PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 선형 예측모형

입력 데이터 벡터와 가중치 벡터의 내적으로 계산된 예측값이 실제 출력 데이터와 유사한 값을 출력하도록 하는 모형

⇒ 올바른 가중치 벡터를 구하기 위해서 연립방정식과 역행렬을 이용하여 선형 예측모형의 가중치 벡터를 구한다.

• 선형 연립방정식

복수의 미지수를 포함하는 복수의 선형 방정식을 선형 연립방정식 또는 연립일차방정식이라고 한다.

다음은 3개의 미지수와 3개의 선형 방정식을 가지는 선형 연립방정식의 한 예다.

$$x_1 + x_2 = 2$$

 $x_2 + x_3 = 2$
 $x_1 + x_2 + x_3 = 3$ (2.4.1)

 x_1, x_2, \dots, x_M 이라는 M 개의 미지수를 가지는 N개의 선형 연립방정식은 일반적으로 다음과 같은 형태가 된다. 이 식에서 a와 b는 방정식의 계수다.

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

행렬과 벡터의 곱셈을 이용하면 위 선형 연립방정식은 다음처럼 간단하게 쓸 수 있다.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1M} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix}$$
(2.4.3)

이 식에서

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1M} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NM} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_M \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix}$$
(2.4.4)

라고 하면 다음처럼 쓸 수 있다.

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

$$Ax = b \tag{2.4.5}$$

A, x, b 는 각각 계수행렬(coefficient matrix), 미지수벡터(unknown vector), 상수벡터 (constant vector)라고 부른다.

이 표현을 따르면 앞에서 예로 든 선형 연립방정식은 다음처럼 표현할 수 있다.

$$Ax = b \tag{2.4.6}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$
 (2.4.7)

만약 A, x, b가 행렬이 아닌 스칼라 실수라면 이 방정식은 나눗셈을 사용하여 다음처럼 쉽게 풀수도 있을 것이다.

$$x = \frac{b}{A} \tag{2.4.8}$$

그러나 행렬에서는 나눗셈이 정의되지 않으므로 이 방법은 사용할 수 없다. 행렬에서는 나눗셈 대신 역행렬이라는 것을 사용한다.

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

역행렬

정방 행렬 A에 대한 역행렬(inverse matrix) A^{-1} 은 원래의 행렬 A와 다음 관계를 만족하는 정방 행렬을 말한다. I는 항등 행렬(identity matrix)이다.

$$A^{-1}A = AA^{-1} = I (2.4.9)$$

역행렬은 항상 존재하는 것이 아니라 **행렬 A에 따라서는 존재하지 않을 수도 있다**. 역행렬이 존재하는 행렬을 **가역행렬(invertible matrix)**, 정칙행렬(regular matrix) 또는 비특이행렬 (non-singular matrix)이라고 한다. 반대로 역행렬이 존재하지 않는 행렬을 비가역행렬(non-invertible matrix) 또는 **특이행렬(singular matrix)**, 퇴화행렬(degenerate matrix)이라고 한다.

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 역행렬의 성질

역행렬은 다음 성질을 만족한다. 이 식에서 행렬 A, B, C는 모두 각각 역행렬 A^{-1}, B^{-1}, C^{-1} 이 존재한다고 가정한다.

 전치 행렬의 역행렬은 역행렬의 전치 행렬과 같다. 따라서 대칭 행렬의 역행렬도 대칭 행렬이다.

$$(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T (2.4.11)$$

• 두 개 이상의 정방 행렬의 곱은 같은 크기의 정방 행렬이 되는데 이러한 행렬의 곱의 역행렬은 다음 성질이 성립한다.

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} (2.4.12)$$

$$(ABC)^{-1} = C^{-1}B^{-1}A^{-1} (2.4.13)$$

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 역행렬의 성질

역행렬의 계산

역행렬은 행렬식을 이용하여 다음처럼 계산할 수 있다. 증명은 생략한다.

$$A^{-1} = \frac{1}{\det(A)}C^{T} = \frac{1}{\det(A)} \begin{bmatrix} C_{1,1} & \cdots & C_{N,1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{1,N} & \cdots & C_{N,N} \end{bmatrix}$$
(2.4.14)

이 식에서 $C_{i,j}$ 는 A의 i,j번째 원소에 대해 정의한 코팩터(cofactor)다.

코팩터로 이루어진 행렬 C을 **여인수행렬**(matrix of cofactors, 또는 cofactor matrix, comatrix)이라고 한다. 또 여인수행렬의 전치행렬 C^T 를 **어드조인트행렬**(adjoint matrix, adjugate matrix, 수반행렬)이라고 하며 $\operatorname{adj}(A)$ 로 표기하기도 한다.

위 식에서 $\det(A) = 0$ 이면 역수가 존재하지 않으므로 **역행렬은 행렬식이 0이 아닌 경우에만 존재한다**는 것을 알 수 있다.

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

역행렬에 대한 정리

역행렬에 대한 몇 가지 정리를 알아두면 도움이 된다.

셔먼-모리슨(Sherman-Morrison) 공식

정방행렬 A와 벡터 u,v에 대해 다음 공식이 성립한다.

$$(A + uv^{T})^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^{T}A^{-1}}{1 + v^{T}A^{-1}u}$$
 (2.4.21)

우드베리(Woodbury) 공식

정방행렬 A와 이에 대응하는 적절한 크기의 행렬 U, V, C에 대해 다음 공식이 성립한다.

$$(A + UCV)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(C^{-1} + VA^{-1}U)^{-1}VA^{-1}$$
 (2.4.22)

분할행렬의 역행렬

4개 블록(block)으로 분할된 행렬(partitioned matrix)의 역행렬은 각 분할행렬을 이용하여 계산할 수 있다.

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A_{11}^{-1}(I + A_{12}FA_{11}^{-1}) & -A_{11}^{-1}A_{12}F \\ -FA_{21}A_{11}^{-1} & F \end{bmatrix}$$
(2.4.23)

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 넘파이를 사용한 역행렬 계산

념파이의 linalg 서브패키지에는 역행렬을 구하는 inv() 라는 명령어가 존재한다. 앞에서 예로 든 선형 연립방정식의 행렬 A의 역행렬은 다음처럼 구할 수 있다.

```
In [1]:
```

In [2]:

```
Ainv = np.linalg.inv(A)
Ainv
```

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 역행렬과 선형 연립방정식의 해

선형 연립방정식에서 미지수의 수와 방정식의 수가 같다면 계수행렬 A는 정방행렬이 된다. 만약 행렬 A의 역행렬 A^{-1} 이 존재한다면 역행렬의 정의로부터 선형 연립방정식의 해는 다음처럼 구할 수 있다. 행렬과 벡터의 순서에 주의하라.

$$Ax = b \tag{2.4.26}$$

$$A^{-1}Ax = A^{-1}b (2.4.27)$$

$$Ix = A^{-1}b (2.4.28)$$

$$x = A^{-1}b (2.4.29)$$

수학에서 **square matrix (정방행렬)**은 행렬인데, 같은 수의 행과 열을 가지는 행렬을 의미한다. 아래의 예는 4x4의 정방행렬에 속한다고 볼 수 있다.

$$\begin{bmatrix} 9 & 13 & 5 & 2 \\ 1 & 11 & 7 & 6 \\ 3 & 7 & 4 & 1 \\ 6 & 0 & 7 & 10 \end{bmatrix}$$

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• lstsq() 명령은 행렬 A와 b를 모두 인수로 받고 뒤에서 설명할 최소자승문제(least square problem)의 답 x, 잔차제곱합(residual sum of squares) resid, 랭크(rank) rank, 특잇값 (singular value) s를 반환한다. 미지수와 방정식의 개수가 같고 행렬 A의 역행렬이 존재하면 최소자승문제의 답과 선형 연립방정식의 답이 같으므로 lstsq() 명령으로 선형 연립방정식을 풀수도 있다. 최소자승문제, 랭크, 특잇값에 대해서는 뒤에서 자세히 설명할 것이다.

다음 코드에서 lstsq() 명령으로 구한 답이 inv() 명령으로 구한 답과 같음을 알 수 있다.

```
In [6]:
```

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 역행렬의 성질

```
In [11]:
  A @ x
 array([[1.98333333],
      [2. ],
       [3.03333333],
       [4.08333333]])
lstsq() 명령으로 바로 구해도 같은 값이 나온다.
In [12]:
  x, resid, rank, s = np.linalg.lstsq(A, b)
 array([[1.03333333],
       [0.95
                ]])
       [1.05
위 코드에서 resid 는 잔차벡터의 e = Ax - b의 제곱합, 즉 놈의 제곱이다.
In [13]:
  resid, np.linalg.norm(A @ x - b) ** 2
 (array([0.00166667]), 0.00166666666666655)
```

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

선형 연립방정식과 선형 예측모형

선형 예측모형의 가중치벡터를 구하는 문제는 선형 연립방정식을 푸는 것과 같다. 예를 들어 N개의 입력차원을 가지는 특징벡터 N개를 입력 데이터로 이용하고 이 입력에 대응하는 목푯값벡터를 출력하는 선형 예측모형을 생각하자.

$$x_{11}w_1 + x_{12}w_2 + \cdots + x_{1N}w_N = y_1$$
 $x_{21}w_1 + x_{22}w_2 + \cdots + x_{2N}w_N = y_2$
 $\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$
 $x_{N1}w_1 + x_{N2}w_2 + \cdots + x_{NN}w_N = y_N$
 $(2.4.30)$

즉,

$$Xw = y \tag{2.4.31}$$

이 예측 모형의 가중치벡터 w를 찾는 것은 계수행렬이 X, 미지수벡터가 w, 상수벡터가 y인 선형 연립방정식의 답을 찾는 것과 같다. 그리고 만약 계수행렬, 여기에서는 특징행렬 X의 역행렬 X^{-1} 이 존재하면 다음처럼 가중치벡터를 구할 수 있다.

$$w = X^{-1}y (2.4.32)$$

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 이때는 x_2 가 어떤 값이 되더라도 $x_1 = x_3 = 2 - x_2$ 만 만족하면 되므로 무한히 많은 해가 존재한다. 예들 들어 다음 x 벡터는 모두 위 선형 연립방정식의 해다.

$$x = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \cdots$$
 (2.4.34)

3번의 경우, 즉 방정식의 수가 미지수의 수보다 많을 때는 2번과 반대로 모든 조건을 만족하는 해가 하나도 존재할 수 없을 수 있다. 예를 들어 다음 선형 연립방정식을 생각해보자. 미지수는 3개지만 방정식은 4개다.

$$x_1 + x_2 = 2$$
 $x_2 + x_3 = 2$
 $x_1 + x_2 + x_3 = 3$
 $x_1 + x_2 + 2x_3 = 5$
 $(2.4.35)$

위의 3개 방정식을 동시에 만족하는 해는 $x_1=x_2=x_3=1$ 인데 이 값은 4번째 방정식을 만족하지 못한다.

$$x_1 + x_2 + 2x_3 = 4 (2.4.36)$$

따라서 4개의 방정식을 모두 만족하는 해는 존재하지 않는다.

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 이때는 x_2 가 어떤 값이 되더라도 $x_1 = x_3 = 2 - x_2$ 만 만족하면 되므로 무한히 많은 해가 존재한다. 예들 들어 다음 x 벡터는 모두 위 선형 연립방정식의 해다.

$$x = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \dots \tag{2.4.34}$$

선형 예측모형을 구하는 문제는 계수행렬이 특징행렬 XX, 미지수벡터가 가중치벡터 ww인 선형 연립방정식 문제이다. 그런데 보통 데이터의 수는 입력차원보다 큰 경우가 많다.

예를 들어 면적, 층수, 한강이 보이는지의 여부로 집값을 결정하는 모형을 만들기 위해서 딱 3가구의 아파트 가격만 조사하는 경우는 없을 것이다. 보통은 10 가구 혹은 100 가구의 아파트 가격을 수집하여 이용하는 것이 일반적이다. 다시 말해 선형 예측모형을 구할 때는 3번과 같은 경우가 많다는 것을 알 수 있다.

이때는 선형 연립방정식의 해가 존재하지 않으므로 선형 연립방정식을 푸는 방식으로는 선형 예측모형의 가중치벡터를 구할 수 없다.

위의 3개 방정식을 동시에 만족하는 해는 $x_1=x_2=x_3=1$ 인데 이 값은 4번째 방정식을 만족하지 못한다.

$$x_1 + x_2 + 2x_3 = 4 (2.4.36)$$

따라서 4개의 방정식을 모두 만족하는 해는 존재하지 않는다.

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 최소자승문제

이렇게 선형 연립방정식의 해가 존재하지 않는다면 선형 예측모형은 어떻게 구할까? 모형을 구하는 것을 포기해야 하는가? 그럴 필요는 없다. 이 문제에 대한 힌트를 얻기 위해 다음과 같은 선형 연립방정식을 생각해보자.

$$x_1 + x_2 = 2$$
 $x_2 + x_3 = 2$
 $x_1 + x_2 + x_3 = 3$
 $x_1 + x_2 + 2x_3 = 4.1$
 $(2.4.37)$

위에서 보았듯이 이 선형 연립방정식의 해는 존재하지 않는다.

하지만 꼭 양변이 **정확하게 똑같지 않아도 된다면** 어떨까? $x_1=x_2=x_3=1$ 를 위 방정식에 대입하면 결과는 다음과 같다.

$$x_1 + x_2 = 2$$
 $x_2 + x_3 = 2$
 $x_1 + x_2 + x_3 = 3$
 $x_1 + x_2 + 2x_3 = 4 \approx 4.1$
 $(2.4.38)$

선형 예측모형에서 좌변을 예측값, 우변을 목푯값이라고 생각한다면 100% 정확히 예측하지는 못했지만 상당히 비슷하게 예측한 값이라고 할 수 있다.

따라서 미지수의 개수보다 방정식의 개수가 많아서 선형 연립방정식으로 풀수 없는 문제는 <mark>좌변과 우변의 차이를 최소화하는 문제로 바꾸어 풀 수 있다.</mark> 앞서 예측값과 목푯값의 차이를 <mark>잔차 (residual)라고 한다고 했다.</mark>

$$e = Ax - b \tag{2.4.39}$$

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 잔차는 벡터이므로 최소자승문제에서는 벡터의 크기 중에서 **벡터의 놈(norm)을 최소화**하는 문제를 푼다. 앞 절에서 놈을 최소화하는 것은 놈의 제곱을 최소화하는 것과 같다고 했다. 여기에서는 잔차제곱합이 놈의 제곱이 된다.

$$e^{T}e = ||e||^{2} = (Ax - b)^{T}(Ax - b)$$
 (2.4.40)

이 값을 최소화하는 x값은 수식으로 다음처럼 표현한다.

$$x = \arg\min_{x} e^{T} e = \arg\min_{x} (Ax - b)^{T} (Ax - b)$$
 (2.4.41)

위 식에서 $\arg\min_x f(x)$ 는 함수 f(x)를 가장 작게 만드는 x값을 의미한다. 이러한 문제를 **최소자승문제**(least square problem)라고 한다.

 A^TA 가 항상 정방 행렬이 된다는 점을 이용하여 다음과 같이 최소 자승 문제의 답이 어떤 형태가 되는지 살펴보자. 여기에서는 답의 형태만 살펴보고 엄밀한 증명은 하지 않을 것이다.

$$Ax \approx b \tag{2.4.42}$$

이 식의 양변에 A^T 를 곱하면 각각 A^TAx 와 A^Tb 가 된다. 이 두 개의 벡터의 값이 같다고 일단 가정하자.

$$A^T A x = A^T b (2.4.43)$$

만약 정방 행렬 A^TA 의 역행렬 $(A^TA)^{-1}$ 이 존재한다면

$$(A^T A)^{-1} (A^T A) x = (A^T A)^{-1} A^T b (2.4.44)$$

이 식을 정리하면 다음과 같다.

$$x = ((A^T A)^{-1} A^T)b (2.4.45)$$

• 유사역행렬(의사역행렬)

여기에서 행렬 $(A^TA)^{-1}A^T$ 를 행렬 A의 **의사역행렬(pseudo inverse)**이라고 하며 다음처럼 A^+ 로 표기한다.

$$A^{+} = (A^{T}A)^{-1}A^{T} (2.4.46)$$

$$x = A^+b \tag{2.4.47}$$

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 유사역행렬(의사역행렬)

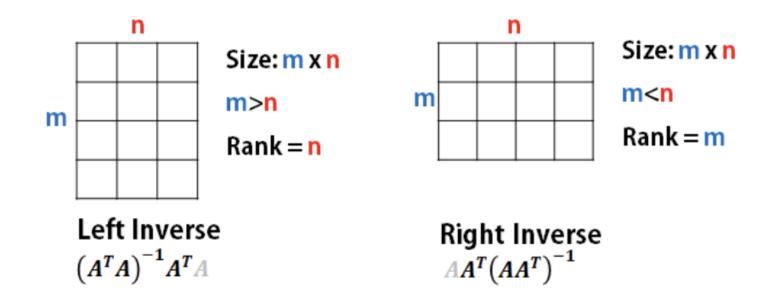
여기에서 행렬 $(A^TA)^{-1}A^T$ 를 행렬 A의 **의사역행렬(pseudo** inverse)이라고 하며 다음처럼 A^+ 로 표기한다.

$$A^{+} = (A^{T}A)^{-1}A^{T} (2.4.46)$$

 $x = A^+ b \tag{2.4.47}$

직사각형의 matrix에 자신의 transpose를 곱해서(A*A' or A' * A) 정사각형 matrix로 만든 다음 역행렬을 구하고 다시 transpose matrix를 곱해 원래의 직사각형 행렬로 돌 아오면 됩니다.

세로가 긴 행렬과 가로가 긴 행렬을 처리하는 방법이 조금 다릅니다.



PART. 선형 연립방정식과 역행렬

행의 길이가 긴 경우는 Left Inverse와 같이 처리하면 됩니다. 열의 길이가 긴 경우는 오른쪽과 같이 Right Inverse처럼 처리하면 됩니다.

Left Inverse와 Right Inverse로 구분하여 처리해야 하는 이유는 **Rank** 때문입니다. matrix A의 크기는 m * n 입니다. A'의 크기는 n * m 입니다. 그리고 크기가 n * n인 square matrix의 역행렬의 크기는 역시 n * n 입니다.

Left Inverse의 경우 (A' * A)^-1 * A'*A의 Rank를 구해보면 다음과 같습니다. (n *m)(m * n)(n * m)(m * n) => n * n이 됩니다. 따라서 rank는 n이 나옵니다.

Right Inverse의 경우 (m*n)(n*m)(m*n)(n*m) => m*m으로 rank가 m이 나옵니다. 만약 Left와 Right의 구분을 하기 싫다면 SVD(Singular Value Decomposition)을 이 용하면 됩니다.

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 특이값 분해(singular value decomposition: SVD)

정방행렬은 고유분해로 고윳값과 고유벡터를 찾을 수 있었다. 정방행렬이 아닌 행렬은 고유분해가 불가능하다. 하지만 대신 고유분해와 비슷한 특이분해를 할 수 있다.

• 특이값과 특이벡터

N×M크기의 행렬 A를 다음과 같은 3개의 행렬의 곱으로 나타내는 것을 특이분해(singular-decomposition) 또는 특잇값 분해(singular value decomposition)라고 한다.

$$A = U\Sigma V^T \tag{3.4.1}$$

PART. 선형 연립방정식과 역행렬

• 특이값 분해(singular value decomposition: SVD)

여기에서 U, Σ, V 는 다음 조건을 만족해야 한다.

• 대각성분이 양수인 대각행렬이어야 한다. 큰 수부터 작은 수 순서로 배열한다.

$$\Sigma \in \mathbf{R}^{N \times M} \tag{3.4.2}$$

ullet U는 N차원 정방행렬로 모든 열벡터가 단위벡터이고 서로 직교해야 한다.

$$U \in \mathbf{R}^{N \times N} \tag{3.4.3}$$

• V는 M차원 정방행렬로 모든 열벡터가 단위벡터이고 서로 직교해야 한다.

$$V \in \mathbf{R}^{M \times M} \tag{3.4.4}$$

위 조건을 만족하는 행렬 Σ 의 대각성분들을 **특잇값(singular value)**, 행렬 U의 열벡터들을 **왼쪽 특이벡터**(left singular vector), 행렬 V의 행벡터들을 **오른쪽 특이벡터**(right singular vector) 라고 부른다.

직교행렬의 역행렬은 직교행렬 자신의 전치행렬(transpose matrix)와 같다