2장 다변량 분석을 위한 기초 행렬 대수

덕성여자대학교 정보통계학과 김 재희

덕성여자대학교
DUKSUNG WOMEN'S UNIVERSITY

2. 기초 행렬 대수

2.1 정의

■**행렬**(matrix): 숫자 또는 변수를 직사각형 또는 정사각형 모양으로 정렬한 배열

- 성분(entries): 그 행렬의 배열된 수

$$\boldsymbol{A}_{n\times p}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{np} \end{pmatrix} = (a_{ij}) .$$

- 열벡터(column vector):

$$\boldsymbol{a}=\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix}$$

- 행벡터(row vector):

$$\boldsymbol{a}'=(a_1, a_2, \dots, a_p)$$

■ **대각행렬**(diagonal matrix): 은 대각선이 아닌 곳에서는 0 을 성분으로 갖는 정방행렬

$$\boldsymbol{D}_{p\times p}=\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{pp} \end{pmatrix}=diag(a_{11},a_{22},\dots,a_{pp})$$

■ 항등행렬(identity matrix):
$$\boldsymbol{I}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

■ **전치행렬**(transpose matrix) $\boldsymbol{A}'$ 또는 $\boldsymbol{A}^t$: $\boldsymbol{A}$가 임의의 $n\times p$ 행렬일 때 $\boldsymbol{A}$의 행과 열을 교환하여 얻어진 $p\times n$ 행렬

≪예제 2.1≫ 2×3 행렬 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}3 & -1 & 2\\ 1 & 5 & 4\end{pmatrix}$의 전치행렬을 구해보자.

행과 열이 교환되므로 $\boldsymbol{A}'=\begin{pmatrix}3 & 1\\ -1 & 5\\ 2 & 4\end{pmatrix}$로 구할 수 있다.

● R에서는 t() 함수를 이용하여 전치행렬을 구할 수 있다.

```
> A=matrix(c(3,1,  -1, 5,   2,4), nc=3)
> A
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    3   -1    2
[2,]    1    5    4
> tA=t(A)
> tA
     [,1] [,2]
[1,]    3    1
[2,]   -1    5
[3,]    2    4
```

2.2 행렬의 연산

$\boldsymbol{x}$ 와 $\boldsymbol{y}$ 는 다음과 같은 $p \times 1$ 벡터일 때

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_p \end{pmatrix}$$

■ 상수와 벡터의 곱:

$$c\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} cx_1 \\ cx_2 \\ \vdots \\ cx_p \end{pmatrix} \quad ,$$

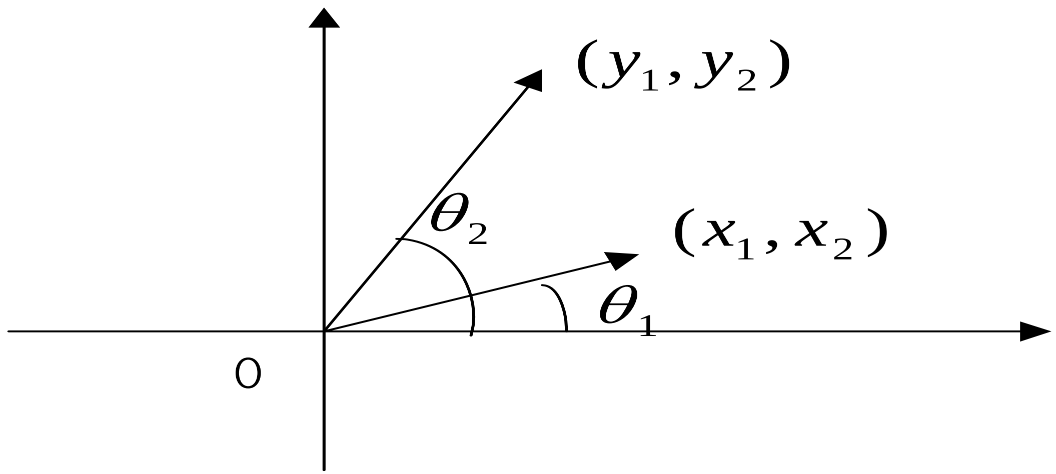
■ 두 벡터의 합

$$\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 + y_1 \\ x_2 + y_2 \\ \vdots \\ x_p + y_p \end{pmatrix}$$

■ 벡터 $\boldsymbol{x}$ 의 길이 또는 원점으로부터의 거리:

$$L_{x} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_p^2} = \sqrt{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}}$$

■ 단위벡터(unit vector): 길이가 1 인 벡터 : $e = L_{x}^{-1}\boldsymbol{x}$



[그림 2.1] 2차원 벡터와 각도

■ 상수 c와 행렬 $\boldsymbol{A}$와의 곱(product):

$$c\boldsymbol{A}_{n\times p}=\begin{pmatrix} ca_{11} & ca_{12} & \cdots & ca_{1p} \\ ca_{21} & ca_{22} & \cdots & ca_{2p} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ ca_{n1} & ca_{n2} & \cdots & ca_{np} \end{pmatrix}$$

■ 행렬의 합

$$\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}=(a_{ij})+(b_{ij})=(a_{ij}+b_{ij})$$
$$=\begin{pmatrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} & \cdots & a_{1p}+b_{1p} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1}+b_{n1} & a_{n2}+b_{n2} & \cdots & a_{np}+b_{np} \end{pmatrix}$$

■ 행렬의 곱

$$\boldsymbol{AB}_{n\times p}=\boldsymbol{A}_{n\times k}\boldsymbol{B}_{k\times p}$$

$$=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nk} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ b_{k1} & b_{k2} & \cdots & b_{kp} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sum_{t=1}^{k}a_{1t}b_{t1} & \cdots & \sum_{t=1}^{k}a_{1t}b_{tp} \\ \vdots & \sum_{t=1}^{k}ab_{tj} & \vdots \\ \sum_{t=1}^{k}a_{nt}b_{t1} & \cdots & \sum_{t=1}^{k}a_{nt}b_{tp} \end{pmatrix}$$

≪예제 2.2≫ 두 벡터 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix}$$

에 대해 몇 가지 연산을 해보고자 한다.

(a) $\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 7 \end{pmatrix}$ (b) $\boldsymbol{a}'\boldsymbol{b} = 10$ (c) $3\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} 3 \\ -6 \\ 9 \end{pmatrix}$

(d) 벡터 $\boldsymbol{a}$의 길이는 $L_a = \sqrt{\boldsymbol{a}'\boldsymbol{a}} = \sqrt{1^2 + (-2)^2 + 3^2} = \sqrt{14} = 3.74$

(e) 벡터 $\boldsymbol{b}$의 길이는 $L_b = \sqrt{\boldsymbol{b}'\boldsymbol{b}} = \sqrt{2^2 + 2^2 + 4^2} = \sqrt{24} = 4.90$

(f) 두 벡터 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$의 사이각(angle)에 대해

$$\cos\theta = \frac{\boldsymbol{a}'\boldsymbol{b}}{L_a L_b} = \frac{1 \cdot 2 + (-2)2 + 3 \cdot 4}{\sqrt{14}\,\sqrt{24}} = \frac{10}{18.33} = 0.546$$

이므로 $\theta = \cos^{-1}(0.546) = 56.91\ {}^\circ$이다.

● R에서 벡터 연산 (참고: **%*%** 연산자 사용)

```
> a= c(1, -2, 3)
> b= c(2,2,4)
> a+b
[1] 3 0 7
> t(a)*b
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    2   -4   12
> a= c(1, -2, 3)
> b= c(2,2,4)
> a+b
[1] 3 0 7

> t(a)%*%b
     [,1]
[1,]   10
```

```
> 3*a
[1]  3 -6  9
> la=sqrt( t(a)%*%a )
> la
         [,1]
[1,] 3.741657
> lb=sqrt( t(b)%*%b )
> lb
         [,1]
[1,] 4.898979
> cos_theta= t(a)%*%b/(la*lb)
> cos_theta
          [,1]
[1,] 0.5455447
```

■ $\boldsymbol{S}$: $p \times p$ 대칭행렬(symmetric matrix), $\boldsymbol{a}$: $p \times 1$ 벡터일 때

이차형식(quadratic form) :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a}'\boldsymbol{S}\boldsymbol{a} &= (a_1, \cdots, a_p)\begin{pmatrix} s_{11} & \cdots & s_{1p} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ s_{p1} & \cdots & s_{pp} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix} \\ &= \sum_i a_i{}^2 s_{ii} + \sum_{i \neq j} a_i a_j s_{ij} \end{aligned}$$

≪예제 2.3≫ $\boldsymbol{a}$는 2×1 벡터일 때 대칭행렬 $\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$의 이차형식을 구해보자.

$$\boldsymbol{a}'\boldsymbol{S}\boldsymbol{a} = (a_1\ a_2)\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 3a_1^2 + 3a_2^2 + 2a_1a_2$$

≪예제 2.4≫ 2×3 행렬 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & 4 \end{pmatrix}$ 와 $\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -1 & 3 & 5 \end{pmatrix}$ 일 때

(a) $\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & 4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -1 & 3 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 5 \\ 0 & 8 & 9 \end{pmatrix}$

(b) $\boldsymbol{B}' = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 3 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}$

(c) $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}' = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 3 \\ 3 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 & 4 \\ 23 & 34 \end{pmatrix}$

● R에서 두 행렬의 곱 (참고: %*% 연산자 사용)

```
> A=matrix(c(3,1,  -1, 5,   2,4), nc=3)
> B=matrix(c(1,-1,  2, 3,   3,5), nc=3)
> A+B
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    4    1    5
[2,]    0    8    9
```

```
> t(B)
     [,1] [,2]
[1,]    1   -1
[2,]    2    3
[3,]    3    5
> A%*%t(B)
     [,1] [,2]
[1,]    7    4
[2,]   23   34
```

2.3 분할 행렬

■ 행렬$\boldsymbol{A}$와 $\boldsymbol{B}$는 **부분행렬**(submatrix)로 다음과 같이 분할(partition)하여 표기할 수 있다.

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22} \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{B}_{11} & \boldsymbol{B}_{12} \\ \boldsymbol{B}_{21} & \boldsymbol{B}_{22} \end{pmatrix}$$

■ 두 분할된 행렬(partitioned matrix)의 곱은

$$\begin{aligned} \boldsymbol{AB} &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{B}_{11} & \boldsymbol{B}_{12} \\ \boldsymbol{B}_{21} & \boldsymbol{B}_{22} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_{11}\boldsymbol{B}_{11} + \boldsymbol{A}_{12}\boldsymbol{B}_{21} & \boldsymbol{A}_{11}\boldsymbol{B}_{12} + \boldsymbol{A}_{12}\boldsymbol{B}_{22} \\ \boldsymbol{A}_{21}\boldsymbol{B}_{11} + \boldsymbol{A}_{22}\boldsymbol{B}_{21} & \boldsymbol{A}_{21}\boldsymbol{B}_{21} + \boldsymbol{A}_{22}\boldsymbol{B}_{22} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

와 같이 부분행렬들의 곱으로 나타난다.

■ 행렬 $\boldsymbol{A}$가 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{A}_1,\ \ \boldsymbol{A}_2)$로 분할되고 벡터 $\boldsymbol{b}$가 $\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{b}_1\\ \boldsymbol{b}_2\end{pmatrix}$로 적절하게 분할되었을 경우,

행렬 $\boldsymbol{A}$와 벡터 $\boldsymbol{b}$의 곱은

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{b}=(\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2)\begin{pmatrix}\boldsymbol{b}_1\\ \boldsymbol{b}_2\end{pmatrix}=\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{b}_1+\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{b}_2$$

≪예제 2.5≫ 3×4 행렬 $\boldsymbol{A}$를 분할해보자.

$$\boldsymbol{A}=\left(\begin{array}{ccc|c}-1 & 2 & 1 & 5\\ 0 & -3 & 4 & 2\\ \hline 1 & 5 & 6 & 1\end{array}\right)$$

$\boldsymbol{A}_{11}=\begin{pmatrix}-1 & 2 & 1\\ 0 & -3 & 4\end{pmatrix}$, $\boldsymbol{A}_{12}=\begin{pmatrix}5\\ 2\end{pmatrix}$, $\boldsymbol{A}_{21}=(1,\ \ 5,\ \ 6)$, $\boldsymbol{A}_{22}=(1)$으로 분할되었다.

2.4 행렬의 계수

■ n개의 벡터 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$에 대해 선형조건 $c_1\boldsymbol{a}_1 + c_2\boldsymbol{a}_2 + \ldots + c_n\boldsymbol{a}_n = 0$ 을 만족하는 상수 $c_1, c_2, \ldots, c_n$ 중

0 이 아닌 c_i들이 존재하면 벡터 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ 은 선형종속(linearly dependent)

$c_1, c_2, \ldots, c_n$가 모두 0 이면 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ 는 선형독립(linearly independent).

■ $\boldsymbol{A}$의 행공간(row space)과 열공간(column space)의 공통차원을 $\boldsymbol{A}$의 **계수**(rank)

$$\begin{aligned} rank(\boldsymbol{A}) &= \boldsymbol{A}\text{의 선형독립인 행벡터의 수} \\ &= \boldsymbol{A}\text{의 선형독립인 열벡터의 수.} \end{aligned}$$

■ $\boldsymbol{A}$가 임의의 행렬이면 $rank(\boldsymbol{A}) = rank(\boldsymbol{A}')$

≪예제 2.6≫ 2×3 행렬 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 1 & 5 & 4 \end{pmatrix}$에 대해 $rank(\boldsymbol{A}) = rank(\boldsymbol{A}') = 2$가 된다.

2.5 행렬의 결정식

$n \times n$ 정방행렬 $\boldsymbol{A}$에 대해 행렬의 **결정식**(determinant): $|\boldsymbol{A}|$ 또는 $\det(\boldsymbol{A})$

- 2×2 행렬에 대한 결정식: (예)

$$\det\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

$$\det(\boldsymbol{A}) = \left|\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -3 & 5 \end{pmatrix}\right| = 1 \times 5 - 2 \times (-3) = 11$$

- 3×3 행렬에 대해서는 결정식:

$$\det\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} \\ - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{11}a_{23}a_{32}$$

$\boldsymbol{A}$가 $\mathbf{0}$벡터를 행이나 열에 포함하면 $\det(\boldsymbol{A}) = 0$ 이 된다.

≪예제 2.7≫ 2×2 행렬 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -3 & 5 \end{pmatrix}$의 결정식을 구해보자.

$|\boldsymbol{A}|=1\cdot5-2(-3)=11$ 이다.

● R에서 det() 함수를 사용하여 행렬의 결정식을 구한다.

```
> A=matrix(c(1,-3,   2,5), nc=2)
> det(A)
[1] 11
```

≪예제 2.8≫ 3×3 행렬 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 3 & 4 \\ 1 & 5 & 6 \end{pmatrix}$의 결정식을 구해보자.

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{A}| &= a_{11}a_{22}a_{33}+a_{12}a_{23}a_{31}+a_{13}a_{21}a_{32}-a_{13}a_{22}a_{31}-a_{12}a_{21}a_{33}-a_{11}a_{23}a_{32} \\ &= 1\cdot3\cdot6+2\cdot4\cdot1+1\cdot0\cdot5-1\cdot3\cdot1-2\cdot0\cdot6-1\cdot4\cdot5=3\ .\end{aligned}$$

```
> A=matrix(c(1,0,1,  2,3,5,  1,4,6), nc=3)
> det(A)
[1] 3
```

2.6 역행렬(inverse matrix)

- 정칙(nonsingular)인 정방행렬 $\boldsymbol{A}$에 대해 **역행렬** $\boldsymbol{A}^{-1}$가 유일하게(unique) 존재한다.

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

- 2×2 행렬 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ 에 대해 다음과 같이 역행렬이 얻어진다:

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \frac{1}{|\boldsymbol{A}|}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}.$$

여기서 결정식은 $|\boldsymbol{A}| = ad - bc$ 이다.

≪예제 2.9≫ 2×2 행렬 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -3 & 5 \end{pmatrix}$ 의 역행렬을 구해보자.

$$|\boldsymbol{A}| = 11 \quad , \quad \boldsymbol{A}^{-1} = \frac{1}{11}\begin{pmatrix} 5 & -2 \\ 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5/11 & -2/11 \\ 3/11 & 1/11 \end{pmatrix}$$

● R에서 MASS 패키지와 ginv() 함수를 사용하여 역행렬을 구한다.

```
> library(MASS)
> A=matrix(c(1,-3,   2,5), nc=2)
> ginv(A)
          [,1]       [,2]
[1,] 0.4545455 -0.1818182
[2,] 0.2727273  0.0909091
```

≪예제 2.10≫ 3×3 행렬 $\boldsymbol{A}$의 역행렬을 구해보자.

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&2&1\\0&3&4\\1&5&6\end{pmatrix}$$

```
> library(MASS)
> A=matrix(c(1,0,1,  2,3,5,  1,4,6), nc=3)
> ginv(A)
           [,1]      [,2]      [,3]
[1,] -0.6666667 -2.333333  1.666667
[2,]  1.3333333  1.666667 -1.333333
[3,] -1.0000000 -1.000000  1.000000
```

2.7 양정치행렬과 반양치행렬

$\boldsymbol{x} \neq 0$인 벡터 $\boldsymbol{x}$에 대해 이차선형식 $\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0$ 이면

행렬 $\boldsymbol{A}$는 양정치행렬(positive definite matrix)이다.

① $\boldsymbol{A}$가 양정치행렬이면 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{T}'\boldsymbol{T}$ 를 만족하는 정칙행렬 $\boldsymbol{T}$가 존재한다.

② $\boldsymbol{A}$가 양정치행렬이면 대각선에 위치한 원소 a_{ii}는 양수이다.

대칭행렬 $\boldsymbol{A}$ 가 양정치행렬이면 다음과 동치이다.

① $\boldsymbol{A}$ 의 고유값은 모두 양수이다.

② $\boldsymbol{A}$의 부분행렬 $\boldsymbol{A}_k$는 양의 결정식(determinant)을 갖는다.

정칙행렬 $\boldsymbol{Q}$ 와 대각행렬 $\boldsymbol{\Lambda}$ 가 존재하여 다음과 같이 분해될 수 있다:

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{Q}^{t} = \boldsymbol{Q}\sqrt{\boldsymbol{\Lambda}}\sqrt{\boldsymbol{\Lambda}}\boldsymbol{Q}^{t} = (\sqrt{\boldsymbol{\Lambda}}\boldsymbol{Q}^{t})^{t}(\sqrt{\boldsymbol{\Lambda}}\boldsymbol{Q}^{t}) \quad .$$

2.8 트레이스

$n \times n$ 행렬 $\boldsymbol{A}$ 의 **트레이스**(trace)는 정방행렬의 대각선상에 놓인 원소들의 합

$$tr(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$$

으로 정의되며 정방행렬 A, B 에 대해 다음의 성질을 갖는다.

① $tr(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) = tr(\boldsymbol{A}) + tr(\boldsymbol{B})$

② $tr(\boldsymbol{AB}) = tr(\boldsymbol{BA})$

≪예제 2.12≫ 행렬 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}$ 의 트레이스를 구해보자.

$$tr(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{2} a_{ii} = 3 + 2 = 5$$

2.9 직교행렬

■ 직교행렬(orthogonal matrix) $\boldsymbol{Q}$

$$\boldsymbol{QQ}' = \boldsymbol{Q}'\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I} \qquad \text{또는} \qquad \boldsymbol{Q}' = \boldsymbol{Q}^{-1}$$

여기서 $\boldsymbol{I}$: 항등행렬

■ $\boldsymbol{S}$는 $p \times p$ **대칭행렬**(symmetric matrix), $\boldsymbol{a}$는 $p \times 1$ 벡터일 때

이차형식(quadratic form):

$$\boldsymbol{a}'\boldsymbol{Sa} = (a_1 \dots a_p)\begin{pmatrix} s_{11} & \dots & s_{1p} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ s_{p1} & \dots & s_{pp} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix} = \sum_i a_i{}^2 s_{ii} + \sum_{i \neq j} a_i a_j s_{ij}$$

≪예제 2.12≫ $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ 는 직교행렬임을 보여라.

$$\boldsymbol{A}'\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

```
> A=matrix(c(1/sqrt(2),-1/sqrt(2),  1/sqrt(2),1/sqrt(2)), nc=2)
> t(A)%*%A
              [,1]          [,2]
[1,]  1.000000e+00 -2.236167e-17
[2,] -2.236167e-17  1.000000e+00
> I= round(t(A)%*%A, digits=3)
> I
     [,1] [,2]
[1,]    1    0
[2,]    0    1
```

2.10 고유값과 고유벡터

2.10.1 고유값과 고유벡터 정의

$p \times p$ 인 정방행렬 $\boldsymbol{A}$ 는 p개의 고유값 $\lambda_1, \ \lambda_2, \ \ldots. \ , \lambda_p$ 와 각각의 **고유값**(eigenvalue)에 해당하는 **고유벡터**(eigenvector) $\boldsymbol{x}_1, \ \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_p$를 갖는다.

다음은 동치관계인 명제들이다.

① $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}$　　② $(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = 0$

③ $|\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}| = 0$: 특성방정식(characteristic equation)

④ $tr(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i$

⑤ $|\boldsymbol{A}| = \prod_{i=1}^{p} \lambda_i$

⑥ $|\boldsymbol{I} + \boldsymbol{A}| = \prod_{i=1}^{p} (1 + \lambda_i)$

≪예제 2.14≫ 행렬 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}4 & -5\\ 2 & -3\end{pmatrix}$의 고유값과 고유벡터를 구해보자.

$$\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})=|\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}|=\begin{vmatrix}4-\lambda & -5\\ 2 & -3-\lambda\end{vmatrix}=(4-\lambda)(-3-\lambda)+10$$

$$=\lambda^2-\lambda-2=(\lambda-2)(\lambda+1)=0$$

고유값은 $\lambda=-1$과 $\lambda=2$

각 고유값에 해당하는 고유벡터가 존재하며 $(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})\boldsymbol{x}=\mathbf{0}$ 으로부터 고유벡터를 구한다.

(i) $\lambda_1=-1$

$$\boldsymbol{A}-\lambda_1\boldsymbol{I}=\begin{pmatrix}4 & -5\\ 2 & -3\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}5 & -5\\ 2 & -2\end{pmatrix},$$

$\begin{pmatrix}5 & -5\\ 2 & -2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}y\\ z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$, 이차 연립방정식 $\begin{cases}5y-5z=0\\ 2y-2z=0\end{cases}$을 풀면 고유벡터 $\boldsymbol{x}_1=\begin{pmatrix}y\\ z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}$를 얻는다.

$L_{x_1}=\sqrt{2}$ 이므로 단위고유벡터는 $\boldsymbol{e}_1=\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ 1/\sqrt{2}\end{pmatrix}$가 된다.

(ii) $\lambda_2 = 2$

$$\boldsymbol{A} - \lambda_2 \boldsymbol{I} = \begin{pmatrix} 4 & -5 \\ 2 & -3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -5 \\ 2 & -5 \end{pmatrix}$$

이므로

$$\begin{pmatrix} 2 & -5 \\ 2 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

를 풀면된다. 즉 $2y - 5z = 0$ 를 풀면 고유벡터

$$\boldsymbol{x}_2 = \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

를 얻는다. $L_{x_2} = \sqrt{29}$ 이므로 단위 고유벡터는 $\boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} 5/\sqrt{29} \\ 2/\sqrt{29} \end{pmatrix}$ 가 된다.

● R에서 eigen() 함수를 사용하여 고유값과 고유벡터를 구한다.

eigen(A)$values

: A 행렬의 고유값

eigen(A)$vectors

: A 행렬의 고유벡터

```
> A=matrix(c(4,2,   -5,-3), nc=2)
> lambda=eigen(A)
> lambda
$values
[1]  2 -1
$vectors
          [,1]      [,2]
[1,] 0.9284767 0.7071068
[2,] 0.3713907 0.7071068

> lambda$values[[1]]     # 고유값1
[1] 2
> lambda$vectors[,1]     # 고유벡터1
[1] 0.9284767 0.3713907
> lambda$values[[2]]     # 고유값2
[1] -1
> lambda$vectors[,2]     # 고유벡터2
[1] 0.7071068 0.7071068
```

2.10.2 고유값의 성질

$p \times p$ 정방행렬 $\boldsymbol{A}$가

p개의 고유값 λ_1, λ_2, ... ,λ_p와 고유벡터 $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$, ... , $\boldsymbol{x}_p$를 가질 때,

다음은 고유값에 관한 몇 가지 중요한 성질이다.

① 행렬 $\boldsymbol{A}$ 의 고유값의 합과 $tr(\boldsymbol{A})$는 같다. 즉,

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_p = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{pp} = tr(\boldsymbol{A})$$

② 행렬 $\boldsymbol{A}$의 고유값의 곱과 $|\boldsymbol{A}|$는 같다. 즉,

$$\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_p = |\boldsymbol{A}|$$

③ 행렬 $\boldsymbol{A}$의 고유값이 $\lambda_1, \cdots$, λ_p 이고 해당하는 고유벡터가 각각 $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$, ... , $\boldsymbol{x}_p$일 때,

$\boldsymbol{A}^2$의 고유값은 λ_1^2, $\cdots$, λ_p^2 이고 고유벡터는 각각 $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$, ... , $\boldsymbol{x}_p$이다.

≪예제 2.15≫ 대칭행렬 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$의 고유값은 $\lambda_1=4,\ \lambda_2=2$ 이다.

$$tr(\boldsymbol{A})=3+3=6=\lambda_1+\lambda_2=4+2=6$$

$$|\boldsymbol{A}|=3\cdot 3-1\cdot 1=8=\lambda_1\cdot\lambda_2=4\cdot 2=8.$$

```
> A=matrix(c(3,1,   1,3), nc=2)
> eigen(A)
$values
[1] 4 2
$vectors
          [,1]       [,2]
[1,] 0.7071068 -0.7071068
[2,] 0.7071068  0.7071068
> t(A)
     [,1] [,2]
[1,]    3    1
[2,]    1    3
> det(A)
[1] 8
```

2.11 스펙트럼분해

$p \times p$ 대칭행렬 $\boldsymbol{A}$는 다음과 같이 **스펙트럼분해**(spectral decomposition 또는 분광분해)된다.

- $$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}' = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_i{}' .$$

여기서 λ_i는 $\boldsymbol{A}$의 고유값이고 이에 해당하는 $\boldsymbol{e}_i$는 단위 고유벡터

$\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}' = \boldsymbol{P}'\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I}$ 를 만족하는 직교행렬 $\boldsymbol{P}$는 $\boldsymbol{P} = [\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_p]$, $\quad \boldsymbol{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \phi \\ & \ddots & \\ \phi & & \lambda_p \end{pmatrix}$,

- $$\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{P}' = \sum_{i=1}^{p} \frac{1}{\lambda_i} \boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}_i{}'$$

- $\boldsymbol{P}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\Lambda}$: 대칭행렬 $\boldsymbol{A}$는 직교행렬 $\boldsymbol{P}$에 의해 대각화된다(diagonalized)

2.12 제곱근행렬

$p \times p$ 양정치행렬 $\boldsymbol{A}$ 에 대해

$$\boldsymbol{A}^{1/2}\boldsymbol{A}^{1/2} = \boldsymbol{A}$$

를 만족하는 행렬 $\boldsymbol{A}^{1/2}$을 **제곱근행렬**(square root matrix)이라고 한다.

스펙트럼분해를 이용하면

- **제곱근행렬:** $\boldsymbol{A}^{1/2} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\boldsymbol{P}' = \sum_{i=1}^{p} \sqrt{\lambda_i}\,\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_i{}'$

여기서 λ_i는 $\boldsymbol{A}$의 고유값이고 $\boldsymbol{e}_i$는 해당 단위 고유벡터,

직교행렬 $\boldsymbol{P} = [\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_p]$, $\quad \boldsymbol{\Lambda}^{1/2} = \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & & \phi \\ & \ddots & \\ \phi & & \sqrt{\lambda_p} \end{pmatrix}$

2.13 멱등행렬

■ 행렬 $\boldsymbol{A}$에 대해 다음의 관계

$$\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{A}$$

를 만족하는 행렬을 **멱등행렬**(idempotent matrix)이라 한다.

≪예제 2.17≫ $n \times n$ 행렬 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{J}$에 대해

$$\boldsymbol{A}^2 = (\boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{J})(\boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{J}) = \boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{J} - \frac{1}{n}\boldsymbol{J} + \frac{1}{n^2}\boldsymbol{J}\boldsymbol{J} = \boldsymbol{I} - \frac{1}{n}\boldsymbol{J} = \boldsymbol{A}$$

이다 .$\boldsymbol{J}\boldsymbol{J} = n\boldsymbol{J}$ 이 되고 위 등식이 성립하므로 $\boldsymbol{A}$는 멱등행렬이다.

2.14 행렬에 대한 부등식과 최대화정리

■ Cauchy-Schwarz 부등식.

$p \times 1$ 벡터 $\boldsymbol{b}$ 와 $\boldsymbol{d}$ 에 대해 다음의 부등식이 성립.

$$(\boldsymbol{b}'\boldsymbol{d})^2 \le (\boldsymbol{b}'\boldsymbol{b})(\boldsymbol{d}'\boldsymbol{d})$$

여기서 등식은 임의의 상수 c에 대해, $\boldsymbol{b} = c\boldsymbol{d}$일 때만 성립.

■ 확장된 Cauchy-Schwarz 부등식.

$p \times 1$ 벡터 $\boldsymbol{b}$와 $\boldsymbol{d}$, $p \times p$ 행렬 $\boldsymbol{B}$ 는 양정치행렬일 때 다음의 부등식이 성립.

$$(\boldsymbol{b}'\boldsymbol{d})^2 \le (\boldsymbol{b}'\boldsymbol{B}\boldsymbol{b})(\boldsymbol{d}'\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{d})$$

여기서 등식은 임의의 상수 c에 대해, $\boldsymbol{b} = c\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{d}$ 일 때만 성립.

■ 최대화정리(maximization lemma).

$p \times p$ 행렬 $\boldsymbol{B}$ 는 양정치행렬이고 $p \times 1$ 벡터$\boldsymbol{d}$ 는 주어진 벡터이다.

임의의 $\mathbf{0}$ 이 아닌 $p \times 1$ 벡터$\boldsymbol{x}$ 에 대해

$$\max_{x \neq 0} \frac{(\boldsymbol{x}'\boldsymbol{d})^2}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{d}'\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{d}$$

여기서 0이 아닌 임의의 상수 c에 대해, $\boldsymbol{x} = c\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{d}$일 때 최대값을 얻는다.

■ 이차형식에서 최대화정리 (maximization of quadratic forms).

$p \times p$ 행렬 $\boldsymbol{B}$ 는 양정치행렬이고 고유값 $\lambda_1 \geqq \lambda_2 \geqq \cdots \geqq \lambda_p \geqq 0$을 갖고 각 고유값에 해당하는 단위 고유벡터 $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_p$ 를 갖는다.

$$\max_{x \neq 0} \frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}} = \lambda_1 \qquad (\boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}_1 \text{일 때})$$

$$\max_{x \neq 0} \frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}} = \lambda_p \qquad (\boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}_p \text{일 때})$$

■ 또한

$$\max_{x \perp e_1, \ldots, e_k} \frac{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{x}} = \lambda_{k+1} \;\; (\boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}_{k+1} \text{일 때, } k = 1, 2, \ldots, p-1)$$

성립. 여기서 $\perp$는 벡터 간에 서로 직교함을 나타낸다.