10. 정규방정식

1) 정규방정식

- Least squares problem $A\boldsymbol{x} \simeq \boldsymbol{b}$가 주어졌을 때, 정규방정식은 다음과 같다.

$$A^TA\hat{x} = A^Tb$$

- 만약 $C = A^TA$가 invertible이라면, 해는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\hat{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb$$

- 이전 강의에서 살펴본 기하학적 방법 외에도, 미분을 이용해서 정규방정식을 유도할 수 있다.

$$\hat{x} = \underset{x}{\arg\min}\|b - Ax\| = \underset{x}{\arg\min}\|b - Ax\|^2$$

$$= \underset{x}{\arg\min}(b-Ax)^T(b-Ax) = (b^T - x^TA^T)(b-Ax) = \underbrace{b^Tb}_{0} \underbrace{- x^TA^Tb}_{A^Tb} \underbrace{- b^TAx}_{A^Tb} + \underbrace{x^TA^TAx}_{A^TAx + A^TAx = 2A^TAx}$$

미분결과 ⇒

마지막 결과를 x에 대해 미분하면 $-A^Tb - A^Tb + 2A^TAx = 0$

cf. vector의 미분

$f(x) = a^Tx = x^Ta$

$\frac{df}{dx} = a$

e.g. $f(x) = \overset{a}{\begin{bmatrix} 3 & 2 \end{bmatrix}} \overset{x}{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}} = 3x_1 + 2x_2$

$\frac{df}{dx} = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix} = a$

$$\therefore A^TAx = A^Tb$$

2) 정규방정식의 해는 대부분 유일하다.

- $C = A^TA$는 A가 linearly independent인 column들을 가질 때에만 invertible하다.

p.f. if, x가 A의 nullspace라면, $Ax = 0$ 이다.

A^T를 곱하면 $A^TAx = 0$ 이다. ⇒ A가 invertible이면, A^TA도 마찬가지다.
(null space가 동일하기 때문)

여기에 x^T를 곱하면

$x^TA^TAx = (Ax)^T(Ax) = \|Ax\|^2 = 0$

따라서, 만약 $A^TAx = 0$ 이면, Ax의 길이는 0, 즉 $Ax = 0$ 이다. ⇒ A^TA가 invertible 이면, A도 그렇다.

- 위 사실로 보아, 실제 data를 다룰 때 $C = A^TA$는 (대부분의 경우) invertible이다.
- $C = A^TA$가 invertible이면, 정규방정식의 해는 유일하다.
- $C = A^TA$가 non-invertible이라면 linear system의 해는 없거나 무수히 많다. 하지만 정규방정식의 해는 항상 존재하므로, $C = A^TA$가 non-invertible이라면 정규방정식은 해가 무수히 많다.