

실대칭 행렬의 고유쌍에 대한 수치해법

최 성[†] · 조 영 식^{††} · 백 청 호^{†††}

요 약

사회과학 분야에 응용되는 고유치 문제의 대상 행렬은 실대칭 행렬인 경우가 대부분이다. 또한, 이 분야에서 고유치 문제는 데이터에 대한 잠재 구조를 파악하기 위해, 절대치의 크기 순으로 2~4개의 고유쌍만을 필요로 하는 경우가 대부분이다. 컴퓨터에 의한 수치 계산으로 고유쌍을 구하는 방법들은 행렬에 대한 계산이기 때문에 마무리 오차의 문제가 필연적으로 대두된다. 본 논문은, 실대칭 행렬에 대해서 역수법을 이용하여, 절대치가 큰 순서로 필요한 만큼의 고유쌍을 구하는 수치해법에 관하여 논술한 것으로서, 고유쌍 전체를 구하는 기존의 방법들에 비해서 계산 횟수를 줄일 수 있다는 이점이 있다.

Numerical Method for Eigen Pairs of a Real Valued Symmetric Matrix

Seong Choi[†] · Young Sik Cho^{††} · Cheong Ho Baek^{†††}

ABSTRACT

In the most cases of eigen value problems in the social sciences, the object matrix to analyze is real-valued symmetric matrix. And many cases of eigen value problems in this field needs 2~4 eigen pairs according to the magnitude of their absolute values. The methods to obtain eigen pairs by numerical computation using computer, we would face the problem of round off error because matrix computation needs a number of calculations. In this paper, an algorithm which make us to get some needed eigen pairs according to the magnitude of their absolute values is designed. And in this algorithm, the power method is used to obtain some eigen pairs. This algorithm is expected to be effective by the reduction of the number of calculations.

1. 서 론

L. Guttman이 고유치(latent root; eigen value)를 이용하여 짝비교와 등급 순위의 수량화에 관한 논문[1]을 발표한 이래, 행렬의 고유치 문제는 선형변환의 이론에서 매우 중요하게 취급되어 왔을 뿐만 아니라 자연과학이나 사회과학의 여러 분야에서도 광범하게 이용되어 왔다. 예를 들면,

- a) 연립 미분방정식의 해
 - b) 인구 성장 모형의 분석
 - c) 행렬의 역급수 계산
 - d) 선형변환의 대각화
- e) 2변수와 3변수의 2차 형식 그래프 작성 및 단순화 등에 응용된다[2]. 고유치가 미분방정식에 이용되는 예로서 행렬 A와 열벡터 x_k 에 관한 제차방정식(difference equation)

$$x_k = Ax_{k-1} \quad (k = 1, 2, 3, 4, 5, \dots)$$

과 같은 벡터의 수열은 인구의 성장 상태, 생태계, 비행

† 종신회원: 남서울 산업대학교 교수
 †† 정 회 원: 한림전문대학교 전자계산학과 전임강사
 ††† 종신회원: 강원대학교 전자계산학과 교수
 논문접수: 1997년 1월 15일, 심사완료: 1997년 8월 23일

물체의 레이더 추적, 화학적 변화 과정의 디지털 통제 등과 같은 것들을 나타내기 위한 수학적 모형을 만들려고 할 때 나타나는데, 이러한 문제는 고유치를 이용하면 쉽게 해결할 수 있다. *Marcov* 과정과 관계되는 응용 분야의 문제도 고유치 문제로서 해결할 수 있다[2].

고유쌍은 과거에 실제적으로 공학분야에서 용력에 관한 문제 등에 주요한 역할을 해왔으며, 현대에 들어와서는 사회과학 분야에서 데이터의 구조를 파악하는 분야에 폭넓게 이용되고 있으며, 일본 등의 외국에서는 계량심리학 분야에서의 데이터 분석에 필수적인 요소로 응용되고 있다[3]. 특히 명의 척도(nominal scale)나 순위 척도(ordinal scale)로 작성된 이른바 질적 데이터(qualitative data)의 분석 방법으로서 프랑스의 J. P. Benzécri가 제안한 대응분석법(correspondence analysis)[4], 일본의 C. Hayashi(林知己未)가 제안한 수량화이론(quantification theory)[5] 및 캐나다의 S. Nishisato(西里静彦)가 제안한 쌍대척도법(dual scaling)[6] 등의 이론은 모두 고유치 문제이다[7]. 본 논문에서는 이러한 분야의 데이터의 구조 파악에 이용되는 고유치 문제에서 자주 이용하는, 실대칭 행렬(real-valued symmetric matrix)에 대한 필요한 만큼의 고유쌍을 구하는 방법에 대하여 연구한다.

사회과학 분야에서의 데이터 구조 파악에 이용되는 고유치 문제는 그 대상이 대부분 실대칭 행렬이다. 실대칭 행렬의 고유쌍을 모두 구하는 기존의 수치해법으로는 일반적으로 Jacobi의 방법이 많이 이용된다. 또 다른 수치해법으로는 행렬을 Hessenberg 행렬로 변환한 후 Krylov의 방법으로써 특성다항식을 이용하는 고유치를 구하는 방법도 있다. Hessenberg행렬로 만드는 방법에는 Householder 변환이 특히 유효한 것은 이미 알려져 있다[2].

Jacobi의 방법은 직교행렬(좌표축의 회전변환 행렬)을 이용한 상사변환(similarity transformation)을 통해 대각행렬로 변환시키는 방법으로서, 주어진 실대칭행렬의 고유쌍을 모두 구할 수 있는 반복법이다[2]. 그러나 이 방법은 실제의 컴퓨터에 의한 수치해법, 특히 PC를 이용하는 경우에는 계산 결과가 마무리 오차(round-off error)의 영향을 받는 경우가 많다. 특히 n 차 실대칭 행렬의 고유쌍을 구하는 경우에는, 차수 n 이 높아짐에 따라 연산 횟수가 기하학적으로 증

가하기 때문에 마무리오차의 심각성은 절대적이다. 그러나, 사회과학 분야의 데이터 잠재구조 파악에 관련된 고유치 문제 응용 분야에서는 특별한 경우를 제외하고는 대개 2~4개의 고유치만을 구하는 경우가 많다. 따라서 본 논문에서는 멱수법을 이용하여 절대값 크기 순으로 필요한 갯수 만큼의 고유쌍을 구하는 수치해법을 제안하고자 한다.

2. 본 론

멱수법(power method)은 하나의 행렬에 대하여 절대치가 가장 큰 고유치와 그에 대응하는 고유벡터를 구하는 반복적인 수치해법이다. 본 논문에서는 이 방법을 이용해서 실대칭 행렬에 대하여 고유치의 절대치 크기 순으로 필요한 갯수 만큼의 고유쌍을 구하는 알고리즘에 대하여 연구하고자 한다. 연구에 필요한 몇 가지 정의 및 정리를 먼저 기술한다.

<정의 1> n 차 정방행렬 A , 열벡터 u , 스칼라 λ 에 대하여

$$Au = \lambda u \quad (1)$$

인 관계가 있을 때, λ 를 A 의 고유치, u 를 고유치 λ 에 대응하는 A 의 고유벡터라고 한다. λ 와 u 를 고유쌍(eigen pair)이라고 한다.

(1)식에서

$$(A - \lambda E)u = 0 \quad (E는 n차의 단위행렬, 0는 영벡터) \quad (2)$$

가 유도되며, $u \neq 0$ 인 λ 와 u 를 구하는 것이 고유치 문제이다. 이것은 주어진 행렬 A 에 대하여, 어떤 열벡터 u 의 행렬 A 에 의한 변환이 열벡터 u 에 대한 스칼라(λ) 곱과 같게되는 열벡터 u 와 스칼라 λ 를 구하는 문제이다. (2)식에서 $u \neq 0$ 인 해가 존재할 완전조건은 $\det(A - \lambda E) = 0$ 이다[7]. 즉, $A - \lambda E$ 는 비정칙행렬(singular matrix)이다. 주어진 행렬 A 에 대하여 $\det(A - \lambda E) = 0$ 을 고유치 λ 를 구하기 위한 고유방정식 또는 특성방정식이라고 한다. n 차 정방행렬 A 에 대하여 $\det(A - \lambda E) = 0$ 은 λ 에 관한 n 차 방정식이므로 고유치는 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$ 의 최대 n 개가 존재한다. n 차 방정식에 대한 수치해법은 여러 방법들이 고안되어 있다. 그러나 고유쌍을

구하는 수치해법에서의 문제점은, $\det(A - \lambda E) = 0$ 로 표현되는 λ 에 대한 n 차의 고유방정식을 일반형인

$$a_1\lambda^n + a_2\lambda^{n-1} + a_3\lambda^{n-2} + \dots + a_{n+1} = 0$$

으로 표현할 때 계수 a_1, a_2, \dots, a_{n+1} 을 수치적으로 구하기가 곤란하다는 점이다. 이 문제점에 대해서는 일반적으로 행렬 A 를 Hessenberg행렬로 변환하여 순환 공식을 써서 고유방정식의 계수를 구하는 Krylov의 방법이 이용되고 있다[2]. 이 방법으로서는 방정식의 근을 구하는 수치해법을 이용하여 근(고유치)을 구할 수는 있으나 고유치 각각에 대응하는 고유벡터를 구하기 위해서는 다시 고유치 각각에 대해서 n 원 연립방정식을 풀어야 한다. 따라서 고유치와 그에 대응하는 고유벡터를 구하는 과정에 요구되는 연산의 횟수가 많아서 필연적으로 마무리 오차의 영향을 많이 받게 되어 근사해의 정확도가 낮아지게 된다.

사회과학 분야에서 고유쌍이 요구되는 데이터 분석은 그 대상 행렬이 실대칭 행렬인 경우가 많으며, 특별한 경우를 제외하고는 절대치가 큰 고유치부터 차례로 2~3개의 고유쌍을 이용하는 경우가 많다.

[정리 1] n 차 실대칭 행렬 A 의 고유치는 모두 실수이다[2].

증명. n 차 실대칭 행렬 A 에 대하여 $Au = \lambda u, u \neq 0$ 라고 할 때 λ 가 실수임을 보이면 된다. u 의 공액벡터(conjugate vector)를 \bar{u} 라 하면 $Au = \lambda u$ 이므로

$$\bar{u}'(Au) = \bar{u}'(\lambda u) = \lambda(\bar{u}'u) \tag{3}$$

Au 는 벡터이고 $\bar{u}'(Au)$ 는 스칼라이므로 $\bar{u}'(Au) = (Au)'\bar{u}$ 이다. 따라서 (3)식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\lambda \bar{u}'u = \bar{u}'(Au) = (Au)'\bar{u} = u'A'\bar{u} = \bar{u}'A\bar{u} \tag{4}$$

끝 부분의 등식은 A 가 대칭 행렬이므로 $A = A'$ 이기 때문이다. 또 A 는 실행렬이므로 $A\bar{u} = \lambda\bar{u}$ 이다. 따라서 (4)식에서 다음을 얻는다.

$$\lambda \bar{u}'u = \lambda \bar{u}'\bar{u} \tag{5}$$

$u \neq 0$ 이므로 $\bar{u}'u$ 는 0이 아니고 $\bar{u}'u = u'\bar{u}$ 이므로 (5)식이 성립하기 위해서는 $\lambda = \bar{\lambda}$ 이어야 한다. 즉, λ 는 실수이다. 따라서 실대칭 행렬의 고유치는 모두 실수이다.

[정리 2] n 차 정사각행렬 A 의 서로 다른 고유치 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_k$ 에 대응하는 고유벡터를 $u_1, u_2, u_3, \dots, u_k$ 라 하자. 즉,

$$Au_i = \lambda_i u_i \quad (i = 1, 2, \dots, k) \quad (k \leq n)$$

이때 $\{u_1, u_2, u_3, \dots, u_k\}$ 는 1차독립이다[2].

증명. $u_1 \neq 0$ 이므로 $\{u_1\}$ 은 1차독립이다. 만일 $\{u_1, u_2, u_3, \dots, u_k\}$ 가 1차 종속이라면

a) $S_1 = \{u_1, u_2, u_3, \dots, u_{m-1}\}$ 은 1차독립이고

b) $S_2 = \{u_1, u_2, u_3, \dots, u_m\}$ 은 1차 종속

이 되는 정수 $m(m \leq n)$ 이 존재한다.

S_2 는 1차종속이므로

$$c_1 u_1 + c_2 u_2 + \dots + c_{m-1} u_{m-1} + c_m u_m = 0 \tag{6}$$

인 모두는 0이 아닌 스칼라 c_1, c_2, \dots, c_m 이 존재한다. 이때 $c_m \neq 0$ 이다.(만일 $c_m = 0$ 이면 (6)식은 S_1 이 1차종속임을 의미하므로 a)에 모순이다)

(6)식의 양변에 A 를 곱하고 $Au_i = \lambda_i u_i$ 임을 고려하면

$$c_1 \lambda_1 u_1 + c_2 \lambda_2 u_2 + \dots + c_{m-1} \lambda_{m-1} u_{m-1} + c_m \lambda_m u_m = 0 \tag{7}$$

(6)식의 양변에 λ_m 을 곱하면

$$c_1 \lambda_m u_1 + c_2 \lambda_m u_2 + \dots + c_{m-1} \lambda_m u_{m-1} + c_m \lambda_m u_m = 0 \tag{8}$$

(8)-(7)에서

$$c_1(\lambda_m - \lambda_1)u_1 + c_2(\lambda_m - \lambda_2)u_2 + \dots + c_{m-1}(\lambda_m - \lambda_{m-1})u_{m-1} = 0$$

그런데 $\{u_1, u_2, u_3, \dots, u_{m-1}\}$ 은 1차독립이므로

$$c_j(\lambda_m - \lambda_j) = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, m-1)$$

그러나 $\lambda_m - \lambda_j \neq 0 (j = 1, 2, \dots, m)$ 이므로 $c_j = 0 (j = 1,$

2, ..., m-1)이어야 한다. 따라서 (6)식에서

$$c_m u_m = 0$$

그런데 $c_m \neq 0$ 이므로 $u_m = 0$ 이다. 그러나 u_m 은 고유 벡터이므로 $u_m \neq 0$ 이다. 이러한 모순은 S_2 가 1차종속 인 $m(m \leq n)$ 이 존재한다고 가정하였기 때문이다. 따라서 $\{u_1, u_2, u_3, \dots, u_{m-1}\}$ 은 1차독립이다.

<계> n차 실대칭 행렬 A의 고유치를

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > \dots > |\lambda_n|$$

라 하면 그에 대응하는 고유벡터 $u_1, u_2, u_3, \dots, u_n$ 는 1차독립이다[2].

<정의 2> n차원 벡터 공간 V^n 에서 1차독립인 n개의 벡터 $u_1, u_2, u_3, \dots, u_n$ 은 n차원 벡터 공간 V^n 의 기저 (base)라고 한다.

벡터 $u_1, u_2, u_3, \dots, u_n$ 이 n차원 벡터 공간 V^n 의 기저이면 V^n 에서의 임의의 n차원 벡터 v_0 에 대하여

$$v_0 = c_1 u_1 + c_2 u_2 + c_3 u_3 + \dots + c_n u_n$$

와 같이 $u_1, u_2, u_3, \dots, u_n$ 의 1차결합으로 나타낼 수 있는, 모두는 0이 아닌 스칼라 $c_1, c_2, c_3, \dots, c_n$ 가 존재한다는 의미이다.

n차 실대칭 행렬 A의 고유치에 대하여

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > \dots > |\lambda_n|$$

라 하고, 그에 대응하는 고유벡터를

$$u_1, u_2, u_3, \dots, u_n$$

라 하자. 그러면 [정리 2]와 <정의 2>에 의하여 고유 벡터 $u_1, u_2, u_3, \dots, u_n$ 은 n차원 벡터 공간 V^n 의 기저이다. 이러한 실대칭 행렬 A의 절대치 최대인 고유치와 그에 대응하는 고유벡터를 구하는 방법인 멱수법에 대한 이론적인 배경은 다음과 같다.

임의의 n차원 벡터 v_0 에 대하여 계차방정식을

$$v_{k+1} = Av_k \quad (k=0, 1, 2, \dots, n)$$

라 하면,

$$\begin{aligned} v_1 &= Av_0 = Ac_1 u_1 + Ac_2 u_2 + Ac_3 u_3 + \dots + Ac_n u_n \\ &= c_1 \lambda_1 u_1 + c_2 \lambda_2 u_2 + c_3 \lambda_3 u_3 + \dots + c_n \lambda_n u_n \\ v_2 &= Av_1 = Ac_1 \lambda_1 u_1 + Ac_2 \lambda_2 u_2 + Ac_3 \lambda_3 u_3 + \dots + Ac_n \lambda_n u_n \\ &= c_1 \lambda_1^2 u_1 + c_2 \lambda_2^2 u_2 + c_3 \lambda_3^2 u_3 + \dots + c_n \lambda_n^2 u_n \\ &\dots\dots\dots \\ v_k &= A^k v_1 = c_1 \lambda_1^k u_1 + c_2 \lambda_2^k u_2 + c_3 \lambda_3^k u_3 + \dots + c_n \lambda_n^k u_n \\ &= \lambda_1^k (c_1 u_1 + c_2 (\lambda_2/\lambda_1)^k u_2 + \dots + (\lambda_n/\lambda_1)^k u_n) \end{aligned}$$

이 된다. 이때 $|\lambda_i/\lambda_1| < 1$ ($i=2, 3, 4, \dots, n$)이므로

$$\lim_{k \rightarrow \infty} v_k = c_1 \lambda_1^k u_1$$

이고,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} v_{k+1} = c_1 \lambda_1^{k+1} u_1$$

이다. 따라서

$$v_{k+1} = \lambda_1 v_k$$

임을 알 수 있다. 또,

$$v_{k+1} = Av_k$$

이므로

$$Av_k = \lambda_1 v_k$$

에서 λ_1 은 A의 절대치 최대의 고유치, v_k 는 그에 대응하는 고유벡터임을 알 수 있다.

[정리 3] 행렬 A의 고유치 λ_i 에 대응하는 고유벡터 v_i 의 스칼라곱인 αv_i 도 λ_i 에 대한 고유벡터이다.

증명. A의 고유쌍을 λ, u 라 하면 $Au = \lambda u$. 그런데

임의의 스칼라 α 에 대하여 $y = \alpha u$ 라 할 때 y 에 대해서도 $Ay = \lambda y$ 의 관계가 성립한다. 따라서 y (고유벡터의 스칼라곱)도 A 의 고유벡터이다.

고유벡터의 표현 방법은 정규화하거나 또는 성분 에 대한 절대치의 최대값이 1인 되도록 하여 표현하는 방법 등이 있다.

<정의 3> 벡터 v_k 에 대하여

$$\gamma_k = v_k^t v_{k+1} / v_k^t v_k$$

을 Rayleigh 상(Rayleigh quotient)이라 한다[2, 8].

이때 $\lambda_1 = \lim_{k \rightarrow \infty} \gamma_k$ 이다.

n 차 실대칭 행렬 A 의 고유치를

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|$$

라 하고 각각에 대응하는 고유 벡터를

$$u_1, u_2, \dots, u_n \quad (\text{단, } |u_i| = 1, i = 1, 2, \dots, n)$$

이라 하면 $A - \lambda_1 u_1 u_1^t$ 의 고유치는

$$0, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$$

이다[9]. 따라서 $A - \lambda_1 u_1 u_1^t$ 에 역수법을 적용하면 A 에서 절대치의 크기가 두번째인 고유쌍을 구할 수 있게 된다. 이상의 방법을 반복하면 필요한 만큼의 고유쌍을 그 크기 순으로 구할 수 있는 알고리즘을 다음과 같이 작성할 수 있다.

```

for i=1 to m step 1      (m:구하려고 하는 고유쌍의 갯수)
  초기벡터  $v_0$ 를 정한다.
   $v_0$ 를 정규화한다.
   $v_1 = Av_0$ 
   $v_1$ 을 정규화한다.
   $\alpha = v_0^t v_1 / v_0^t v_0$ 
  for j=1 to n step 1    (n:반복 횟수)
     $v_{j+1} = Av_j$ 
     $\lambda_j = v_j^t v_{j+1} / v_j^t v_j$ 
  
```

```

if (| $\alpha - \lambda_j$ | <  $\epsilon$ ) then  ( $\epsilon$ 는 허용오차)
  print  $\lambda$                 (절대치 최대 고유치)
  print  $v_j$               (고유벡터)
  goto PARA_AUX
else
   $\alpha = \lambda$ 
endif
endfor
PARA_AUX
   $A = A - \lambda v_j v_j^t$ 
endfor

```

$v_{k+1} = \lambda_1 v_k$ 이고 고유벡터의 스칼라곱도 고유벡터이며 정규화된 v_k, v_{k+1} 에 대해서는 v_k, v_{k+1} 이므로 고유벡터는 v_{k+1} 로 해도 관계는 없다.

3. 결 론

컴퓨터에 의한 수치해법에서 가장 문제가 되는 것은 마무리 오차이다. 특히 행렬이나 벡터에 대한 수치계산에서의 마무리오차는 계산 결과에 심각한 영향을 주는 경우가 많다. 본 논문에서의 알고리즘에 대하여 실제 문제의 적용에서 마무리오차의 영향이 큰 경우에는 초기벡터 v_0 나 허용오차 ϵ 를 조정하는 것도 하나의 방법으로 생각된다.

절대치의 크기 순으로 필요한 몇 개의 고유쌍만을 구하는 데는, 본 논문에서 제안한 알고리즘이 모든 고유쌍을 구하는 Jacobi의 방법 등 보다는 유효하리라 생각된다. 고유치의 응용 문제의 실제에서는 고유쌍에 대한 수치의 정확도도 중요하다. 그러나, 컴퓨터를 이용하는 모든 수치해법에서 야기되는 공통된 문제점으로서, 맨먼저 얻어진 근사해에 포함된 오차가 그 다음에 연속되는 계산에 전파되는 전파 오차에 관한 문제이다. 본 논문에서 제안한 알고리즘에는 전파 오차에 관한 사항은 고려되지 않았다.

참 고 문 헌

[1] Guttman, L., "An approach for quantifying paired comparison and rank order," Annals of Mathematical Statistics, Vol. 17, 1946.

- [2] Lee W. Johnson, R. Dean Ross and Jimmy T. Arnold, Introduction to LINEAR ALGEBRA, 3rd ed., Addison-Wesley Publishing Company, 1993.
- [3] 柳井晴夫, 岩坪秀一, 石塚智一, 人間行動の計量分析, 東京大學出版會, 1990.
- [4] Lebart, L., Morineau, A. and Warwick, K. M., Multivariate Descriptive Statistical Analysis, John Wiley & Sons, 1984.
- [5] 岩坪秀一, 數量化法の基礎, 朝倉書店, 1987.
- [6] 西里靜彦, 質的データの數量化, 朝倉書店, 1987.
- [7] 盧炯晉, 多變量解析, 石井, pp. 186-192, 1990.
- [8] Lee W. Johnson and R. Dean Riess, Numerical Analysis, Addison-Wesley Publishing Company, 1982.
- [9] 藤澤偉作, 多變量解析法, 現代數學社, pp. 7-8, 1991.



최 성

1976년~1993년 한국생산성본부
OA추진 사무국장
1980년~1983년 연세대학교 산
업대학원 전자계산과 졸
업
1994년~현재 강원대학교 전자
계산학과 박사과정 수료

관심분야: ERP, CALS/EC, Data Base, Multimedia,
AI, 정보통신 등



조 영 식

1992년~1994년 강원대학교 전
자계산학과 졸업(석사)
1995년~현재 강원대학교 전자
계산학과 박사과정 수료
1997년 9월~현재 한림전문대학
전자계산학과 전임
강사

관심분야: 소프트웨어공학, 멀티미디어, 지식추론 등



백 청 호

1968년 2월 서울대학교 수학교
육과 졸업(이학사)
1981년 8월 성균관대학교 경영
대학원 전자자료처
리학과(경영학 석사)
1992년 8월 경기대학교 대학원
경영학과(경영학
박사)

1984년 2월~현재 강원대학교 전자계산학과 교수
1994년~1995년 캐나다 토론토대학교 객원교수
관심분야: 수치해석, 알고리즘, 계산복잡도, 전산통계