3.3 고윳값 분해

- 고윳값 분해와 다음에 설명할 특잇값 분해는 행렬 내부구조를 살펴보거나 행렬을 이용한 연산을 더 효율적으로 할 때 유용하다.

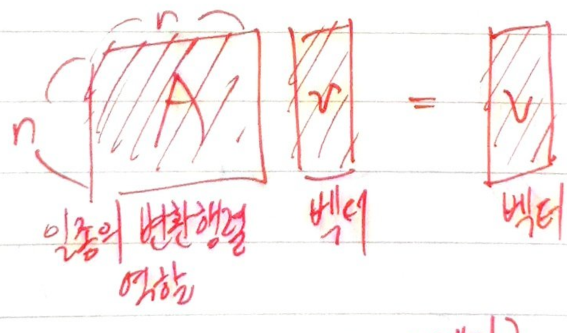
고윳값과 고유벡터

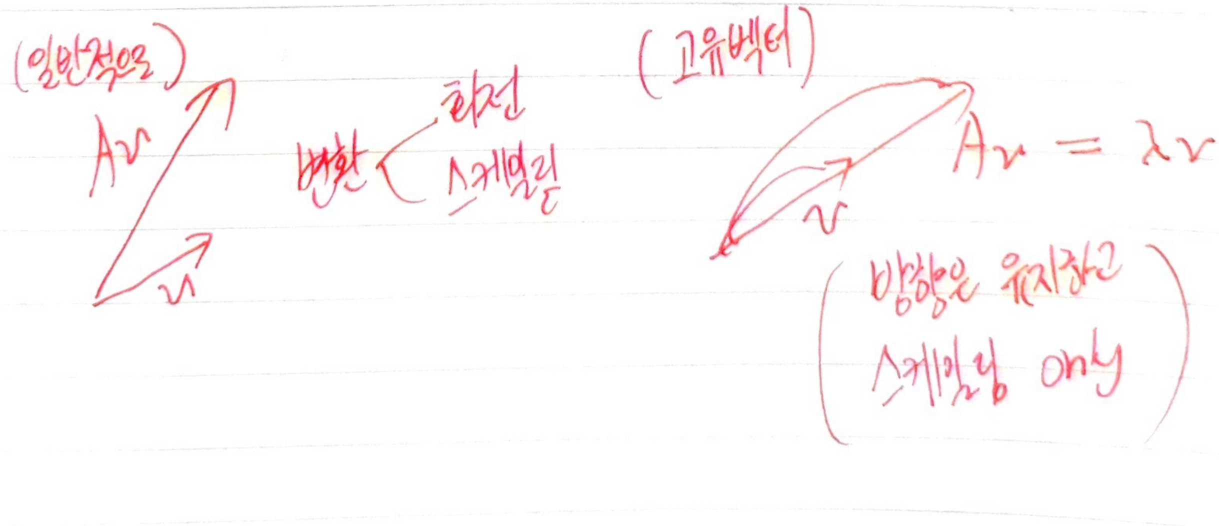
정방행렬 A에 대해 다음 식을 만족하는 영벡터가 아닌 벡터 v, 실수 λ를 찾을 수 있다고 가정하자.

$$Av = \underbrace{\lambda}_{\text{scalar}} v$$

vector

위 식을 만족하는 실수 λ를 고윳값 (eigenvalue), 벡터 v를 고유벡터 (eigenvector) 라고 한다. 고윳값과 고유벡터를 찾는 작업을 고유분해 (eigen-decomposition) 또는 고윳값분해 (eigenvalue decomposition) 라고 한다.





행렬 A의 고유벡터는 행렬 A를 곱해서 변환을 해도 방향이 바뀌지 않는 벡터다.
고유값은 변환된 고유벡터와 원래 고유벡터의 크기 비율이다.

위 식은 다음처럼 쓸 수도 있다.

$$Av - \lambda v = (A - \lambda I)v = 0$$

예제

행렬 $A = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 2 & -3 \end{bmatrix}$ 에 대해,
다음 스칼라 값과 벡터는 각각 고유값, 고유벡터가 된다.

$$\lambda = -1$$

$$v = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$Av = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 2 & -3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix} = (-1)\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \lambda v$$

어떤 벡터 v 가 고유벡터가 되면 이 벡터에 실수를 곱한 벡터 cv, 즉
v와 방향이 같은 벡터는 모두 고유벡터가 된다.

$$A(cv) = cAv = c\lambda v = \lambda(cv)$$

그래서 보통 고유벡터를 표시할 때는 길이가 1인 단위벡터가 되도록
다음처럼 정규화(normalization)를 한다.

$$\frac{v}{\|v\|}$$

따라서 위 행렬의 고유값-고유벡터는 다음과 같다.

$$\lambda = -1, \quad v = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0.7071 \\ 0.7071 \end{bmatrix}$$

연습문제 3.3.1

다음 행렬 B가

$$B = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

다음과 같은 두 가지 고윳값, 고유벡터를 가짐을 증명하라.

$$\lambda_1 = 4, \quad v_1 = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_2 = -1, \quad v_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

또는

$$\lambda_1 = 4, \quad v_1 = \begin{bmatrix} \frac{3}{\sqrt{13}} \\ \frac{2}{\sqrt{13}} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0.8321 \\ 0.5547 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 8 \end{bmatrix} = 4 \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix} = \lambda_1 v_1$$

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = -1 \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \lambda_2 v_2$$

$$\frac{v_1}{\|v_1\|} = \frac{1}{\sqrt{13}} \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{3}{\sqrt{13}} \\ \frac{2}{\sqrt{13}} \end{bmatrix}$$

특성방정식

지금까지는 행렬과 그 행렬의 고윳값-고유벡터를 주고 이들이 정말 고윳값-고유벡터인지를 계산으로 증명했다. 그러면 행렬만 주어졌을 때 고윳값-고유벡터는 어떻게 구할 수 있을까?

행렬 A의 고윳값은 $A-\lambda I$의 행렬식이 0이 되도록 하는 특성방정식 (characteristic equation)의 해를 구하면 된다.

$$\det(A-\lambda I)=0$$

이 조건은 행렬 $(A-\lambda I)$의 역행렬이 존재하지 않는다는 뜻이다. 만약 $A-\lambda I$의 역행렬이 존재한다면 고윳값 조건을 만족하는 벡터가 항상 영벡터가 되기 때문이다.

$$(A-\lambda I)^{-1}(A-\lambda I)v=0 \rightarrow v=0$$

예제

$$A=\begin{bmatrix}1 & -2\\ 2 & -3\end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}\det(A-\lambda I) &= \det\left(\begin{bmatrix}1 & -2\\ 2 & -3\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}\lambda & 0\\ 0 & \lambda\end{bmatrix}\right)\\ &= \det\left(\begin{bmatrix}1-\lambda & -2\\ 2 & -3-\lambda\end{bmatrix}\right)\\ &= (1-\lambda)(-3-\lambda)+4\\ &= \lambda^2+2\lambda+1=0\end{aligned}$$

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

* 원래 2차방정식은 해를 2개 가질 수 있지만, 이 경우 하나만 존재하기 때문에 이러한 해를 중복고윳값(repeated eigenvalue)이라고 한다.

예제2

$$B = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\det(B - \lambda I) = \det\left(\begin{bmatrix} 2-\lambda & 3 \\ 2 & 1-\lambda \end{bmatrix}\right)$$

$$= (2-\lambda)(1-\lambda) - 6$$

$$= \lambda^2 - 3\lambda - 4$$

$$= (\lambda - 4)(\lambda + 1)$$

$$\therefore \lambda = 4, -1$$

예제3

2차 방정식의 실수 해가 존재하지 않는 경우도 있기 때문에 실수 고유값이 없는 행렬도 있을 수 있다.

$$C = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\det(C - \lambda I) = \det\left(\begin{bmatrix} 0-\lambda & -1 \\ 1 & 0-\lambda \end{bmatrix}\right)$$

$$= \lambda^2 + 1$$

$$\therefore \lambda = i,\ \lambda = -i \quad (\text{복소수})$$

연습문제 3.3.2

특성방정식을 이용하여 다음 행렬의 고윳값을 구하라.

$$D = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\det(D-\lambda I) = \det\left(\begin{bmatrix} 2-\lambda & 1 \\ 1 & 2-\lambda \end{bmatrix}\right)$$

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

$$= \lambda^2 - 4\lambda + 3$$

$$= (\lambda-1)(\lambda-3)$$

$$\therefore \lambda = 1,\ \lambda = 3$$

(고윳값의 개수)

N차방정식이 항상 N개의 복소수 해를 가진다는 사실을 이용하면, N차원 정방행렬의 고윳값의 개수에 대해 다음 정리가 성립한다.

[정리] 중복된 고윳값을 각각 별개로 지정하고 복소수인 고유값도 고려한다면 N차원 정방행렬의 고윳값은 항상 N개다.

$$N\left\{\begin{bmatrix} 0-\lambda & & & \\ & 0-\lambda & & \\ & & 0-\lambda & \\ & & & 0-\lambda \end{bmatrix}\right.$$

λ^N N차방정식

(고윳값과 대각합 / 행렬식)

★ 어떤 행렬의 고윳값이 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots \lambda_N$ 이라고 하고, 모든 고윳값의 곱은 행렬식의 값과 같고 모든 고윳값의 합은 대각합의 값과 같다.

det(A) 존재하는가?

$\Updownarrow$

고윳값 중에 0이 하나도 없는가?

$$\det(A) = \prod_{i=1}^{N} \lambda_i$$

$$\mathrm{tr}(A) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i$$

예제

행렬 A에 대해서 대각합과 행렬식은 다음과 같다.

$$\mathrm{tr}(A) = 1 + (-3) = -2$$
$$\det(A) = 1 \cdot (-3) - 2 \cdot (-2) = 1$$

그런데 고윳값이 $\lambda_1 = -1$, $\lambda_2 = -1$ (중복된 고윳값) 이므로,

$$\lambda_1 + \lambda_2 = -2 = \mathrm{tr}(A)$$
$$\lambda_1 \lambda_2 = 1 = \det(A)$$

고유벡터의 계산

고윳값을 알면 다음 연립방정식을 풀어 고유벡터를 구할 수 있다.

$$(A - \lambda I)v = 0$$

예제

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 2 & -3 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 1+1 & -2 \\ 2 & -3+1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = 0$$

$$\begin{bmatrix} 2 & -2 \\ 2 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = 0 \quad \therefore 2v_1 - 2v_2 = 0$$

$$\therefore v_1 = v_2$$

$v_2 = v_2$ 이면서 길이 1.

$$v = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

* 고유벡터로 중복!

repeated eigenvector

* 고윳값 중복이라고 고유벡터도 항상 중복인 것은 아니다.

예를 들어 항등행렬 I의 고윳값은 1로 중복 고윳값을 가진다.

$$\det(I - \lambda I) = \det\left(\begin{bmatrix} 1-\lambda & 0 \\ 0 & 1-\lambda \end{bmatrix}\right) = (\lambda - 1)^2 = 0$$

하지만 이 값을 고윳값과 고유벡터 정의에 대입하면

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = 0$$

으로, 임의의 2차원 벡터는 모두 고유벡터가 된다. 즉

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

둘 다 고유벡터이다.

연습문제 3.3.3

특성방정식을 이용하여 다음 행렬의 고윳값과 고유벡터를 구하라.

(1) $E = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$ $\quad \det\left(\begin{bmatrix} 2-\lambda & 3 \\ 2 & 1-\lambda \end{bmatrix}\right)$

$$(2-\lambda)(1-\lambda) - 6 = \lambda^2 - 3\lambda - 4$$
$$= (\lambda + 1)(\lambda - 4)$$

i) $\lambda = -1$ 일 때,

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$$

$2v_1 + 3v_2 = -v_1$

$2v_1 + v_2 = -v_2$

$2v_1 + v_2$

$2v_2 = -v_1 + v_2$

$v_1 = -v_2, \quad 2v_2^2 = 1, \quad v_2^2 = \frac{1}{2}, \quad \left(v_1 = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}, \; v_2 = \pm\frac{1}{\sqrt{2}} \right)$

$\lambda=4$일 때)

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4v_1 \\ 4v_2 \end{bmatrix}$$

$$2v_1 + 3v_2 = 4v_1 \qquad -v_1+2v_2 = 4v_1 - 4v_2$$

$$3v_1 + v_2 = 4v_2 \qquad 6v_2 = 3v_1$$

$$\boxed{v_2 = \frac{1}{2}v_1}$$

$$\frac{5}{4}v_2^2 = 1,$$

$$v_2^2 = \frac{4}{5}, \quad \boxed{v_2 = \pm\frac{2}{\sqrt5}, \quad v_1 = \pm\frac{4}{\sqrt5}}$$

(2) $$F = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\det\left(\begin{bmatrix} 1-\lambda & 1 \\ 0 & 1-\lambda \end{bmatrix}\right) = (1-\lambda)^2$$

$$\lambda = 1.$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix}$$

$$v_1 + v_2 = v_1 \qquad \therefore v_2 = 0$$

$$v_2 = v_2$$

$$\left\|\begin{bmatrix} v_1 \\ 0 \end{bmatrix}\right\| = 1, \quad v_1^2 = 1, \quad v_1 = \pm 1$$

$$\therefore \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

np.linalg.eig(matrix)

결과값!

[eigenvalue, eigenvalue]

[[eigenvector$_{11}$, eigenvector$_{21}$],
[eigenvector$_{12}$, eigenvector$_{22}$]]

이렇게 하나, 이렇게 하나.

대각화

N차원의 정방행렬 A가 N개의 복소수 고윳값과 이에 대응하는 고유벡터를 가진다는 성질을 이용하면, 다음처럼 행렬을 분해할 수 있다.

행렬 A의 고윳값과 이에 대응하는 단위벡터인 고유벡터를 각각

$$\lambda_1, \lambda_2, \cdots \lambda_N, \quad v_1, v_2, \cdots v_N$$

이라고 하자.

이 고윳값과 고유벡터를 묶어서 다음과 같이 고유벡터 행렬, 고윳값 행렬을 정의할 수 있다.

고유벡터행렬 V는 고유벡터를 열벡터로 옆으로 쌓아서 (axis=1) 만든 행렬이다.

$$V = [v_1, \cdots v_N]$$

$$V \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

고윳값행렬 Λ는 고윳값을 대각성분으로 가지는 대각행렬이다.

$$\underset{\text{lambda}}{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N \end{bmatrix}, \quad \underset{\text{lambda}}{\Lambda} \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

행렬과 고유벡터행렬의 곱은 ~~고유값~~ 고유벡터행렬과 고유값행렬의 곱과 같다.

$$AV = A[v_1, \cdots v_N]$$
$$= [Av_1, \cdots Av_N]$$
$$= [\lambda_1 v_1, \cdots \lambda_N v_N]$$
$$= [v_1 \cdots v_N]\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N \end{bmatrix}$$
$$= V\Lambda \text{ (lambda)}$$

$$\therefore AV = V\Lambda$$

※ $\boxed{\text{만약 } V^{-1} \text{ 존재한다면,}}$

$$AVV^{-1} = V\Lambda V^{-1}$$
$$A = V\Lambda V^{-1}$$

분해

→ 대각화 ($\because \Lambda$ = 대각행렬)

☆

[외워야 할 것들]

정방행렬 $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$

- λ는 복소수
- λ는 N개
- $AV = V\Lambda$ —— V^{-1} 존재하면 $A = V\Lambda V^{-1}$ (대각화)
- $\sum_{i=1}^{N} \lambda_i = tr(A)$
- $\prod_{i=1}^{N} \lambda_i = det(A)$

연습문제 3.3.6

다음 행렬을 고윳값과 고유벡터로 대각화하라.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$det\left(\begin{bmatrix} 2-\lambda & 3 \\ 2 & 1-\lambda \end{bmatrix}\right) = (2-\lambda)(1-\lambda) - 6 = \lambda^2 - 3\lambda - 4$$
$$= (\lambda - 4)(\lambda + 1)$$

$(\lambda = 4)$ $\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4v_{11} \\ 4v_{12} \end{bmatrix}$

$2v_{11} + 3v_{12} = 4v_{11}$

$2v_{11} + v_{12} = 4v_{12}$

$-2v_{12} = 4v_{11}$

$v_{12} = -2v_{11}$

$5v_{11}^2 = 1,\ v_{11} = \pm\frac{1}{\sqrt{5}},\ v_{12} = \mp\frac{2}{\sqrt{5}}$

$v_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix},\ v_2 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}$

$V = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}$

$-\frac{2}{\sqrt{5}} - \frac{2}{\sqrt{5}} \neq 0$, V^{-1} 존재 $\rightarrow A = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 4 & \\ & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}^{-1}$

$= V\Lambda V^{-1}$

대각화 가능

[정리] 행렬이 대각화 가능하려면 고유벡터가 선형독립이어야 한다.

$$V = \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & v_3 \end{bmatrix}$$

선형독립

Full Rank $\Longleftrightarrow$ V^{-1} 존재한다

[정리] 정방행렬이 풀랭크면 역행렬이 존재한다. 그 역도 성립한다

(증명)

행렬 A가 대각화 가능하면,

$$A = V\Lambda V^{-1}$$

이 행렬의 역행렬은

$$A^{-1} = (V\Lambda V^{-1})^{-1} = V\Lambda^{-1}V^{-1}$$

대칭행렬의 고유분해

Special case!

대칭행렬에 대해서는 다음 정리가 성립한다.

[정리] "행렬 A가 실수인 대칭행렬이면, 고유값이 실수이고 고유벡터는 직교(orthogonal) 한다.

서로 모두

만약 벡터들의 크기가 1이 되도록 정규화된 상태라면,
고유벡터 행렬 V는 정규직교(orthonormal) 행렬이므로, $V^T = V^{-1}$ 이다.

$$V^T V = V V^T = I$$

$$V^{-1} = V^T$$

따라서 대각화가 가능하고 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$A = V \Lambda V^{-1} = V \Lambda V^T$$

실수 대칭행렬 　 실수 고유벡터 값 　 고유벡터 (∴정규직교) → $V^T = V^{-1}$

이 사실로부터 다음 정리도 도출된다.

[정리] 실수인 대칭행렬은 항상 대각화가능하다.

대칭행렬을 랭크-1 행렬의 합으로 분해

* rank-1 matrix?

$x^T x =$, 크기는 크지만 핵심정보는 x 한 줄 뿐인 벡터의 자기자신과의 내적 행렬.

N차원 대칭행렬 A는 다음처럼 N개의 rank-1 행렬 $A_i = v_i v_i^T$로 나타낼수 있다.

$$A = V \Lambda V^T$$

$$= \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \lambda_1 v_1 & \lambda_2 v_2 & \cdots & \lambda_N v_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \\ \vdots \\ v_N^T \end{bmatrix}$$

따라서

N차원 대칭행렬 A는

$$A = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i v_i v_i^T = \sum_{i=1}^{N} \lambda_1 v_1 v_1^T + \cdots \lambda_N v_N v_N^T$$

$$\boxed{= \sum_{i=1}^{N} \lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2 + \cdots + \lambda_N A_N}$$

$\boxed{\text{예제}}$

대칭행렬

$$A = \begin{bmatrix} 60 & 30 & 20 \\ 30 & 20 & 15 \\ 20 & 15 & 12 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2 + \lambda_3 A_3 = \begin{bmatrix} 60 & 30 & 20 \\ 30 & 20 & 15 \\ 20 & 15 & 12 \end{bmatrix}$$

"만약 A가 0인 고유값이 없다면" $\rightarrow \det(A) \neq 0 \rightarrow A^{-1}$ 존재

역행렬도 다음처럼 N개의 rank-1 행렬 $A_i = v_i v_i^T$의 합으로 나타낼 수 있다.

$$\boxed{A^{-1} = V^{T} \Lambda^{-1} V = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\lambda_i} v_i v_i^T = \frac{1}{\lambda_1} A_1 + \frac{1}{\lambda_2} A_2 + \cdots \frac{1}{\lambda_N} A_N}$$

☆ ✓

대칭행렬의 고유값 부호

대칭행렬이 위와 같이 rank-1 matrix의 합으로 표시되고, 고유벡터가 서로 직교한다는 성질을 이용하면 다음 정리를 증명할 수 있다.

☆ ① [정리] 대칭행렬이 양의 정부호(positive definite)이면 고유값은 모두 양수다. 역도 성립한다. PD $\Leftrightarrow \lambda_i > 0$

② [정리] 대칭행렬이 양의 준정부호(semi-positive definite)이면 고유값은 모두 0이거나 양수다. 역도 성립한다. SPD $\Leftrightarrow \lambda_i \geq 0$

(정리① 증명) ... 정리②도 비슷한 방법으로 증명 가능하다.

* 대칭행렬은 rank-1 행렬의 합으로 표시 가능

$$A = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i v_i v_i^T$$

만약 대칭행렬이 양의 정부호이면, 임의의 벡터 x를 앞뒤로 곱해서 이차형식을 만들어도 0보다 커야 하므로, j번째 고유벡터 $x = v_j$를 선택해서 곱해도 마찬가지다.

$$v_j^T A v_j \geq 0$$

대칭행렬 → 고유벡터가 서로 직교한다.

$$v_i^T v_j = 0 \quad (\text{if } i \neq j)$$

$$v_i^T v_i = 1$$

따라서,

$$v_j^T A v_j = v_j^T \left(\sum_{i=1}^{N} \lambda_i v_i v_i^T \right) v_j$$

$$= \sum_{i=1}^{N} v_j^T \lambda_i v_i v_i^T v_j$$

$v_i^T v_j = 0$ (for $i \neq j$), $v_i^T v_i = 1$ 이므로,

$$\sum_{i=1}^{N} v_j^T \lambda_i v_i v_i^T v_j = (0 + 0 + \cdots + 1 + 0 + \cdots + 0) \cdot \lambda_i$$

when $i = j$

$$= \lambda_i$$

대칭행렬이 양의 정부호 $\Longleftrightarrow$ 고유값 $\lambda_i > 0$

$$\therefore \lambda_i > 0$$

반대로 대칭행렬의 고유값이 모두 양수이면, 그 행렬은 양의 정부호가 됨을 증명하자. 우선 고유분해로 만들어진 rank-1 행렬 $A_i = v_i v_i^T$는 양의 준정부호(positive semidefinite)임을 증명할 수 있다.

$$x^T A x = x^T v_i v_i^T x = (x^T v_i)(x^T v_i)^T = (x^T v_i)(x^T v_i)$$

$\because x^T v_i \rightarrow$ scalar

$$= \|x^T v_i\|^2 \geq 0$$

$\therefore A_i = v_i v_i^T$는 양의 준정부호.

* 그런데 이 값은 실제로는 0이 될 수 없다. 왜냐하면 이 값이 0이려면 모든 $x^T v_i$가 0, 다시 말해 x와 모든 v_i가 직교해야 하는데 대칭행렬의 고유벡터의 집합은 N차원에서 기저벡터를 이루기 때문에 동시에 모든 기저벡터와 직교인 벡터는 존재하지 않기 때문이다.

모두 만족하기에는 기저벡터가 너무 많다!

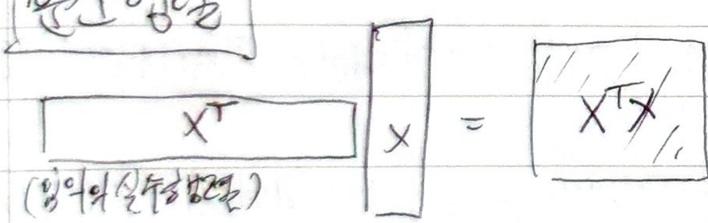
정방행렬 $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$

- λ는 복소수
- λ는 N개
- $AV = V\Lambda$
- $\sum_{i=1}^{N} \lambda_i = tr(A)$
- $\prod_{i=1}^{N} \lambda_i = det(A)$

대칭행렬 $A = A^T$

- λ는 실수
- $V^T = V^{-1}$
- $A = V\Lambda V^T$
- $A = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i v_i v_i^T$

분산행렬 "scatter matrix"



정방행렬 & 대칭행렬

$\because (X^TX)^T = X^T(X^T)^T = X^TX$

임의의 실수 행렬 X에 대해 X^TX인 정방행렬을 분산행렬 (scatter matrix) 이라고 한다. 분산행렬은 확률분포에서 더 자세히 다룰 예정.

정리 분산행렬은 양의 준정부호 (positive semi-definite)이고 고윳값은 0보다 같거나 크다.

$$x^T(X^TX)x = (Xx)^T(Xx) = \underbrace{u^Tu}_{\text{어떤 벡터의 제곱합}} \ge 0$$

정방행렬 $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$

- λ는 복소수
- λ는 N개
- $AV = V\Lambda$
- $\sum_{i=1}^{N} \lambda_i = trA$
- $\prod_{i=1}^{N} \lambda_i = detA$

대칭행렬 $A = A^T$

- λ는 실수
- $V^T = V^{-1}$
- $A = V\Lambda V^T$
- $A = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i v_i v_i^T$

음수인 고유값, $\lambda_i < 0$ 포함.

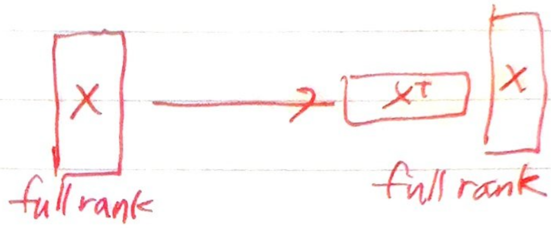
분산행렬 $A = X^TX$

- ~~X가 풀랭크~~
- ~~[illegible]~~

모든 고유값이 0보다 크거나 같다.

분산행렬의 역행렬

분산행렬에서는 다음 정리가 성립한다.



【정리】 행렬 X가 풀랭크이면 이 행렬의 분산행렬 X^TX의 역행렬이 존재.

행렬 X가 풀랭크이면 X의 열벡터가 기저벡터를 이루기 때문에, 영벡터가 아닌 모든 벡터 v에 대해 $Xv = u$는 영벡터가 될 수 없다.

(* 만약 영벡터 u를 만드는, 영벡터가 아닌 v가 존재한다면 서로 독립이 아니다.)

그러면 X^TX의 이차형식은 항상 양수가 된다.

$$v^T(X^TX)v = (Xv)^T(Xv) = u^Tu > 0$$

분산행렬은 양의 정부호

분산행렬은 역행렬이 존재

정방행렬 $A \in R^{N \times N}$

- λ는 복소수
- λ는 N개
- $AV = V\Lambda$
- $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = tr(A)$
- $\prod_{i=1}^{n} \lambda_i = \det A$

대칭행렬 $A = A^T$

- λ는 실수
- $V^T = V^{-1}$
- $A = V\Lambda V^{-1}$
- $A = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i v_i v_i^T$

음수인 고윳값 $\lambda_i < 0$ 포함

분산행렬 $A = X^T X$

모든 고윳값이 0 이상 $\lambda_i \geq 0$

양의 정부호(PD)

- X가 풀랭크
- 역행렬이 존재

모든 고윳값이 양수 $\lambda_i > 0$

연습문제 3.3.10

(1) 양의 정부호인 대칭행렬은 항상 역행렬이 존재하는가?

X가 양의 정부호이면, $X \rightarrow$ full rank $\rightarrow X^{-1}$ 존재.

(2) 역으로 역행렬이 존재하는 대칭행렬은 항상 양의 정부호인가?

대칭행렬의 역행렬이 존재하면, $\det A = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i \neq 0$.

→ 고윳값 중에 0은 존재하지 않음.

→ ~~음수인 고윳값은~~

"역행렬이 존재"

먼저, 대칭행렬이 양의 정부호 $\Longleftrightarrow$ 고윳값 $\lambda_i > 0$

그리고, 정방행렬 full rank $\Longleftrightarrow$ 역행렬 존재.

(+) 고윳값 $\lambda_i > 0 \Longleftrightarrow$ 역행렬 존재.

∴ 역행렬이 존재하는 대칭행렬은 항상 양의 정부호이다.

"정리"

N차원 정방행렬 A에 대해,

1. 행렬 A는 N개의 고윳값 - 고유벡터를 가진다
(복소수인 경우와 중복 repeated인 경우를 포함)

2. 행렬의 대각합은 모든 고윳값의 합과 같다.

3. 행렬의 행렬식은 모든 고윳값의 곱과 같다.

4. 행렬 A가 대칭행렬이면, N개의 실수 고윳값을 가지며, 고유벡터들이 서로 직교(orthogonal)이다.

5. 행렬 A가 대칭행렬이고 고윳값이 모두 양수이면 양의 정부호(positive definite)이고 역행렬이 존재한다. 역도 성립한다.

6. 행렬 A가 어떤 행렬 X의 분산행렬 $X^T X$이면 0 또는 양의 고윳값을 가진다.

7. 행렬 X가 풀랭크이면 분산행렬 $X^T X$는 역행렬이 존재한다.