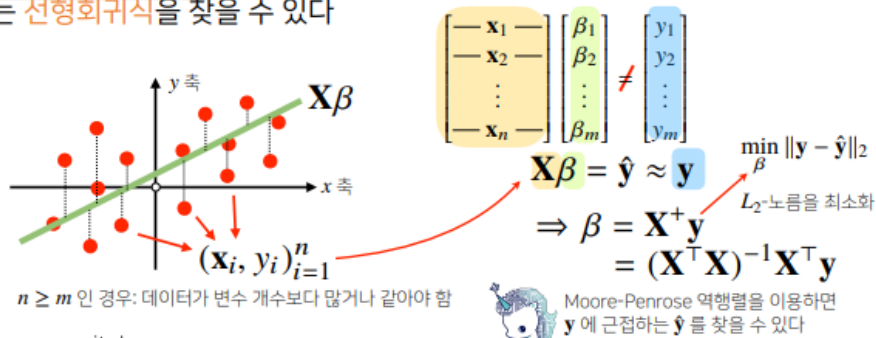
$\Rightarrow \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

$\Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \mathbf{b}$
 $= \mathbf{A}^\top (\mathbf{A} \mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{b}$

$n \leq m$ 이면 무어-펜로즈 역행렬을 이용하면 해를 하나 구할 수 있다

유사역행렬을 이용해 선형 회귀 분석도 수행할 수 있다.

- `np.linalg.pinv` 를 이용하면 데이터를 선형모델(linear model)로 해석하는 **선형회귀식**을 찾을 수 있다



boostcamp aitech

© NAVER Connect Foundation

35

코드는 아래와 같이 쓸 수 있다.

```

1 # Scikit Learn 을 활용한 회귀분석
2 from sklearn.linear_model import LinearRegression
3 model = LinearRegression()
4 model.fit(X, y)
5 y_test = model.predict(x_test)
6
7 # Moore-Penrose 역행렬
8
9 beta = np.linalg.pinv(X) @ y
10 y_test = np.append(x_test) @ beta

```

같은 방법이지만 결과가 다르게 된다. 왜일까?

두 방식의 결과값 차이는 y 절편 때문에 발생한다. sklearn 은 y 절편을 자동으로 추가해주지만 우리는 직접 추가해야한다. 완성 코드는 아래와 같다.

```

1 # Scikit Learn 을 활용한 회귀분석
2 from sklearn.linear_model import LinearRegression
3 model = LinearRegression()
4 model.fit(X, y)
5 y_test = model.predict(x_test)
6
7 # Moore-Penrose 역행렬
8 X_ = np.array([np.append(x, [1]) for x in X]) # intercept 항 추가
9 beta = np.linalg.pinv(X_) @ y
10 y_test = np.append(x, [1]) @ beta

```

y 절편(intercept) 항을 직접 추가해야 한다