행렬

- 행렬(matrix): 백터를 원소로 가지는 2차원 배열

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

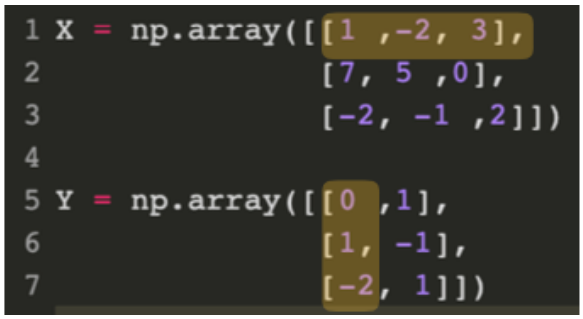
```
X = np.array([[1,-2,3], [7,5,0], [-2,-1,-2]])
# 행렬: 행백터 n차원 -
```

- 특정 행(열) 고정하면 행(열)백터라고 부름
- 전치행렬(transpose matrix): 행과 열의 인덱스가 바뀐 행렬 // 행백터 => 열백터 / 열백터 => 행백터
- 행렬은 여러 점들로 나타남
- 행렬의 행백터 x_i는 i번째 데이터를 의미
- 백터를 원소로 가지는 2차원 배열
- 같은 모양을 가지면 덧셈, 뺄셈 계산 가능 // 성분곱/스칼라곱도 벡터와 같다
- 행렬 곱셈(matrix multiplication)

  i번째 행벡터와 j번째 열벡터 사이의 내적을 성분으로 가지는 행렬 계산

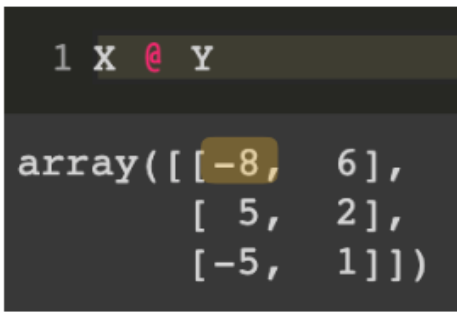
  행렬곱은 각각 열의 개수와 행의 개수가 같아야 함

  `numpy` 에서는 `@` 연산을 사용한다.



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

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



```
X @ Y

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

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

- **행렬 내적**

  넘파이의 `np.inner` 는 i번째 행벡터와 j번째 행벡터 사이의 내적을 성분으로 가지는 행렬 계산

  수학에서의 내적과 다름

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

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

```python
np.inner(X, Y)
```

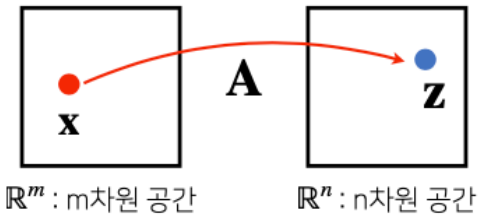
```
array([[-5,  3],
       [ 5,  2],
       [-3, -1]])
```

$$\mathbf{XY}^{\top} = \left(\sum_{k} x_{ik} y_{jk} \right)$$

- 행렬: 벡터공간에서 사용되는 연산자(operator)로 이해
- 행렬곱을 통해 벡터를 다른 차원의 공간 보낼 수 있다.
- 패턴을 추출하고 데이터를 압축할 수도 있다.
- 모든 선형변환(linear transform)은 행렬곱으로 계산할 수 있다.

$$z_i = \sum_j a_{ij} x_j$$

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



- **역행렬**

  어떤 행렬 A의 연산을 거꾸로 되돌리는 행렬

  A^{-1}이라고 표기 / `np.linalg.inv()` 이용

  가우스 소거법(Fauss Elimination) / 가우스-조던 소거법(Fauss-Jordan Elimination) 이용해서 구함

  행과 열 숫자가 같고 행렬식(determinant)이 0이 아닌 경우에만 계산

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}, det(A) = ad - bc$$

$$A = \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix}, det(A) = a \cdot det \begin{pmatrix} e & f \\ h & i \end{pmatrix} - b \cdot det \begin{pmatrix} d & f \\ g & i \end{pmatrix} + c \cdot det \begin{pmatrix} d & e \\ g & h \end{pmatrix}$$

역행렬 공식

이차정사각형렬 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ 에 대하여

ad - bc ≠ 0이면 $A^{-1} = \frac{1}{ad - bc}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$

ad - bc = 0이면 행렬 A의 역행렬은 없다.

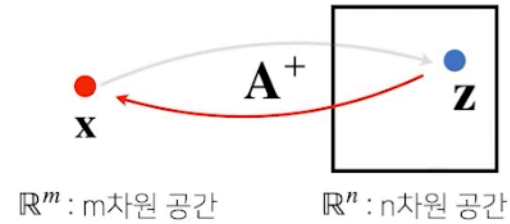
- 항등행렬: 주대각선의 원소가 모두 1이며 나머지 원소는 모두 0인 정사각 행렬

- 역행렬을 계산할 수 없다면 **유사역행렬(pseudo-inverse)** 또는 **무어-펜로즈(Moore-Penrose) 역행렬** A^+ 이용

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

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

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



- **n > m**

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

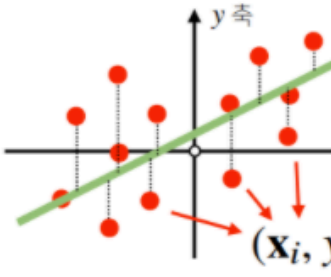
$n \leq m$ 인 경우: 식이 변수 개수보다 작거나 같아야 함

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

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

- **n < m**

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



$n \geq m$ 인 경우: 데이터가 변수 개수보다 많거나 같아야 함

$$\begin{bmatrix} — \mathbf{x}_1 — \\ — \mathbf{x}_2 — \\ \vdots \\ — \mathbf{x}_n — \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{X}\beta = \hat{\mathbf{y}} \approx \mathbf{y}$$

$$\min_\beta \|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|_2$$

L_2-노름을 최소화

$$\Rightarrow \beta = \mathbf{X}^+\mathbf{y} = (\mathbf{X}^\top\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^\top\mathbf{y}$$

Moore-Penrose 역행렬을 이용하면 $\mathbf{y}$ 에 근접하는 $\hat{\mathbf{y}}$ 를 찾을 수 있다

×

`sklearn.linearmodel.LinearRegression` 과 같은 결과 가져옴

`sklearn` 에서는 y절편항을 직접 추가해야 함.

```python
# Scikit Learn을 활용한 회귀분석
from skelearn.linear_model import LinearRegression
model = LinearRegression()
model.fit(X, y)
y_test = model.predict(x_test)

# Moore-Penrose 역행렬
X_ = np.array(np.append(x,  [1]) for x in X) # intercept 항 직접 추가 필요
beta = np.linalg.pinv(X_) @ y
y_test = np.append(x, [1]) @ beta
```