

# **Linear Algebra Practice Day 3**

2025.07.14



# 0. 환경설정

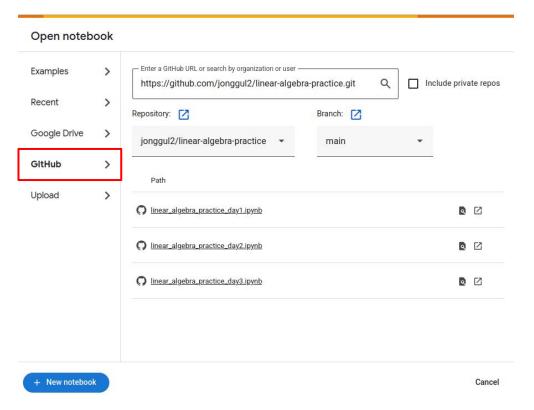
### Colab이란?

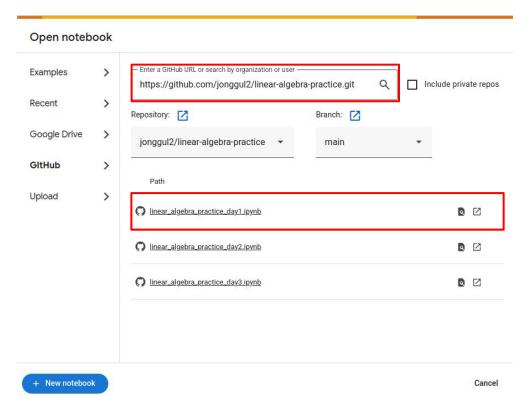
Colaboratory(줄여서 'Colab'이라고 함)을 통해 브라우저 내에서 Python 스크립트를 작성하고 실행할 수 있습니다.

- 구성이 필요하지 않음
- 무료로 GPU 사용
- 간편한 공유

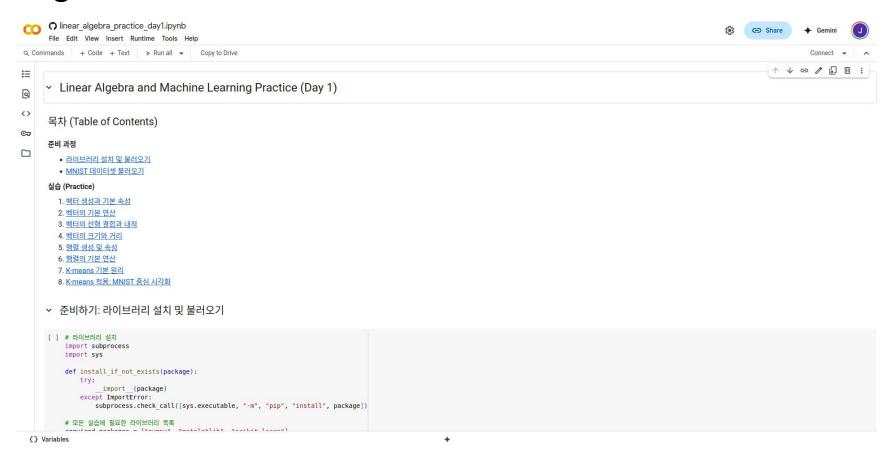
학생이든, 데이터 과학자든, AI 연구원이든 Colab으로 업무를 더욱 간편하게 처리할 수 있습니다. <u>Colab 소개 영상</u> 또는 <u>Colab에서 놓치기 쉬운 기능</u>을 시 청하여 자세한 내용을 확인하거나 아래에서 바로 시작해 보세요.

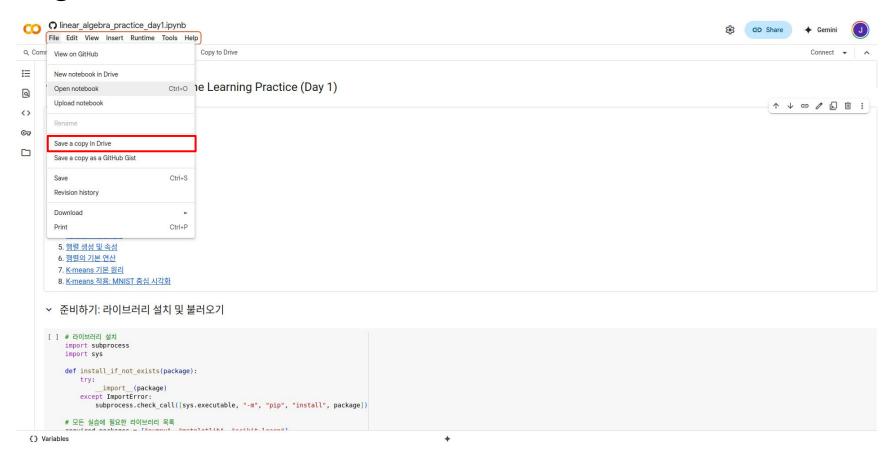
Link: <a href="https://colab.research.google.com/">https://colab.research.google.com/</a>





Github Link: <a href="https://github.com/jonggul2/linear-algebra-practice.git">https://github.com/jonggul2/linear-algebra-practice.git</a>





### 목차

Linear Algebra and Machine Learning Practice (Day 3)

### 목차 (Table of Contents)

#### 준비 과정

- 라이브러리 설치 및 불러오기
- MNIST 데이터셋 불러오기

### 실습 (Practice)

- 1. Cholesky 분해 (Cholesky Decomposition)
- 2. <u>고유값 분해 (Eigendecomposition)</u>
- 3. <u>특이값 분해 (Singular Value Decomposition, SVD)</u>
- 4. <u>주성분 분석 (Principal Component Analysis, PCA)</u>

### 준비하기

#### 준비하기: 라이브러리 설치 및 불러오기

```
import subprocess
def install_if_not_exists(package):
       __import__(package)
   except ImportError:
       subprocess.check_call([sys.executable, "-m", "pip", "install", package]
# 모든 실습에 필요한 라이브러리 목록
required_packages = ["numpy", "matplotlib", "scipy", "scikit-learn"]
for package in required packages:
   install if not exists(package)
# 라이브러리 불러오기
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import fetch_openml
# 전체 실습의 재현성을 위해 랜덤 시드를 고정합니다.
np.random.seed(0)
```

### 준비하기

#### MNIST 데이터셋 불러오기

scikit-learn의 fetch\_openml을 사용하여 MNIST 손글씨 숫자 데이터셋을 불러옵니다. 데이터는 784개의 픽셀(28x28)로 구성된 이미지이며, 0~255 값을 갖습니다. 실습에서 사용할 수 있도록 255로 나누어 정규화합니다.

```
print("MNIST 데이터셋을 불러오는 중...(몇 분 정도 소요될 수 있습니다)")
       # as_frame=False : numpy array로 받기
       # parser='auto' : 최신 scikit-learn에서 권장하는 파서
       mnist = fetch openml('mnist 784', version=1, as frame=False, parser='auto')
       X mnist data = mnist.data / 255.0 # 정규화
       v mnist data = mnist.target.astype(int)
       print("MNIST 데이터셋 로드 완료.")
       print(f"데이터 형태: {X_mnist_data.shape}")
       print(f"레이블 형태: {y_mnist_data.shape}")
    except Exception as e:
       print(f"데이터셋 로드 중 오류 발생: {e}")
       print("인터넷 연결을 확인하거나, 잠시 후 다시 시도해주세요.")
       X mnist data, y mnist data = None, None
→ MNIST 데이터셋을 불러오는 중... (몇 분 정도 소요될 수 있습니다)
    MNIST 데이터셋 로드 완료.
    데이터 형태: (70000, 784)
    레이블 형태: (70000,)
```



1. Cholesky 분해 (Cholesky Decomposition)

Cholesky 분해는 행렬 A가 대칭(Symmetric)이면서 양의 정부호(Positive Definite)라는 특별한 조건을 만족할 때 사용할 수 있는 효율적인 행렬 분해 방법입니다.

행렬 A를 아래와 같이 하삼각행렬(Lower-triangular matrix) L과 그 전치 행렬 L<sup>T</sup>의 곱으로 분해합니다.

$$A = LL^T$$
  $egin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \ dots & \ddots & dots \ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = egin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \ dots & dots & \ddots & dots \ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} egin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \ 0 & l_{22} & \cdots & l_{n2} \ dots & dots & \ddots & dots \ 0 & 0 & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$ 

Cholesky 분해는 선형 시스템 Ax=b를 매우 효율적으로 푸는 데 사용됩니다. A를 LL<sup>T</sup>로 대체하면, 복잡한 문제가 다음과 같이 두 개의 간단한 삼각 시스템 문제로 나뉩니다.

$$egin{aligned} Aoldsymbol{x} &= oldsymbol{b} \ (LL^T)oldsymbol{x} &= oldsymbol{b} \ L(L^Toldsymbol{x}) &= oldsymbol{b} \end{aligned}$$

여기서  $L^Tx$ 를 y로 치환하면, 아래의 두 단계로 해 x를 구할 수 있습니다.

- 1. 전방 대입법 (Forward Substitution): Ly = b를 풀어 중간 해 y를 구합니다.
- 2. 후방 대입법 (Backward Substitution): L^T x = y를 풀어 최종 해 x를 구합니다.

이 방식은 역행렬  $A^{-1}$ 을 직접 계산하는 것보다 수치적으로 훨씬 안정적이고 계산 비용이 저렴합니다.

#### 1.1. 실습 데이터 준비 및 검증

일반적인 선형 시스템 문제에서는 행렬 A와 벡터 b가 주어지고, 미지의 해 x를 구하는 것이 목표입니다.

하지만 이 실습에서는 우리가 사용할 Cholesky 분해 방법이 올바르게 작동하는지 검증하는 것까지 목표로 합니다. 따라서 과정을 역으로 진행합니다.

- 1. 먼저, 우리가 찾고자 하는 정답 x를 임의로 정의합니다.
- 2. 그 다음, 이 x와 주어진 A를 사용하여 Ax = b를 만족하는 벡터 b를 계산합니다.

이렇게 A와 b가 준비되면, A와 b가 주어졌을 때 미지의 x를 구하라는 형태의 선형 시스템 문제가 완성됩니다. 이어지는 단계에서는 Cholesky 분해를 이용 해 이 문제의 해를 구하고, 그 결과가 우리가 미리 설정해 둔 정답 x와 일치하는지 비교하여 전체 풀이 과정의 정확성을 검증할 것입니다.

또한, 행렬 A가 Cholesky 분해의 필수 조건(대칭, 양의 정부호)을 만족하는지도 함께 검증합니다.

b cholesky = A cholesky @ x solution

```
# 실습: 아래 행렬 A의 값을 직접 바꿔보며, 검증 결과가 어떻게 변하는지 확인해보세요.
A_cholesky = np.array([
   [4., 2., 0.],
                                                  →▼ 행렬 A:
                                                       [[4, 2, 0,]
   [0., 2., 5.]
                                                       [2, 5, 2,]
                                                       [0. 2. 5.]]
# 대칭 행렬 검증
                                                      A는 대칭 행렬인가? -> True
is_symmetric = np.allclose(A_cholesky, A_cholesky.T)
                                                      A는 양의 정부호 행렬인가? -> True
# 양의 정부호 행렬 검증
                                                      우리가 찾으려는 실제 해 x:
if is_symmetric:
                                                       [1, 2, 3,]
   eigenvalues = np.linalg.eigvalsh(A_cholesky)
   is positive definite = np.all(eigenvalues > 0)
                                                      계산된 벡터 b = Ax:
                                                       [ 8. 18. 19.]
# 실제 해 x를 정의하고 b를 계산
x_{solution} = np.array([1., 2., 3.])
```

```
      ✓ 1.2. Cholesky 분해 (A = LL<sup>T</sup>)
      (Cholesky 분해 결과, 하삼각행렬 L: [[2. 0. 0.]]

      이제 조건이 맞는 행렬 A를 하삼각행렬 L로 분해합니다.
      (I = 0. 1. 2.]]

      분해 검증 (L @ L.T): [[4. 2. 0.]]

      (I = None if cholesky_possible: L = scipy.linalg.cholesky(A_cholesky, lower=True)
      (I = 0. 1. 2.]]

      (I = None if cholesky possible: L = scipy.linalg.cholesky (A_cholesky, lower=True)
      (I = 0. 1. 2.]]
```

 1.3. 선형 시스템 풀이 (전방/후방 대입법) 분해된 L 행렬을 이용해, 선형 시스템을 두 단계로 나누어 풉니다. 1. 전방 대입법 (Ly = b): 중간 해 y를 구합니다. 2. 후방 대입법 (L^T x = y): 최종 해 x를 구합니다. [5] if L is not None: # 1. Ly = b 풀이 (전방 대입법) y = scipy.linalg.solve\_triangular(L, b\_cholesky, lower=True) print("1. 중간 해 y:₩n", np.round(y, 2)) # 2. L.T @ x = y 풀이 (후방 대입법) x\_cholesky = scipy.linalg.solve\_triangular(L.T, y, lower=False) print("\m2. 최종 해 x:\m", np.round(x\_cholesky, 2)) print("LOI 생성되지 않아 풀이 과정을 건너뜁니다.") → 1. 중간 해 y: 2. 최종 해 x:

#### ∨ 1.4. 최종 검증

Cholesky 분해를 통해 구한 해가 우리가 미리 정의했던 실제 해 x와 일치하는지, 그리고 np.linalg.solve를 이용해 직접 구한 해와도 일치하는지 확인하여 계산이 정확했는지 검증합니다.

```
[6] # 우리가 아는 실제 해와 비교
   print("Cholesky 해와 실제 해 x가 일치합니까?", np.allclose(x_cholesky, x_solution))
   # np.linalg.solve와 결과 비교
   x direct = np.linalg.solve(A cholesky, b cholesky)
   print("np.linalg.solve 해와 실제 해 x가 일치합니까?", np.allclose(x direct, x solution))
   print("\nCholesky 해:\n", np.round(x_cholesky, 2))
                                                      ☞ Cholesky 해와 실제 해 x가 일치합니까? True
   print("np.linalg.solve 해:\"n", np.round(x_direct, 2))
                                                           np.linalg.solve 해와 실제 해 x가 일치합니까? True
   print("실제 해 x:\n", x_solution)
                                                           Cholesky 해:
                                                            [1, 2, 3,]
                                                           np.linalg.solve 해:
                                                            [1, 2, 3,]
                                                           실제 해 x:
                                                            [1, 2, 3,]
```



### 2. 고유값 분해 (Eigendecomposition)

고유값 분해(Eigendecomposition)는 특정 조건을 만족하는 정방 행렬(square matrix) A를 세 행렬의 곱으로 분해하는 방법입니다.

$$A = PDP^{-1}$$

- A: n x n 크기의 정방 행렬(square matrix)입니다.
- P: A의 고유벡터(eigenvector)를 열(column)로 갖는 행렬입니다.
- D: A의 고유값(eigenvalue)을 대각 원소로 갖는 대각 행렬(diagonal matrix)입니다.
- P-1: P의 역행렬(inverse matrix)입니다.

이 분해는 행렬 A가 n개의 선형 독립(linearly independent)인 고유벡터를 가질 때, 즉 대각화(diagonalization)가 가능할 때 성립합니다.

$$A = egin{bmatrix} dots & dots & dots \ v_1 & v_2 & \cdots & v_n \ dots & dots & dots \end{bmatrix} egin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \ dots & dots & \ddots & dots \ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix} egin{bmatrix} dots & dots & dots \ w_1 & w_2 & \cdots & w_n \ dots & dots & dots & dots \end{bmatrix}$$

위 식에서 첫 번째 행렬은 고유벡터(eigenvector) 행렬 P, 두 번째는 고유값(eigenvalue) 대각 행렬 D, 세 번째는 P의 역행렬(inverse matrix) P-1을 나타냅니다.

#### 기하학적 의미: 복잡한 변환을 간단한 단계로 분해하기

고유값 분해는 복잡한 행렬 변환 A를 세 단계의 간단한 변환으로 나누어 이해할 수 있게 해줍니다. 벡터 x에 행렬 A를 곱하는 변환 Ax는  $PDP^{-1}x$ 와 같으며, 다음과 같은 순서로 해석할 수 있습니다.

- 1. 좌표계 변환 ( $P^{-1}$  적용): 첫 단계는 벡터 \$x\$에 고유벡터 행렬의 역행렬 \$P^{-1}\$을 곱하는 것입니다. 이 연산은 벡터 \$x\$를 기존의 표준 좌표계에 서 고유벡터들이 축을 이루는 새로운 좌표계로 변환합니다.
- 2. 크기 조절 ( $m{D}$  적용): 다음으로, 변환된 좌표값에 고유값 대각 행렬 \$D\$를 곱합니다. 고유벡터 좌표계에서는 복잡한 변환 \$A\$가, 각 축의 성분을 해당 고유값 \$\lambda\_i\$만큼 곱해주는 간단한 크기 조절(scaling) 연산으로 대체됩니다.
- 3. 좌표계 복원 ( $m{P}$  적용): 마지막으로, 크기 조절이 완료된 벡터에 고유벡터 행렬 \$P\$를 곱합니다. 이 연산은 벡터를 다시 원래의 표준 좌표계로 되돌려 최종 변환 결과를 얻는 과정입니다.

#### ∨ 2.1. 실습 데이터 준비 및 분해 조건 확인

고유값 분해를 적용하기 전, 주어진 행렬이 분해 가능한지 확인합니다. n x n 행렬의 고유벡터들이 n차원 공간의 기저(basis)를 이룰 수 있는지, 즉 고유벡터 행렬 P가 역행렬을 갖는지 판별합니다.

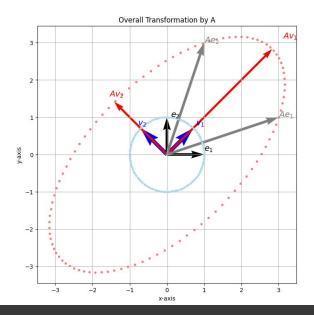
P의 행렬식(determinant)이 0이 아니면, P는 역행렬을 가지며 행렬 A는 고유값 분해가 가능합니다.

```
[24] # 실습에 사용할 2x2 정방 행렬(square matrix) 정의
    # 행렬의 값을 바꾸어 분해 가능 여부를 테스트해볼 수 있습니다.
    # 예: A = np.array([[1, 1], [0, 1]]) -> 분해 불가능
    A = np.array([
                                                         행렬 A:
                                                          [[3 1]
                                                          [1 3]]
    print("행렬 A:₩n", A)
    print("-" * 30)
                                                         고유벡터 행렬 P의 행렬식: 1.00
    # 분해 가능성 확인
                                                         행렬 A는 고유값 분해가 가능한가? -> True
       eigenvalues, P = np.linalg.eig(A)
       # P의 행렬식(determinant)이 0에 가까운지 확인하여 분해 가능성 판별
       determinant_P = np.linalg.det(P)
       is_diagonalizable = not np.isclose(determinant P, 0)
```

분해 조건을 만족하는 행렬 A를 P, D,  $P^{-1}$  행렬로 분해하고, 분해된 행렬들을 이용해 다시 A를 재구성해봅니다.

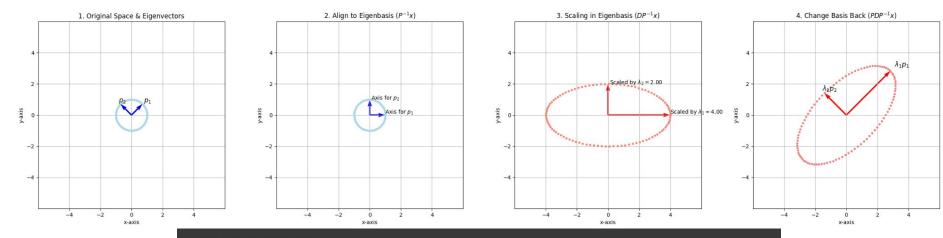
```
[25] if is_diagonalizable:
        # D는 고유값(eigenvalue)을 대각 원소로 가지는 대각 행렬(diagonal matrix)
        D = np.diag(eigenvalues)
        # P의 역행렬(inverse matrix) 계산
        P inv = np.linalg.inv(P)
        print("고유값 ኢ:\n", eigenvalues)
        print("\nz유벡터 행렬 P:\n, np.round(P, 2))
        print("₩n대각행렬 D:₩n", np.round(D, 2))
        print("\nP의 역행렬 P-1 :\np.round(P inv. 2))
        # 분해 검증: A = PDP-1
        A reconstructed = P @ D @ P inv
        print("₩n재구성된 행렬 PDP-1 :\mun", np.round(A_reconstructed, 2))
        print("\mash PDP-1 이 일치하는가?", np.allclose(A, A_reconstructed))
        print("행렬 A가 분해 조건을 만족하지 않아 분해를 진행하지 않습니다.")
```

```
고유값 λ:
 [4. 2.]
고유벡터 행렬 P:
 [ 0.71 0.71]]
대각행렬 D:
 [[4. 0.]
 [0. 2.]]
P의 역행렬 P-1 :
 [[ 0.71  0.71]
 [-0.71 \ 0.71]
재구성된 행렬 PDP-1 :
 [[3, 1,]
 [1, 3,]]
A와 PDP-1 이 일치하는가? True
```



#### 위 그림은 행렬 변환 A가 공간에 어떤 영향을 미치는지 한눈에 보여줍니다.

- 파란색 점(단위 원)이 행렬 A에 의해 빨간색 점(타원)으로 변환됩니다.
- 대부분의 벡터는 변환 시 방향이 바뀌지만(검은색 화살표  $e_1,e_2$ 가 회색 화살표  $Ae_1,Ae_2$ 로 변하는 것을 보세요), 파란색 벡터만은 방향이 바뀌지 않습니다.
- 변환 후의 빨간색 화살표는 원래 고유벡터에서 크기만 고유값 $(\lambda)$  배만큼 변한 것을 확인할 수 있습니다.  $(Av=\lambda v)$
- 이 고유벡터들이 바로 선형 변환의 주축(principal axes)이 됩니다.



#### 고유값 분해의 시각적 이해

고유값 분해의 각 단계를 따라가 보면, 복잡해 보이는 변환 A가 사실은 세 가지 간단한 동작의 연속임을 알 수 있습니다.  $(A=PDP^{-1})$ 

- 1. Original Space & Eigenvectors: 변환 전의 단위 원입니다. 여기에 행렬 A 변환의 핵심 방향인 고유벡터 $(p_1,p_2)$ 를 표시합니다. 이 두 벡터는 선형 변환 시 방향은 변하지 않고 크기만 변하는 특별한 축(axis) 역할을 합니다.
- 2. Align to Eigenbasis ( $P^{-1}$  적용): 변환을 쉽게 파악하기 위해, 공간을 '회전'시켜 고유벡터  $p_1,p_2$ 가 표준 좌표축과 나란히 정렬되도록 만듭니다. 이로써 모든 변환이 축 방향으로 일어나도록 단순화됩니다. 이 '정렬' 역할을  $P^{-1}$  행렬이 수행합니다.
- 3. Scaling (D 적용): 정렬된 축을 따라 각 방향으로 고유값( $\lambda_1,\lambda_2$ )만큼 벡터들을 늘리거나 줄입니다. 대각행렬 D는 이처럼 간단한 스케일링 변환을 담당합니다.
- 4. Change Basis Back ( $m{P}$  적용): 크기 조절이 끝난 벡터들을 다시 원래의 고유벡터 방향으로 '역회전'시켜 본래의 좌표계로 되돌려 놓습니다. 이 역할을  $m{P}$  행렬이 수행합니다. 그 결과는 행렬 A를 직접 적용한 변환 결과와 정확히 일치합니다.

결론적으로, 고유값 분해는 복잡한 선형 변환을 가장 다루기 쉬운 방향(고유벡터)이 좌표축과 일치하도록 공간을 정렬하고, 그곳에서 간단한 크기 조절 (scaling)을 한 뒤, 다시 원래의 방향으로 되돌려 놓는 과정으로 해석할 수 있습니다.



### 3. 특이값 분해 (Singular Value Decomposition, SVD)

특이값 분해(SVD)는 임의의 m x n 행렬 A를 세 행렬의 곱으로 분해하는 방법입니다. 고유값 분해가 정방 행렬(square matrix)에만 적용 가능한 것과 달리, SVD는 모든 행렬에 적용할 수 있어 활용도가 매우 높습니다.

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

- A: m x n 크기의 행렬입니다.
- ullet U: m x m 크기의 직교 행렬(orthogonal matrix)입니다. 열벡터는 좌측 특이벡터(left-singular vectors)라고 합니다. ( $UU^T=I$ )
- ullet (\Sigma): m x n 크기의 대각 행렬(diagonal matrix)입니다. 대각 원소는 특이값(singular values)이며, 0이 아닌 값들은 행렬 A의 양의 정부호 (positive definite) 행렬인  $A^TA$ 의 고유값의 제곱근과 같습니다.
- $V^T$ : n x n 크기의 직교 행렬(orthogonal matrix) V의 전치 행렬입니다. V의 열벡터는 우측 특이벡터(right-singular vectors)라고 합니다. ( $VV^T=I$ )

$$A = egin{bmatrix} dots & dots & dots \ u_1 & u_2 & \cdots & u_m \ dots & dots & dots & dots \ \end{matrix} egin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \ dots & dots & \ddots & dots \ 0 & 0 & \cdots & 0 \ dots & dots & dots & dots \ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} egin{bmatrix} \cdots & v_1 & \cdots \ \cdots & v_2 & \cdots \ dots & dots \ dots & dots \ \ddots & dots \ \end{matrix} egin{bmatrix} dots & dots & dots \ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

#### 기하학적 의미: 복잡한 변환을 회전, 크기 조절, 다시 회전으로 분해하기

SVD는 복잡한 행렬 변환 A를 세 단계의 간단한 변환으로 나누어 이해할 수 있게 해줍니다. 벡터 x에 행렬 A를 곱하는 변환 Ax는  $U\Sigma V^Tx$ 와 같으며, 다음과 같은 순서로 해석할 수 있습니다.

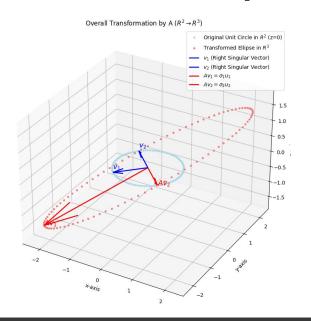
- 1. 좌표계 회전 ( $V^T$  적용): 첫 단계는 벡터 x\$에  $v^T$ 을 곱하는 것입니다. 이 연산은 입력 공간( $x^n$ )의 표준 기저를 우측 특이벡터( $x_i$ )를 축으로 하는 새로운 좌표계로 회전시킵니다.
- 2. 크기 조절 및 차원 변경 (∑ 적용): 다음으로, 변환된 좌표값에 대각 행렬 \$\Sigma\$를 곱합니다. 이 과정에서 각 축의 성분을 해당 특이값 \$\sigma\_i\$만큼 곱해주는 크기 조절(scaling)이 일어나고, 동시에 차원이 m으로 변경됩니다. (예: \$R^n \rightarrow R^m\$)
- 3. 좌표계 회전 ( $m{U}$  적용): 마지막으로, 크기 조절이 완료된 벡터에 \$U\$를 곱합니다. 이 연산은 출력 공간(\$R^m\$)에서 벡터를 좌측 특이벡터(\$u\_i\$)를 축으로 하는 좌표계로 다시 한번 회전시켜 최종 변환 결과를 얻습니다.

3.1. SVD 분해 및 결과 확인

SVD는 모든 행렬에 적용 가능합니다. 여기서는 R² 공간의 벡터를 R³ 공간으로 변환하는 3x2 행렬을 사용해 SVD를 실습하고, 분해된 행렬들을 확인하며 결과를 검증합니다. → 핵렬 A:

```
[28] # 실습에 사용할 3x2 행렬(matrix) 정의
    A = np.array([
    # SVD 수행
    # full_matrices=True로 하면 U는 m x m, Yh는 n x n 정방행렬이 반환됩니다
    U, s, Vh = np.linalg.svd(A, full_matrices=True)
    # Yh의 Y는 Yh.T 로 얻을 수 있음.
    V = Vh.T
    # s는 특이값(singular values)의 1차원 배열이므로, m x n 크기의 대각 행렬 Sigma로 재구성해야 합!
    Sigma = np.zeros(A.shape)
    k = min(A.shape)
    Sigma[:k, :k] = np.diag(s)
    # 분해 검증: A = UΣVT
    A reconstructed = U @ Sigma @ Vh
```

```
→ 행렬 A:
   U 행렬 (좌측 특이벡터):
    [[-0.64 0.71 -0.3
    [-0.64 -0.71 -0.3 ]
    [-0.43 -0. 0.9 ]]
   대각행렬 Σ (특이값):
    [[3.32 0.
   V 전치 행렬 VI (우측 특이벡터의 전치):
    [[-0.71 -0.71]
   재구성된 행렬 UΣVT:
    [[1, 2,]
    [2, 1,]
   A와 UΣVI이 일치하는가? True
```



위 그림은 행렬 변환 A가 2차원 공간을 3차원 공간으로 어떻게 변환하는지 보여줍니다.

- 파란색 점(z=0 평면 위의 단위 원)이 행렬 A에 의해 3차원 공간의 빨간색 점(타원)으로 변환됩니다.
- 입력 공간 $(R^2)$ 의 서로 직교하는 두 우측 특이벡터 $(v_1,v_2)$ 는 변환 후에도 여전히 서로 직교하는 벡터 $(Av_1,Av_2)$ 가 됩니다. 이 벡터들은 출력 공간 $(R^3)$ 에 있는 타원의 장축과 단축을 형성합니다.
- 변환된 벡터  $Av_1,Av_2$ 의 길이는 각각 특이값  $\sigma_1,\sigma_2$  배만큼 조절되며, 방향은 좌측 특이벡터  $u_1,u_2$ 의 방향과 일치합니다.  $(Av_i=\sigma_iu_i)$
- ullet 즉, SVD는 입력 공간의 직교 기저( $oldsymbol{V}$ )를 출력 공간의 직교 기저( $oldsymbol{U}$ )로 매핑하는 변환으로 이해할 수 있습니다.



### 4. 주성분 분석 (Principal Component Analysis, PCA)

주성분 분석(PCA)은 대표적인 차원 축소(Dimensionality Reduction) 기법입니다. 데이터에 내재된 정보 손실을 최소화하면서 고차원 데이터를 저차원 공간으로 선형 변환하는 방법으로, 데이터의 분산(variance)이 가장 큰 방향을 새로운 좌표축, 즉 주성분(Principal Component)으로 설정합니다.

PCA의 수학적 핵심은 데이터의 공분산 행렬(Covariance Matrix)에 대한 고유값 분해(Eigendecomposition)입니다. 각 특징(열)의 평균을 0으로 중심화한 데이터 행렬 X(샘플 수 x 특징 수)가 주어졌을 때, 공분산 행렬 C는 다음과 같이 계산됩니다.

$$C=rac{1}{n-1}X^TX$$
 (단,  $X$ 는 평균이  $0$ 으로 중심화된 데이터)

이 공분산 행렬 C를 고유값 분해하면 다음과 같습니다.

$$C = W\Lambda W^T$$

- W: 공분산 행렬 C의 고유벡터(eigenvector)들을 열(column)으로 갖는 직교 행렬(orthogonal matrix)입니다. 이 고유벡터들이 데이터의 분산이 가장 큰 방향을 나타내는 새로운 축, 즉 주성분(Principal Components)이 됩니다.
- A: C의 고유값(eigenvalue)들을 대각 원소로 갖는 대각 행렬(diagonal matrix)입니다. 각 고유값은 해당 고유벡터(주성분) 방향으로 데이터가 갖는 분산의 크기를 의미하며, 이 값이 클수록 해당 주성분이 더 많은 정보를 설명함을 뜻합니다.

#### 기하학적 의미: 데이터의 새로운 주축 찾기

PCA는 복잡하게 얽혀 있는 데이터를 가장 잘 설명할 수 있는 새로운 좌표계를 찾는 과정으로 해석할 수 있습니다. 주성분은 고유값이 큰 순서대로 정렬되며, 첫 번째 주성분이 데이터의 분산을 가장 많이 설명합니다.

- 1. 첫 번째 주성분(PC1) 탐색: 데이터를 특정 방향(1차원 직선)으로 정사영(projection)했을 때, 그 분산이 가장 커지는 방향을 찾습니다. 이 방향 벡터 가 바로 데이터를 가장 잘 대표하는 첫 번째 주성분(PC1) 축이 됩니다.
- 2. 두 번째 주성분(PC2) 탐색: 첫 번째 주성분(PC1)에 직교(orthogonal)하는 방향들 중에서, 데이터를 정사영했을 때 분산이 가장 커지는 다음 방향을 찾습니다. 이 방향이 두 번째 주성분(PC2)이 됩니다.
- 3. 반복 및 좌표계 생성: 이 과정을 반복하면, 데이터의 원래 차원 수만큼 서로 직교하는 주성분 축들을 얻을 수 있습니다. 이 주성분들은 데이터를 설명 하는 새로운 좌표계의 기저(basis)를 이룹니다.
- 4. 차원 축소: 각 주성분은 해당 축 방향의 분산 크기를 나타내는 고유값을 가집니다. 고유값이 큰 상위 k개의 주성분(데이터의 분산을 많이 설명하는 축)만 선택하고, 원본 데이터를 이 k개의 축으로 이루어진 새로운 공간에 정사영하면, 데이터의 정보 손실을 최소화하며 차원을 효과적으로 축소할 수 있습니다.

4.1. 데이터 생성 및 중심화

두 변수 간에 강한 상관관계를 갖는 2차원 데이터를 생성합니다. PCA는 분산을 기반으로 하므로, 분석에 앞서 각 변수의 평균을 0으로 맞추는 데이터 중심 화(Centering) 전처리를 필수로 수행합니다.

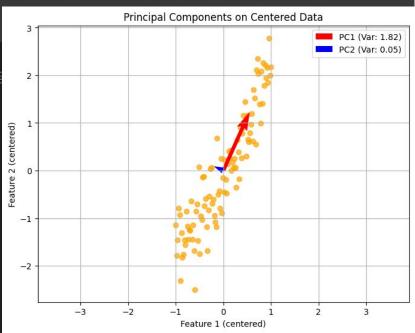
```
[30] # 2D 예제 데이터 생성
     num samples = 100
     x pca 2d = np.linspace(3, 5, num samples)
     y pca 2d = 2 * x pca 2d - 4 + np.random.normal(0, 0.5, num samples)
     data 2d = np.array([x pca 2d, y pca 2d]).T
                                                                             Original 2D Data (Not Centered)
                                                                                                                     Centered Data (Mean = 0)
     # 데이터 전처리: 평균 중심화 (모든 데이터 포인트에서 평균 벡
     mean vec = np.mean(data 2d, axis=0)
     <u>centered_</u>data = data_2d - mean_vec
                                                                                                          -2
```

∨ 4.2. 주성분 계산 (공분산 행렬의 고유값 분해)

중심화된 데이터의 공분산 행렬을 계산하고, 이를 고유값 분해하여 주성분(고유벡터)과 그 중요도(고유값)를 찾습니다. 고유값이 가장 큰 고유벡터가 제1

주성분(PC1)이 됩니다.

```
[31] # 공분산 행렬 계산
    l# np.cov는 (특징 수, 샘플 수) 형태의 입력을 기대하므로, (샘플 수, 특정
    cov_matrix = np.cov(centered_data.T)
    # 공분산 행렬의 고유값 분해
    # 대칭행렬이므로 eigh를 사용하면 더 효율적이고 안정적입니다
    eigenvalues pca, eigenvectors pca = np.linalg.eigh(cov matrix)
    # 고유값이 큰 순서대로 고유값과 고유벡터를 정렬합니다.
    sort_indices = np.argsort(eigenvalues_pca)[::-1]
    eigenvalues_pca = eigenvalues_pca[sort_indices]
    eigenvectors_pca = eigenvectors_pca[:, sort_indices]
    # 제1 주성분(PC1)은 가장 큰 고유값에 해당하는 고유벡터입니다.
    pc1 = eigenvectors_pca[:, 0]
    pc2 = eigenvectors pca[:, 1]
```

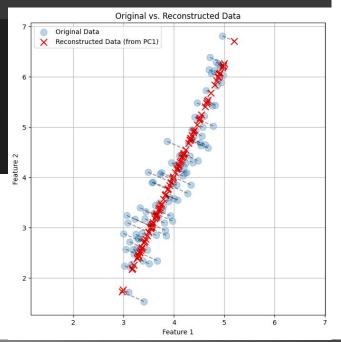


ϒ 4.3. 차원 축소 및 데이터 재구성

2차원 데이터를 PC1 축 하나로 사영(projection)하여 1차원으로 축소하고, 다시 2차원으로 복원해봅니다. 이 과정은 PCA가 정보 손실을 감수하고 데이터 의 가장 중요한 특징으로 원본을 근사하는 과정을 명확히 보여줍니다. 재구성된 데이터는 PC1 직선 위에 위치하게 됩니다.

```
[32] # 차원 축소: 중심화된 데이터를 PC1 벡터에 사영하여 2D -> 1D로 변환 projected_data_1d = centered_data @ pc1

# 데이터 재구성: 1D 데이터를 다시 2D 공간으로 복원
# (사영된 1D 데이터)와 (PC1 벡터)의 외적(outer product)을 이용합니다. reconstructed_centered_data = projected_data_1d[:, np.newaxis] @ pc1[np.newaxis, :] # 원본 데이터 공간으로 이동 (데이터 중심화 시 뺐던 평균을 다시 더해줌) reconstructed_data = reconstructed_centered_data + mean_vec
```

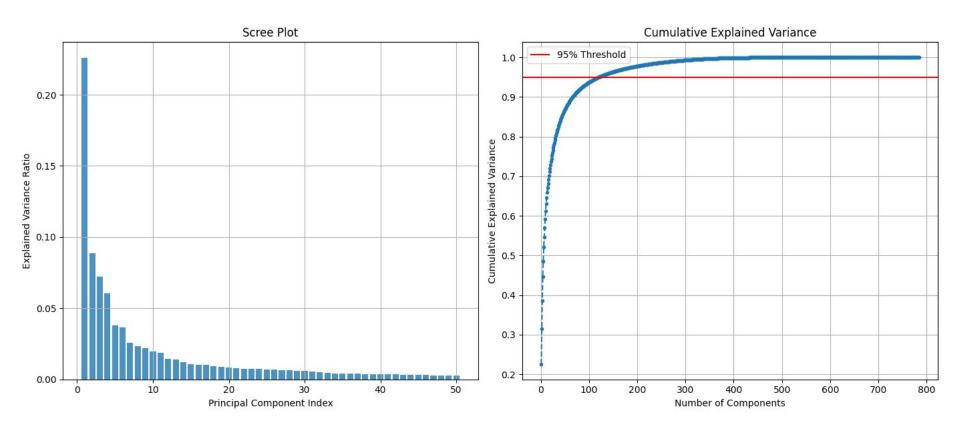


▼ 4.4. MNIST 데이터 준비 및 분산 설명량 확인

784차원의 고차원 MNIST 이미지 데이터에 PCA를 적용합니다. 각 주성분이 전체 데이터 분산의 몇 %를 설명하는지 시각화하여, 몇 개의 주성분이 데이터 의 정보를 효과적으로 압축하는지 확인합니다.

- 스크리 도표(Scree Plot): 각 주성분(고유값)의 상대적 중요도를 시각적으로 보여줍니다.
- 누적 분산 설명량 그래프: k개의 주성분을 사용했을 때, 원본 분산의 몇 %를 보존할 수 있는지 보여줍니다.

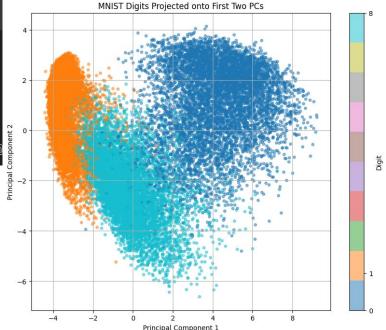
```
[33] # 실습: 분석하고 싶은 숫자들을 리스트에 포함시켜 보세요. 예: [3, 8], [0, 1, 7], |list(range(10))
    selected digits = [0, 1, 8]
    # 선택된 숫자에 해당하는 데이터만 필터링
    if X_mnist_data is not None:
        filter_mask = np.isin(y_mnist_data, selected_digits)
        X_mnist = X_mnist_data[filter_mask]
        _y_mnist = y_mnist_data[filter_mask]
        print(f"선택된 숫자: {selected digits}, 데이터 크기: {X mnist.shape}")
        # 데이터 중심화
        X centered mnist = X mnist - np.mean(X mnist, axis=0)
        # 공분산 행렬 계산 및 고유값 분해
        cov_matrix_mnist = np.cov(X_centered_mnist.T)
        eigenvalues_mnist, eigenvectors_mnist = np.linalg.eigh(cov_matrix_mnist)
        sort indices mnist = np.argsort(eigenvalues mnist)[::-1]
        eigenvalues_mnist = eigenvalues_mnist[sort_indices_mnist]
        eigenvectors mnist = eigenvectors mnist[:, sort indices mnist]
        # 분산 설명량 계산
        explained_variance_ratio = eigenvalues_mnist / np.sum(eigenvalues_mnist)
        cumulative explained variance = np.cumsum(explained variance ratio)
```



#### ϒ 4.5. 저차원 시각화 및 이미지 재구성

784차원의 이미지 데이터를 가장 중요한 두 개의 주성분(PC1, PC2)만 사용하여 2차원으로 축소하고, 그 결과를 산점도로 시각화하여 데이터의 분포를 확인합니다. 또한, 사용하는 주성분의 개수(k)를 늘려가며 원본 이미지를 재구성하여, 적은 수의 주성분만으로도 원본 이미지의 핵심 특징이 복원되는 것을 관찰합니다.

[34] if X\_mnist\_data is not None:
# 2차원으로 사영 및 시각화
# 가장 중요한 두 주성분(PC1, PC2)을 선택합니다.
pc1\_mnist = eigenvectors\_mnist[:, 0]
pc2\_mnist = eigenvectors\_mnist[:, 1]
# 중심화된 데이터를 PC1, PC2에 사영합니다.
projected\_mnist = np.c\_[X\_centered\_mnist @ pc1\_mnist, X\_centered\_mnist @



```
# 각 숫자 클래스에서 첫 번째 샘플을 선택합니다.
sample_indices = [np.where(y_mnist == digit)[0][0] for digit in selected_digits if np.any(y_mnist == digit)]
# 실습: 이미지를 재구성할 때 사용할 주성분 개수(k)를 바꿔보세요.
k_values = [1, 10, 50, n_components_95, 300, 784]
num k = len(k values)
num samples to show = len(sample indices)
fig, axes = plt.subplots(num_samples_to_show, num_k + 1, figsize=(num_k * 2.2, num_samples_to_show * 2.2))
if num_samples_to_show == 1: axes = axes.reshape(1, -1)
mean_image = np.mean(X_mnist, axis=0)
```

