행렬대수 1 - 과제 - 답안- 2019년 6월 4일 공고

시립대학교 통계학과

2019년 6월 14일

1. 다음은 단순회귀모형의 정규방정식이다.

$$\begin{bmatrix} n & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i x_i y_i \end{bmatrix}$$

위의 방정식을 풀어서 구한 회귀계수의 추정치를 $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ 이라고 하면 다음과 같이 주어짐을 보이시오.

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$$
$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}$$

[해답]

아래의 식에서는 다음의 공식을 이용하자.

$$\sum_i (x_i - \bar{x})^2 = \sum_i x_i^2 - n\bar{x}^2 = \sum_i x_i^2 - \frac{1}{n}(\sum_i x_i)^2$$

$$\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \sum_i x_i y_i - \frac{1}{n}(\sum_i x_i)(\sum_i y_i)$$

이제 방정식의 앞에 행렬의 역행렬을 구한다.

$$\begin{bmatrix} n & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \begin{bmatrix} \sum x_i^2 & -\sum x_i \\ -\sum x_i & n \end{bmatrix}$$
$$= \frac{1}{n[\sum (x_i - \bar{x})^2]} \begin{bmatrix} \sum x_i^2 & -\sum X_i \\ -\sum x_i & n \end{bmatrix}$$

따라서

$$\begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & \sum_i x_i^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i x_i y_i \end{bmatrix}$$
$$= \frac{1}{n[\sum (x_i - \bar{x})^2]} \begin{bmatrix} \sum x_i^2 & -\sum x_i \\ -\sum x_i & n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i x_i y_i \end{bmatrix}$$
$$= \frac{1}{n[\sum (x_i - \bar{x})^2]} \begin{bmatrix} (\sum x_i^2)(\sum_i y_i) - (\sum_i x_i)(\sum_i x_i y_i) \\ n\sum_i x_i y_i - (\sum_i x_i)(\sum_i y_i) \end{bmatrix}$$
$$= \frac{1}{n[\sum (x_i - \bar{x})^2]} \begin{bmatrix} (\sum x_i^2)(\sum_i y_i) - \frac{1}{n}(\sum_i x_i)^2(\sum_i y_i) + \frac{1}{n}(\sum_i x_i)^2(\sum_i y_i) - (\sum_i x_i)(\sum_i x_i y_i) \\ n\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \end{bmatrix}$$
$$= \frac{1}{n[\sum (x_i - \bar{x})^2]} \begin{bmatrix} (\sum_i y_i)[\sum_i (x_i - \bar{x})^2] - (\sum_i x_i)[\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})] \\ n\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} \bar{y} - \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum (x_i - \bar{x})^2}\bar{x} \\ \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \end{bmatrix}$$

2. 문제 [1]에서 회귀계수의 추정치를 유일하게 구할 수 없는 경우는 어떤 경우인가?

   [답안] 방정식의 앞에 행렬의 행렬식이 0인 경우이다. 즉 $\sum (x_i - \bar{x})^2 = 0$ 인 경우이며 이는 모든 x_i들이 같은 값을 가지는 경우이다.

3. 다음은 중회귀분석에서 나오는 정규방정식이다. 행렬 $\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X}$가 정칙행렬이라고 하자.

$$\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{X}^t\boldsymbol{y} \tag{1}$$

위의 행렬식에서 각 벡터와 행렬의 차원은 다음과 같다.

- $\boldsymbol{y}$: $n \times 1$
- $\boldsymbol{X}$: $n \times (p+1)$
- $\boldsymbol{\beta}$: $(p+1) \times 1$
- $\boldsymbol{e}$: $n \times 1$

(a) 최소제곱법에 의한 회귀계수 추정량 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$을 구하시오.

[답안]

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{y}$$

(b) (a)에서 구한 회귀계수 추정량 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$을 이용하여 아래와 같이 예측값(prediction) 벡터 $\hat{\boldsymbol{y}}$를 정의하자. $\hat{\boldsymbol{y}}$을 행렬 $\boldsymbol{X}$와 $\boldsymbol{y}$로 나타내시오.

[답안]

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \hat{E}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{y}$$

(c) 행렬 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}$ 가 멱등행렬임을 보이시오

[답안]

$$\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t = \boldsymbol{P}$$

(d) 두 벡터 $\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 와 $\hat{\boldsymbol{y}}$가 직교함을 보이시오.

[답안]

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{y}}^t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) &= (\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{y})^t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{y}) \\
&= \boldsymbol{y}^t(\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t)(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t)\boldsymbol{y} \\
&= \boldsymbol{y}^t\boldsymbol{P}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{P})\boldsymbol{y} \\
&= \boldsymbol{y}^t(\boldsymbol{P} - \boldsymbol{P}\boldsymbol{P})\boldsymbol{y} \\
&= \boldsymbol{y}^t(\boldsymbol{P} - \boldsymbol{P})\boldsymbol{y} \\
&= 0
\end{aligned}$$

(e) 잔차제곱합 $S(\hat{\boldsymbol{\beta}})$을 $\boldsymbol{y}$의 이차형식 $\boldsymbol{y}^t\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}$ 형태로 나타낼 때 행렬 $\boldsymbol{A}$는 구하시오.

$$S(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})^t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \boldsymbol{y}^t\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}$$

[답안]

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})^t(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) &= [(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{P})\boldsymbol{y}]^t(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{P})\boldsymbol{y} \\ &= \boldsymbol{y}^t(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{P})(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{P})\boldsymbol{y} \\ &= \boldsymbol{y}^t(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{P})\boldsymbol{y}\end{aligned}$$

(f) (e)에서 구한 행렬 $\boldsymbol{A}$ 의 계수는 얼마인가?

[답안]

$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{P}$ 는 멱등행렬이다. 따라서 $r(\boldsymbol{A}) = tr(\boldsymbol{A})$

$$\begin{aligned}tr(\boldsymbol{A}) &= tr(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{P}) \\ &= tr(\boldsymbol{I}_n) - tr(\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t) \\ &= n - tr((\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X}) \\ &= n - tr(\boldsymbol{I}_{p+1}) \\ &= n - (p+1)\end{aligned}$$

4. 다음에 주어진 4×3 행렬 $\boldsymbol{A}$의 QR 분해를 구하시오.

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

[답안]

4×3 행렬 $\boldsymbol{A}$의 각 열을 다음과 같이 3개의 열벡터로 놓자.

$$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{a}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{2}$$

위의 벡터 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$에 대하여 Gram–Schmidt 방법을 적용해보자.

- $i = 1$. 먼저 $\|\tilde{\boldsymbol{q}}_1\| = \|\boldsymbol{a}_1\| = 1$이므로 첫번째 벡터 $\boldsymbol{q}_1$를 만든다.

$$\boldsymbol{q}_1 = \tilde{\boldsymbol{q}}_1 / \|\tilde{\boldsymbol{q}}_1\| = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- $i = 2$. 이제 두번째 직교벡터 $\boldsymbol{q}_2$를 만들자. $\boldsymbol{q}_1^t \boldsymbol{a}_2 = 1$이므로

$$\tilde{\boldsymbol{q}}_2 = \boldsymbol{a}_2 - (\boldsymbol{q}_1^t \boldsymbol{a}_2)\boldsymbol{q}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - 1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

  그리고 $\|\tilde{\boldsymbol{q}}_2\| = 1$이므로

$$\boldsymbol{q}_2 = \tilde{\boldsymbol{q}}_2 / \|\tilde{\boldsymbol{q}}_2\| = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- $i = 3$ 마지막으로 $\boldsymbol{q}_1^t \boldsymbol{a}_3 = 1$, $\boldsymbol{q}_2^t \boldsymbol{a}_3 = 2$ 이므로

$$\tilde{\boldsymbol{q}}_3 = \boldsymbol{a}_3 - (\boldsymbol{q}_1^t \boldsymbol{a}_3)\boldsymbol{q}_1 - (\boldsymbol{q}_2^t \boldsymbol{a}_3)\boldsymbol{q}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} - 1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

  또한 $\|\tilde{\boldsymbol{q}}_3\| = \sqrt{5}$이므로

$$\boldsymbol{q}_3 = \tilde{\boldsymbol{q}}_3 / \|\tilde{\boldsymbol{q}}_3\| = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/\sqrt{5} \\ 2/\sqrt{5} \end{bmatrix}$$

앞의 예제에서 구한 직교벡터를 그대로 이용하면 $\boldsymbol{Q}$는 쉽게 구해진다.

$$\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{5} \\ 0 & 0 & 2/\sqrt{5} \end{bmatrix}$$

또한 식 (??)에 주어진 공식을 이용하면 행렬 $\boldsymbol{R}$은 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} \|\tilde{\boldsymbol{q}}_1\| & \boldsymbol{a}_2^t\boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{a}_3^t\boldsymbol{q}_1 \\ 0 & \|\tilde{\boldsymbol{q}}_2\| & \boldsymbol{a}_3^t\boldsymbol{q}_2 \\ 0 & 0 & \|\tilde{\boldsymbol{q}}_3\| \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & \sqrt{5} \end{bmatrix}$$

5. 2차원 열벡터 $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2)^t$은 3차원 열벡터 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)^t$의 함수로서 다음과 같이 정의된다.

$$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^2 + x_1 x_2 + x_3^2 \\ \log(x_1 x_2) + \exp(-x_3) \end{bmatrix}$$

벡터 $\boldsymbol{y}$를 벡터$\boldsymbol{x}$로 미분한 행렬 $\frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}}$ 을 구하시오

[답안]

$$
\frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_1} \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_3} & \frac{\partial y_2}{\partial x_3} \end{bmatrix}
$$

$$
= \begin{bmatrix} 2x_1 + x_2 & 1/x_1 \\ x_1 & 1/x_2 \\ 2x_3 & -\exp(-x_3) \end{bmatrix}
$$

6. 다음 행렬의 특이값 분해를 구하시오.

$$
\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}
$$

[답안]

먼저 $\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}$의 고유값을 구하면 $\lambda_1 = 45$ 와 $\lambda_2 = 5$가 구해진다. 따라서 특이값은 다음과 같이 주어진다.

$$
\sigma_1 = \sqrt{\lambda_1} = 3\sqrt{5}, \quad \sigma_2 = \sqrt{\lambda_2} = \sqrt{5}
$$

벡터 $\boldsymbol{v}_1$과 $\boldsymbol{v}_2$는 $\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}$의 정규직교 고유벡터로 주어지면 다음과 같다.

$$
\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{bmatrix}
$$

벡터 $\boldsymbol{u}_1$과 $\boldsymbol{u}_2$ 는 다음과 같이 구한다.

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u}_1 &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1/\sigma_1 \\
&= \begin{bmatrix} 1/\sqrt{10} \\ 3/\sqrt{10} \end{bmatrix} \\
\boldsymbol{u}_2 &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2/\sigma_2 \\
&= \begin{bmatrix} 3/\sqrt{10} \\ -1/\sqrt{10} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

따라서 행렬 $\boldsymbol{A}$의 특이값분해는 다음과 같이 주어진다.

$$
\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^t = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{10} & 3/\sqrt{10} \\ 3/\sqrt{10} & -1/\sqrt{10} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3\sqrt{5} & 0 \\ 0 & \sqrt{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{bmatrix}^t
$$

7. 교재연습 문제 9.2 (p197)