대칭행렬과 에르미트 행렬의 고유값과 고유벡터

이 글에서는 대칭행렬의 고유값과 고유벡터의 아주 흥미로운 성질에 대해 이야기하겠다. 이를 위해, 고유값과 고유벡터가 무엇이었던가 기억해 보자. $n \times n$ 행렬 A가 주어졌을 때, 다음 식을 만족시키는 것이 고유값 λ_i (숫자), 고유벡터 e_i ($n \times 1$ 행렬)이다.

$$Ae_i = \lambda_i e_i \tag{1}$$

여기서 i의 범위는 1 부터 n이다.. 예를 들어 보자. 만약 A가 다음과 같이 주어지면

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 4 & -1 \\ -1 & 3 & -1 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

다음과 같은 해를 얻는다 ("고유값과 고유벡터 구하기"에서 해를 구하는 방법을 간단히 언급하겠다.):

$$\begin{pmatrix} -2 & 4 & -1 \\ -1 & 3 & -1 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

이는 다음에 해당된다.

$$Ae_1 = 1e_1 \tag{4}$$

$$\begin{pmatrix} -2 & 4 & -1 \\ -1 & 3 & -1 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

이는 다음에 해당된다.

$$Ae_2 = 2e_2 \tag{6}$$

$$\begin{pmatrix} -2 & 4 & -1 \\ -1 & 3 & -1 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

이는 다음에 해당된다.

$$Ae_3 = -1e_3 \tag{8}$$

사실 이 식들은 약간 다르게 표현될 수 있다. (1)의 전치를 취해 보자. 그럼 다음의 결과를 얻는다:

$$\begin{aligned}(Ae_i)^T &= (\lambda_i e_i)^T \\ (e_i)^T A^T &= \lambda_i (e_i)^T\end{aligned} \tag{9}$$

예를 들어, (5)는 다음 식으로 바뀌어 써질 수 있다:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2 & -1 & 2 \\ 4 & 3 & -2 \\ -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{10}$$

그럼, 이제 B가 대칭행렬이라 하고 (i.e. $B^T = B$) v_i가 고유벡터 λ_i가 고유값들이라고 하자.

이런 경우 (1)는 다음 식이 된다

$$Bv_i = \lambda_i v_i \tag{11}$$

한편, (9)로부터 다음을 얻는다:

$$(v_i)^T B^T = \lambda_i (v_i)^T \tag{12}$$

그런데 $B^T = B$이기 때문에 다음을 얻는다.

$$(v_i)^T B = \lambda_i (v_i)^T \tag{13}$$

이제 다음 값을 고려해보자:

$$(v_j)^T B v_i = (v_j)^T \lambda_i v_i = \lambda_i (v_j)^T v_i \tag{14}$$

이 식은 (11)로부터 얻어진 것이다. 한편, (13)로부터 다음 식을 얻는다.

$$(v_j)^T B v_i = \lambda_j (v_j)^T v_i \tag{15}$$

위 두 식은 같은 식이므로, 다음과 같은 결과를 얻는다:

$$\begin{aligned}\lambda_i (v_j)^T v_i &= \lambda_j (v_j)^T v_i \\ (\lambda_i - \lambda_j)(v_j)^T v_i &= 0\end{aligned} \tag{16}$$

그래서 만약 $\lambda_i \neq \lambda_j$라면 다음과 같은 결과를 얻는다.

$$(v_j)^T v_i = 0 \tag{17}$$

그런데 내적의 정의로부터 $(v_j)^T v_i = \vec{v}_j \cdot \vec{v}_i$을 얻는다. 예를 들어, 만일

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix} \tag{18}$$

라면, 다음 식이 나온다

$$(v_1)^T v_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix} = 1 \times 4 + 2 \times 0 + (-1) \times 3 = \vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 \quad (19)$$

그래서 (17)를 다음과 같이 표현할 수 있다:

$$\vec{v}_j \cdot \vec{v}_i = 0 \quad (20)$$

다시 말해, 대칭행렬의 두 고유벡터는, 고유값이 서로 다르면 서로 직교한다.

이 글에서 지금까지 말한 모든 것이 비슷한 방식으로 에르미트 행렬의 경우에도 적용될 수 있다. (9)는 다음 조건으로 바뀐다.

$$\begin{aligned} (Ae_i)^\dagger &= (\lambda_i e_i)^\dagger \\ (e_i)^\dagger A^\dagger &= \lambda_i^* (e_i)^\dagger \end{aligned} \quad (21)$$

(16)이 유도되기 위해 밟은 절차와 비슷한 절차를 밟으면, 다음을 얻는다:

$$\begin{aligned} \lambda_i (v_j)^\dagger v_i &= \lambda_j^* (v_j)^\dagger v_i \\ (\lambda_i - \lambda_j^*)(v_j)^\dagger v_i &= 0 \end{aligned} \quad (22)$$

이제, $j = i$의 경우를 고려해보자. 그럼 $\lambda_i = \lambda_i^*$은 λ_i이 실수 임을 의미한다. 그래서 에르미트 행렬의 고유값은 항상 실수임이 증명됐다.

이를 고려하면, 위 식을 다음과 같이 쓸 수 있다

$$(\lambda_i - \lambda_j)(v_j)^\dagger v_i = 0 \quad (23)$$

만일 $\lambda_i \neq \lambda_j$라면:

$$(v_j)^\dagger v_i = 0 \quad (24)$$

만일 두 복소벡터의 내적(스칼라 곱)을 다음과 같이 정의하면:

$$\vec{v}_j \cdot \vec{v}_i = (v_j)^\dagger v_i \quad (25)$$

고유값이 다르다면, 두 고유벡터는 서로 직교한다는 결론이 도출된다. 복소벡터의 내적이 실수벡터의 내적과 약간 다르다는 것에 유의해라. 예를 보자

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 - i \\ 2 \\ -1 + i \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 3 - 2i \end{pmatrix} \quad (26)$$

$$
\begin{aligned}
\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 &\equiv (v_1)^\dagger v_2 = \begin{pmatrix} 1+i, & 2, & -1-i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 3-2i \end{pmatrix} \\
&= (1+i) \times 4 + 2 \times 0 + (-1-i) \times (3-2i) \qquad (27)
\end{aligned}
$$

내적이 $(1-i)\times 4+2\times 0+(-1+i)\times(3-2i)$이 아니라는 점에 유의해라. 나의 양자역학에 관한 네번째 글에서 이에 대해 다시 논의하겠다. 거기서, 에르미트 행렬의 고유벡터의 직교성이 양자역학에서 아주 중요한 의미를 갖는다는 것을 배우게 될 것이다. 게다가, 나의 이전 글에서 설명된 브라켓(bra-ket) 표기법을 이용해 이 글의 모든 것을 다시 한 번 표현해 볼 것이다. 독자들은 이 글을 읽지 않고도 나의 양자역학에 관한 넷째 글을 읽고 이해할 수 있겠지만, 두 번 공부하는 것은 때로는 좋은 일이다.

연습문제 1. A가 두 개의 다른 고유값을 가진 2×2 에르미트 행렬이고, 한 개의 고유벡터가 다음과 같이 주어질 때:

$$u_1 = \begin{pmatrix} i \\ 2 \end{pmatrix} \qquad (28)$$

그 나머지 고유벡터가 다음으로 주어지는 것을 보여라.

$$u_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ i \end{pmatrix} \qquad (29)$$

연습문제 2. B가 세 개의 다른 고유값을 가진 3×3 에르미트 행렬이고, 두 개의 고유벡터가 다음과 같이 주어진다고 하자:

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 3 \end{pmatrix} \qquad (30)$$

이 때 나머지 고유벡터를 구해라. (이러한 고유벡터는 유일하지 않으므로, 답이 될 수 있는 고유벡터 하나만 구해라.[1])

[1] 그렇지만, 그러한 고유벡터는 항상 서로 평행(혹은 반평행)하다. 다시 말해, 그러한 두 고유벡터 $\vec{v}_3$와 $\vec{v}_3'$은 항상 적절한 스칼라 c에 대해 $\vec{v}_3' = c\vec{v}_3$을 만족한다.