응용통계연구 제 **20**권 2호, 2007년, pp. 373-385

선형 모형에서 모수 추정을 위한 일반화 역행렬 및 SAS IML 이론에 관한 연구*

최규정[1)] 강관중[2)] 박병전[3)]

요 약

선형모형에서 최소자승법에 의한 정규방정식의 해는 유일하지 않은 경우도 있는데 문헌에 따르면 일반화 역행렬을 정의하여, 그 해를 SAS IML로 취급하고 있다. 본 논문에서는 이것에 대한 이론을 보다 체계화하여 교육 및 연구에 도움을 주고자 하는데 그 목적이 있다.

주요용어: 정칙행렬, 비정칙행렬, 대각행렬, 대칭행렬, 일반화 역행렬.

1. 서론

주어진 n차 정방행렬 A에 대하여 $AB = BA = I_n$(단, I_n 은 n차 단위행렬)인 B가 존재하면 B를 A의 역행렬이라 하고 $B = A^{-1}$로 표시하고 이 때 A를 정칙행렬이라 한다.

일반적으로 미지모수 β에 관한 선형모형

$$y = X\beta + \epsilon \tag{1.1}$$

의 최소자승법에 의한 추정량 $\mathbf{b}$의 정규방정식인 연립방정식

$$A\mathbf{b} = \mathbf{c}, \ , \ \mathrm{A} = \mathrm{X}^t\mathrm{X}, \ \mathbf{c} = \mathrm{X}^t\mathrm{y} \tag{1.2}$$

의 해가 유일하게 존재하기 위한 필요충분조건은 A가 정칙행렬이며 식 (1.2)의 유일한 해는

$$\mathbf{b} = A^{-1}\mathbf{c}$$

이다. 일반적으로 $n \times p$ 행렬 X에 대하여 $A = X^tX$가 비정칙인 정방행렬인 경우에

$$\mathrm{rank(A) = rank(A, \mathbf{c})}$$

* 이 연구는 조선대학교 연구비에 의해서 수행됨(2007).

1) (501-759) 광주광역시 동구 서석동 375번지, 조선대학교 컴퓨터통계학과, 교수
E-mail: kjchoi@chosun.ac.kr
2) (604-714) 부산광역시 사하구 하단동 840번지, 동아대학교 수학과, 교수
E-mail: kjkang@dau.ac.kr
3) (501-759) 광주광역시 동구 서석동 375번지, 조선대학교 컴퓨터통계학과, 교수
E-mail: pbj5446@hanmail.net

를 만족하면 식 (1.2)는 부정해를 갖는다. 이 때 모수 β의 추정량 $\mathbf{b}$는 아래 정규방정식

$$\begin{aligned}(X^tX)\mathbf{b} &= X^ty = \mathbf{c} \\ A\mathbf{b} &= \mathbf{c}\end{aligned}$$

의 해이다. 여기에서 $A = X^tX$는 p차 대칭행렬이고 X^t는 X의 전치행렬이다. 이 논문에서 계속하여 X는 $n \times p$ 행렬이고 $A = X^tX$에 대하여

$$\mathrm{rank(A) = r < p}$$

라 가정한다. 또한, 일반화 역행렬 A^-와 X^-를 정의하고 이 일반화 역행렬들을 구하는 방법을 밝히려 한다.

정의 1.1 비정칙인 정방(대칭)행렬 A에 대하여 $AA^-A = A$인 A^-를 A의 일반화 역행렬이라 한다. 또, $n \times p$ 행렬 X 즉, 정방행렬이 아닌 X에 대하여 $XX^-X = X$인 $p \times n$ 행렬 X^-을 X의 일반화 역행렬이라 한다.

식 (1.2)의 양변 좌측에 AA^-을 곱하면

$$AA^-A\mathbf{b} = AA^-\mathbf{c}$$

이고 또,

$$A\mathbf{b} = A(A^-\mathbf{c})$$

이므로 최소제곱 추정량 $\mathbf{b}$는

$$\mathbf{b} = A^-\mathbf{c}$$

임을 알 수 있다.

2. 행렬의 분해

A는 p차 대칭행렬이므로 p개의 고유값을 갖는다. 또, $\mathrm{rank(A) = r}$이므로 0이 아닌 고유값은 r개 즉, $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$이고 나머지 $(p-r)$개의 고유값 즉, $\lambda_{r+1}, \ldots, \lambda_p$는 모두 0이다. 행렬 $V = (\mathbf{v_1}, \ldots, \mathbf{v_p})$는 고유(단위)벡터 $\mathbf{v}_i(i = 1, \ldots, p)$들로 구성된 행렬이고, 행렬 $V_1 = (\mathbf{v_1}, \ldots, \mathbf{v_r})$는 0이 아닌 고유값에 대응한 고유(단위)벡터 $\mathbf{v}_i(i = 1, \ldots, r)$ 들로 구성된 행렬이다. 이 때, $VV^t = V^tV = I_p$이므로 V는 p차 정규직교행렬이다. 그러나 $V_1^tV_1 = I_r$이나 $V_1V_1^t \neq I_P$이다.

정리 2.1 p차 대칭행렬 A의 서로 다른 고유값에 대응한 고유벡터들은 서로 직교한다(Bellman, 1997).

증명: λ_i, λ_j를 A의 서로 다른 고유값이라 하고 그 고유벡터를 각각 $\mathbf{v_i}, \mathbf{v_j}$라고 할 때 고유값과 고유벡터의 정의에 의하여

$$A\mathbf{v_i} = \lambda_i \mathbf{v_i} \tag{2.1}$$

이고

$$A\mathbf{v_j} = \lambda_j \mathbf{v_j} \tag{2.2}$$

이다. A가 대칭행렬이므로 식 (2.1)에서

$$(A\mathbf{v_i})^t = \mathbf{v_i}^t A = \lambda_i \mathbf{v_i}^t$$

을 얻고 이 식 양변 우측에 $\mathbf{v_j}$를 곱하면

$$\mathbf{v_i}^t A\mathbf{v_j} = \lambda_i \mathbf{v_i}^t \mathbf{v_j} \tag{2.3}$$

이다. 또, 식 (2.2)의 양변 좌측에 $\mathbf{v_i}^t$를 곱하면

$$\mathbf{v_i}^t A\mathbf{v_j} = \lambda_j \mathbf{v_i}^t \mathbf{v_j} \tag{2.4}$$

을 얻는다. 식 (2.3), (2.4)에서

$$\lambda_i \mathbf{v_i}^t \mathbf{v_j} - \lambda_j \mathbf{v_i}^t \mathbf{v_j} = (\lambda_i - \lambda_j)\mathbf{v_i}^t \mathbf{v_j} = 0$$

이다. 그런데 $\lambda_i \neq \lambda_j$이므로 $\mathbf{v_i}^t \mathbf{v_j} = 0$이다. 그러므로 두 고유벡터 $\mathbf{v_i}$와 $\mathbf{v_j}$는 서로 직교한다. □

정리 2.2 대칭인 정방행렬 A의 대각화는 항상 가능하다(Datta, 1995).

증명: A의 고유값을 $\lambda_1, \ldots, \lambda_p$라 하고 그 고유단위벡터들을 $\mathbf{v_1}, \ldots, \mathbf{v_p}$라면 정리 2.1에 의하여 서로 다른 고유값에 대응한 고유벡터들은 서로 직교한다. 그러므로 행렬 $V = (\mathbf{v_1}, \ldots, \mathbf{v_p})$는 정규직교행렬이다. 고유값과 고유벡터의 정의

$$A\mathbf{v_i} = \lambda_i \mathbf{v_i} (i = 1, \ldots, p)$$

에 의하여

$$\begin{aligned} AV &= (A\mathbf{v_1}, \ldots, A\mathbf{v_p}) = (\lambda_1 \mathbf{v_1}, \ldots, \lambda_p \mathbf{v_p}) \\ &= (\mathbf{v_1}, \ldots, \mathbf{v_p})\mathrm{diag}\{\lambda_1,\ \ldots,\ \lambda_p\} \\ &= VD_\lambda \qquad \text{단}, D_\lambda = \mathrm{diag}\{\lambda_1,\ \ldots,\ \lambda_p\} \end{aligned} \tag{2.5}$$

이다. V가 정규직교행렬이므로 $V^t = V^{-1}$이며 식(2.5)로부터 다음과 같이 대각화할 수 있다.

$$D_\lambda = V^{-1}AV = V^tAV.$$

p차 대칭행렬 A의 r개의 0이 아닌 고유값에 대한 대각행렬과 p개의 고유값에 대한 대각행렬을 다음과 같이 표시하기로 한다.

$$D_{1\lambda} = \text{diag}\{\lambda_1, \ldots, \lambda_p\}$$

$$D_\lambda = \text{diag}\{\lambda_1, \ldots, \lambda_p\} = \begin{pmatrix} D_{1\lambda} & O \\ O & 0 \end{pmatrix}.$$

□

정리 2.3 대칭행렬 $A = X^t X$는 다음과 같이 분해가능하다(Golub and Johnson, 1983)

1) $A = VD_\lambda V^t$.

2) $A = V_1 D_{1\lambda} V_1^t$.

증명:

1) 정리 2.2의 식 (2.5) $AV = VD_\lambda$에서 V는 정규직교행렬이므로

$$A = VD_\lambda V^{-1} = VD_\lambda V^t$$

이다.

2) 고유값과 고유벡터의 정의에 의하여

$$A = (V_1\ V_2) \begin{pmatrix} D^{-1}_{1\sqrt{\lambda}} & O \\ O & 0 \end{pmatrix} (V_1\ V_2)^t = (V_1 D_{1\lambda}\ 0)\ (V_1\ V_2)^t = V_1 D_{1\lambda} V_1^t$$

이다. 단, $V_2 = (v_{r+1}, \ldots, v_p)$는 0이 아닌 고유값에 대응한 고유단위벡터 $v_i(i = r + 1, \ldots, p)$로 구성된 $p \times (p-r)$ 행렬이고 $V_1'V_2 = 0$, $V_2'V_2 = I_{p-r}$이다. 한편 A의 양인 고유값 $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$에 의하여

$$D^{-1}_{1\sqrt{\lambda}} = \text{diag}\{1/\sqrt{\lambda_1},\ \ldots,\ 1/\sqrt{\lambda_r}\},\ D^{-1}_{\sqrt{\lambda}} = \begin{pmatrix} D^{-1}_{1\sqrt{\lambda}} & O \\ O & 0 \end{pmatrix}$$

라 나타낼 수 있으므로 $n \times p$ 행렬 X와 관련하여 U, U_1을

$$U = XVD^{-1}_{\sqrt{\lambda}} \tag{2.6}$$
$$U_1 = XV_1 D^{-1}_{1\sqrt{\lambda}} \tag{2.7}$$

라 두면 U는 $n \times p$행렬이고 U_1은 $n \times r$행렬이다. 정리 2.3과 $D^{-1}_{1\sqrt{\lambda}}$, $D^{-1}_{\sqrt{\lambda}}$의 정의에 의하여

$$\begin{aligned} U^tU &= (XVD_{\sqrt{\lambda}}^{-1})^t(XVD_{\sqrt{\lambda}}^{-1}) \\ &= D_{\sqrt{\lambda}}^{-1}(V^tAV)D_{\sqrt{\lambda}}^{-1} \\ &= D_{\sqrt{\lambda}}^{-1}D_{\lambda}D_{\sqrt{\lambda}}^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & 0 \end{pmatrix} \neq I_p \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_1^tU_1 &= (XV_1D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1})^t(XV_1D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1}) \\ &= D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1}V_1^t(X^tX)V_1D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1} \\ &= D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1}D_{1\lambda}D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1} = I_r \end{aligned}$$

을 얻는다.

□

정리 2.4 $n \times p$ 행렬 X는 다음과 같이 분해가능 하다(Horn and Johnson, 1985)

1) $X = UD_{\sqrt{\lambda}}V^t$.

2) $X = U_1D_{1\sqrt{\lambda}}V_1^t$.

단, $D_{1\sqrt{\lambda}} = \text{diag}\{\sqrt{\lambda}_1, \ldots, \sqrt{\lambda}_r\}$, $D_{\sqrt{\lambda}} = \begin{pmatrix} D_{1\sqrt{\lambda}} & O \\ O & 0 \end{pmatrix}$

증명:

1) 식 (2.6) $U = XVD_{\sqrt{\lambda}}^{-1}$의 양변 우측에 차례로 $D_{\sqrt{\lambda}}$와 V^t를 곱하면 $D_{\sqrt{\lambda}}^{-1}D_{\sqrt{\lambda}} = I_p$이고 $VV^t = I_p$이므로

$$\begin{aligned} UD_{\sqrt{\lambda}} &= XVI_p = XV \\ UD_{\sqrt{\lambda}}V^t &= XVV^t = XVI_p = X \end{aligned}$$

를 얻는다.

2) 식 (2.7) $U_1 = XV_1D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1}$의 양변 우측에 $D_{1\sqrt{\lambda}}$를 곱하면 $D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1}D_{1\sqrt{\lambda}} = I_r$이므로

$$U_1D_{1\sqrt{\lambda}} = XV_1I_r = XV_1$$

이고 다시 이 식의 양변 우측에 V_1^t를 곱하면

$$U_1D_{1\sqrt{\lambda}}V_1^t = XV_1V_1^t \tag{2.8}$$

이다. 한편 $V_1^t V_1 = I_r$이므로

$$XV_1 = XV_1 I_r = (XV_1 V_1^t)V_1$$

에서

$$X = XV_1 V_1^t \tag{2.9}$$

을 얻는다. 식 (2.8)과 (2.9)에서

$$X = U_1 D_{1\sqrt{\lambda}} V_1^t$$

을 얻는다.

□

3. 일반화 역행렬

일반적으로 $n \times p(n \neq p)$ 행렬 X의 역행렬 X^{-1}와 $A = X^t X$에서 rank(A) = r < p인 경우 대칭행렬 A의 역행렬 A^{-1}는 존재하지 않으므로 일반화 역행렬 X^-와 A^-를 구하는 방법을 밝히려 한다.

정리 3.1 X의 일반화역행렬 X^-는 다음과 같이 분해가능하다(Strange, 1988).

1) $X^- = VD_{\sqrt{\lambda}}^{-1} U^t$: M. Penrose's G-inverse of X.

2) $X^- = V_1 D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1} U_1^t$: M. Penrose's G-inverse of X.

3) $X^- = VD_2^{-1} U^t$: G-inverse of X.

단, $D_{1\lambda}^{-1} = \mathrm{diag}\{1/\lambda_1, \ldots, 1/\lambda_r\}$, $D_\lambda^{-1} = \begin{pmatrix} D_{1\lambda}^{-1} & O \\ O & 0 \end{pmatrix}$, $D_2^{-1} = \begin{pmatrix} D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$

여기에서 H_{12}, H_{21}, H_{22}는 각각 $r \times (p-r)$, $(p-r) \times r$, $(p-r) \times (p-r)$ 차원의 임의의 행렬이다.

증명:

1) 정리 2.4의 1)과 $D_{\sqrt{\lambda}}^{-1}$를 이용하면

$$\begin{aligned} XX^-X &= (UD_{\sqrt{\lambda}}V^t)(VD_{\sqrt{\lambda}}^{-1}U^t)(UD_{\sqrt{\lambda}}V^t) \\ &= U\left(D_{\sqrt{\lambda}} I_p D_{\sqrt{\lambda}}^{-1} \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & 0 \end{pmatrix}\right) D_{\sqrt{\lambda}} V^t \\ &= U \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & 0 \end{pmatrix} D_{\sqrt{\lambda}} V^t \\ &= UD_{\sqrt{\lambda}} V^t = X \end{aligned}$$

을 얻는다.

2) 정리 2.4의 2)와 $V_1^tV_1 = I_r$, $U_1^tU_1 = I_r$를 이용하면

$$\begin{aligned} XX^-X &= (U_1D_{1\sqrt{\lambda}}V_1^t)(V_1D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1}U_1^t)(U_1D_{1\sqrt{\lambda}}V_1^t) \\ &= U_1D_{1\sqrt{\lambda}}I_rD_{1\sqrt{\lambda}}^{-1}I_rD_{1\sqrt{\lambda}}V_1^t \\ &= U_1D_{1\sqrt{\lambda}}V_1^t = X \end{aligned}$$

을 얻는다.

3) 정리 2.4의 1)과 $D_{\sqrt{\lambda}}D_2^{-1}\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & 0 \end{pmatrix}$을 이용하면

$$\begin{aligned} XX^-X &= (UD_{\sqrt{\lambda}}V^t)(VD_2^{-1}U^t)(UD_{\sqrt{\lambda}}V^t) \\ &= U\left[D_{\sqrt{\lambda}}I_pD_2^{-1}\begin{pmatrix} I_r & O \\ \mathbf{O} & 0 \end{pmatrix}\right]D_{\sqrt{\lambda}}V^t \\ &= U\left[\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & 0 \end{pmatrix}D_{\sqrt{\lambda}}\right]V^t \\ &= UD_{\sqrt{\lambda}}V^t = X \end{aligned}$$

을 얻는다.

□

정리 3.2 $A = X^tX$에서 rank(A) = r < p인 경우 비정칙인 A의 일반화 역행렬은 다음과 같이 분해가능하다(허명회, 1995).

1) $A^- = VD_\lambda^{-1}V^t$: M. Penrose's G-inverse of A.

2) $A^- = V_1D_{1\lambda}^{-1}V_1^t$: M. Penrose's G-inverse of A.

3) $A^- = VD_1^{-1}V^t$: G-inverse of A.

단, $D_1^{-1} = \begin{pmatrix} D_{1\lambda}^{-1} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$이고 H_{12}, H_{21}, H_{22}는 정리 3.1과 같다.

증명: 정리 2.4를 이용한다.

1)

$$\begin{aligned} AA^-A &= (VD_\lambda V^t)(VD_\lambda^{-1}V^t)(VD_\lambda V^t) \\ &= VD_\lambda I_pD_\lambda^{-1}I_pD_\lambda V^t \\ &= V(D_\lambda D_\lambda^{-1})D_\lambda V^t \\ &= V\begin{pmatrix} I_p & O \\ O & 0 \end{pmatrix}D_\lambda V^t \\ &= VD_\lambda V^t = A \end{aligned}$$

2)

$$\begin{aligned}
AA^-A &= (V_1D_{1\lambda}V_1^t)(V_1D_{1\lambda}^{-1}V_1^t)(V_1D_{1\lambda}V_1^t) \\
&= V_1D_{1\lambda}I_rD_{1\lambda}^{-1}I_rD_{1\lambda}V_1^t \\
&= V_1(D_{1\lambda}D_{1\lambda}^{-1})D_{1\lambda}V_1^t \\
&= V_1I_rD_{1\lambda}V_1^t \\
&= V_1D_{1\lambda}V_1^t = A
\end{aligned}$$

3)

$$\begin{aligned}
AA^-A &= (VD_\lambda V^t)(VD_1^{-1}V^t)(VD_\lambda V^t) \\
&= VD_\lambda I_pD_1^{-1}I_pD_\lambda V^t \\
&= V(D_\lambda D_1^{-1})D_\lambda V^t \\
&= V\left[\begin{pmatrix} I_r & D_{1\lambda}H_{12} \\ O & O \end{pmatrix} D_\lambda\right]V^t \\
&= VD_\lambda V^t = A.
\end{aligned}$$

□

4. 예제

2×3 행렬 $X = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & 2 \end{pmatrix}$과 3차 정방행렬 $A = X^tX = \begin{pmatrix} 2 & -3 & 1 \\ -3 & 5 & 0 \\ 1 & 0 & 5 \end{pmatrix}$의 일반화 역행렬을 다음 절차에 따라 구해보자(Searle, 1982).

1) 기본사항

(1) rank(A) $= 2 < 3$이므로 A^{-1}는 존재하지 않는다.

(2) A의 특성방정식 $|A-\lambda I_3| = -\lambda(\lambda-5)(\lambda-7) = 0$에서 고유값 $\lambda_1 = 5, \lambda_2 = 7, \lambda_3 = 0$을 얻는다.

(3) 연립방정식 $(A-\lambda_i I_3)(x,y,z)^t = 0,\ i = 1,2,3$에서 고유값 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$에 대한 고유단위벡터

$$\mathbf{v}_1 = \left(0, \frac{1}{\sqrt{10}}, \frac{3}{\sqrt{10}}\right)^t, \mathbf{v}_2 = \left(\frac{2}{\sqrt{14}}, -\frac{3}{\sqrt{14}}, \frac{1}{\sqrt{14}}\right)^t, \mathbf{v}_3 = \left(-\frac{5}{\sqrt{35}}, -\frac{3}{\sqrt{35}}, \frac{1}{\sqrt{35}}\right)^t$$

을 얻는다.

(4) 유용한 행렬

$$V = \begin{pmatrix} 0 & \frac{2}{\sqrt{14}} & -\frac{5}{\sqrt{35}} \\ \frac{1}{\sqrt{10}} & -\frac{3}{\sqrt{14}} & -\frac{3}{\sqrt{35}} \\ \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{35}} \end{pmatrix}, V_1 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{2}{\sqrt{14}} \\ \frac{1}{\sqrt{10}} & -\frac{3}{\sqrt{14}} \\ \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{14}} \end{pmatrix}$$

$$D_\lambda = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ D_\lambda^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{7} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \ D_{1\lambda} = \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 7 \end{pmatrix}, \ D_{1\lambda}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & 0 \\ 0 & \frac{1}{7} \end{pmatrix}$$

$$D_{\sqrt{\lambda}} = \begin{pmatrix} \sqrt{5} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{7} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, D_{\sqrt{\lambda}}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{7}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, D_{1\sqrt{\lambda}} = \begin{pmatrix} \sqrt{5} & 0 \\ 0 & \sqrt{7} \end{pmatrix},$$

$$D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{7}} \end{pmatrix}, \ D_\lambda^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & 0 & a \\ 0 & \frac{1}{7} & b \\ c & d & e \end{pmatrix}, \ D_2^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 & a \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{7}} & b \\ c & d & e \end{pmatrix},$$

$$U = XVD_{\sqrt{\lambda}}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix},$$

$$U_1 = XV_1D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

2) 유용한 행렬에 의한 분해

(1)

$$VD_\lambda V^t = \begin{pmatrix} 2 & -3 & 1 \\ -3 & 5 & 0 \\ 1 & 0 & 5 \end{pmatrix} = A,$$

(2)

$$V_1 D_{1\lambda} V_1^t = \begin{pmatrix} 2 & -3 & 1 \\ -3 & 5 & 0 \\ 1 & 0 & 5 \end{pmatrix} = A,$$

(3)

$$U D_{\sqrt{\lambda}} V^t = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & 1 \end{pmatrix} = X,$$

(4)

$$U_1 D_{1\sqrt{\lambda}} V_1^t = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & 1 \end{pmatrix} = X.$$

3) X의 일반화 역행렬

(1) Penrose's G-inverse

(i)

$$X^- = V D_{\sqrt{\lambda}}^{-1} U^t = \frac{1}{35} \begin{pmatrix} 5 & -5 \\ -4 & 11 \\ 13 & 8 \end{pmatrix}$$

(ii)

$$X^- = V_1 D_{1\sqrt{\lambda}}^{-1} U_1^t = \frac{1}{35} \begin{pmatrix} 5 & -5 \\ -4 & 11 \\ 13 & 8 \end{pmatrix}$$

(2) G-inverse

$$X^- = V D_2^{-1} U^t = \begin{pmatrix} \frac{2}{14} + \frac{(-5c-5d)}{\sqrt{70}} & -\frac{2}{14} + \frac{(-5c+5d)}{\sqrt{70}} \\ -\frac{3}{14} + \frac{1}{10} + \frac{(-3c-3d)}{\sqrt{70}} & \frac{3}{14} + \frac{1}{10} + \frac{(-3c+3d)}{\sqrt{70}} \\ \frac{1}{14} + \frac{3}{10} + \frac{(c+d)}{\sqrt{70}} & -\frac{1}{14} + \frac{3}{10} + \frac{(c-d)}{\sqrt{70}} \end{pmatrix}.$$

여기서 a, b, c, d, e는 임의의 상수이다. 위의 X^-는 $XX^-X = X$가 성립되어 X의 일반화 역행렬이다.

4) A의 일반화역행렬

(1) Penrose's G-inverse

(i)

$$A^{-} = VD_{\lambda}^{-1}V^{t} = \frac{1}{2450}\begin{pmatrix} 100 & -150 & 50 \\ -150 & 274 & 72 \\ 50 & 72 & 466 \end{pmatrix}$$

(ii)

$$A^{-} = V_1 D_{1\lambda}^{-1}V_1^{t} = \frac{1}{2450}\begin{pmatrix} 100 & -150 & 50 \\ -150 & 274 & 72 \\ 50 & 72 & 466 \end{pmatrix}$$

(2) G-inverse

$$\begin{aligned} A^{-} &= VD_1^{-1}V^{t} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{4}{98}+\frac{-10(b+d)}{7\sqrt{10}} + \frac{25e}{35} & \frac{-6}{98}+\frac{-5c}{\sqrt{350}} + \frac{-6b+15d}{7\sqrt{10}} + \frac{15e}{35} & \frac{2}{98}+\frac{-15c}{\sqrt{350}} + \frac{2b-5d}{7\sqrt{10}} + \frac{-5e}{35} \\ \frac{-6}{98}+\frac{-5a}{\sqrt{350}} + \frac{15b-6d}{7\sqrt{10}} + \frac{15e}{35} & \frac{9}{98}+\frac{1}{50}+\frac{-3(a+c)}{\sqrt{350}} + \frac{9(b+d)}{7\sqrt{10}} + \frac{9e}{35} & \frac{-3}{98}+\frac{3}{50}+\frac{a-9c}{\sqrt{350}} + \frac{-3(b+d)}{7\sqrt{10}} + \frac{-3e}{35} \\ \frac{2}{98}+\frac{-15a}{\sqrt{350}} + \frac{-5b+2d}{7\sqrt{10}} + \frac{-5e}{35} & \frac{-3}{98}+\frac{3}{50}+\frac{9a+c}{\sqrt{350}} + \frac{-3(b+d)}{7\sqrt{10}} + \frac{-3e}{35} & \frac{1}{98}+\frac{9}{50}+\frac{3(a+c)}{\sqrt{350}} + \frac{b+d}{7\sqrt{10}} + \frac{e}{35} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

여기서 a, b, c, d, e는 임의의 상수이다. 위의 A^{-}는 $AA^{-}A = A$가 성립되어 A의 일반화 역행렬이다.

-SAS IML for G-inverse of given example X and A-

PROC iml

```
RESET NOLOG NOCENTER ;
X = {1 -1 2,
   -1 2 1};
A = {2 -3 1,
   -3 5 0,
      1 0 5};
X_1 = GINV(X);
A_1 = GINV(A);
PRINT "X_1 = "X_1, "A_1 = "A_1;
```

RESET LOG ;
QUIT

출력 결과

M. Penrose's G-inverse of X :

$$X^{-} = VD_{\sqrt{\lambda}}^{-1}U^{t} = \begin{pmatrix} \frac{5}{35} & -\frac{5}{35} \\ -\frac{4}{35} & \frac{11}{35} \\ \frac{13}{35} & \frac{8}{35} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.1428571 & -0.142857 \\ -0.114286 & 0.3142857 \\ 0.3714286 & 0.2285714 \end{pmatrix}$$

M. Penrose's G-inverse of A :

$$\begin{aligned} A^{-} = VD_{\lambda}^{-1}V^{t} &= \frac{1}{2450}\begin{pmatrix} 100 & -150 & 50 \\ -150 & 274 & 72 \\ 50 & 72 & 466 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0.0408163 & -0.061224 & 0.0204082 \\ -0.061224 & 0.1118367 & 0.0293878 \\ 0.0204082 & 0.0293878 & 0.1902041 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

참고문헌

허명회 (1995). <행렬의 이해와 계산>, 자유아카데미.
박동권 (1995). <실험계획법>, 자유아카데미.
Bellman, R. (1997). *Introduction to Matrix Analysis*, 2nd ed., SIAM, Philadelphia, PA.
Datta, B. N. (1995). *Numerical Algebra and Applications*, Brooks/Cole, New York.
Golub, G. H. and Johnson, C. R. (1983). *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, Baltimore, Maryland.
Horn, R. A. and Johnson, C. R. (1985). *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, Cambridge, UK.
Searle, S. R. (1982). *Matrix Algebra Useful for Statistics*, John Wiley & Sons, New York.
Strang, G. (1988). *Matrix Algebra Useful for Statistics*, John Wiley & Sons, New York.

[2006년 2월 접수, 2006년 9월 채택]

G-Inverse and SAS IML for Parameter Estimation in General Linear Model*

Kuey Chung Choi[1] Kwan-Joong Kang[2] ByungJun Park[3]

ABSTRACT

The solution of the normal equation arising in a general linear model by the least square methods is not unique in general. Conventionally, SAS IML and G-inverse matrices are considered for such problems. In this paper, we provide a systematic solution procedures for SAS IML.

Keywords: Regular matrix, non-regular matrix, diagonal matrix, symmetric matrix, generalized invese matrix.

* This work was supported by Cho-Sun University Research Grant(2007).

1) Professor, Division of Mathematics, Computer Science and Statistics, Cho-Sun University, Kwangju 501-759, Korea
E-mail: kjchoi@chosun.ac.kr

2) Professor, Department of Mathematics, Dong-A University, Busan 604-714 Korea
E-mail: kjkang@dau.ac.kr

3) Adjunct Professor, Division of Mathematics, Computer Science and Statistics, Cho-Sun University, Kwangju 501-759, Korea
E-mail: pbj5446@hanmail.net