Cholesky 분해 수식의 증명

생성자	재 재환 김
태그	엔지니어링

1. Cholesky 분해 정의

Cholesky 분해는 다음과 같이 정의됩니다:

$$A = LL^T$$

여기서:

- A는 대칭 행렬이며, $A = A^T$입니다.
- L은 하삼각 행렬로, 주 대각선 외에는 모두 0인 행렬입니다. 즉, $L_{ij} = 0 \ (i < j)$입니다.
- L^T는 L의 전치 행렬입니다.

---

2. 대칭 행렬과 양의 정부호 행렬

Cholesky 분해가 가능하려면 행렬 A가 **대칭**이고 양의 정부호(positive definite)여야 합니다.

- **대칭 행렬**: 행렬의 전치가 자기 자신인 행렬, 즉 $A = A^T$인 행렬입니다. 대칭 행렬은 주로 물리학이나 공학에서 나타나는 에너지 함수, 거리 계산 등에 자주 등장합니다.
- **양의 정부호 행렬**: 양의 정부호 행렬은 다음 조건을 만족하는 행렬입니다:

  $$x^T A x > 0 \quad \text{for all non-zero vectors}\, x$$

  이 성질은 Cholesky 분해를 가능하게 하고, 수치적 안정성을 보장합니다.

---

3. Cholesky 분해의 유도

Cholesky 분해는 대칭 행렬 A를 하삼각 행렬 L과 그 전치 L^T로 분해하는 방식입니다. 이 과정을 단계적으로 유도해보겠습니다.

3.1 행렬 분해 과정

A는 $L \cdot L^T$의 곱으로 분해된다고 가정합니다. A와 L은 각각 다음과 같은 형태를 가집니다:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

우리는 $A = LL^T$를 만족시키는 L을 찾고자 합니다.

3.2 분해 과정

$A = LL^T$라는 식을 양쪽에 전개합니다. LL^T를 전개하면:

$$A = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ 0 & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

이 행렬 곱을 계산하면:

$$A = \begin{bmatrix} l_{11}^2 & l_{11}l_{21} & \cdots & l_{11}l_{n1} \\ l_{11}l_{21} & l_{21}^2 + l_{22}^2 & \cdots & l_{21}l_{n1} + l_{22}l_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{11}l_{n1} & l_{21}l_{n1} + l_{22}l_{n2} & \cdots & l_{n1}^2 + l_{n2}^2 + \cdots + l_{nn}^2 \end{bmatrix}$$

이제, 원래 행렬 A와 LL^T의 대응하는 원소들을 비교하여 각 성분을 계산할 수 있습니다.

---

4. Cholesky 분해 수식의 단계적 계산

Cholesky 분해는 행렬의 각 요소를 아래와 같이 계산할 수 있습니다.

4.1 대각 성분 계산

대각 성분은 다음과 같은 수식을 따릅니다:

$$l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2}$$

이 수식은 행렬의 주 대각선 원소에서, 이미 계산된 L의 값들의 제곱 합을 뺀 후, 그 제곱근을 취하는 방식으로 계산됩니다.

4.2 비대각 성분 계산

대각 성분이 아닌 원소들은 다음과 같이 계산됩니다:

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{jj}} \quad (i > j)$$

이 수식은 행렬의 비대각 성분에서 이미 계산된 L의 원소들의 곱의 합을 빼고, 그 결과를 l_{jj}로 나누는 방식으로 계산됩니다.

---

5. 예시와 구체적 계산

이제 예시를 통해 3×3 대칭 행렬에 대해 Cholesky 분해를 수행해보겠습니다.

문제 설정

$$A = \begin{bmatrix} 6 & 15 & 55 \\ 15 & 55 & 225 \\ 55 & 225 & 979 \end{bmatrix}$$

이 행렬에 대해 Cholesky 분해를 진행합니다.

5.1 대각 성분 계산

첫 번째 대각 성분 l_{11}을 계산합니다:

$$l_{11} = \sqrt{6} \approx 2.4495$$

다음으로 두 번째 대각 성분 l_{22}를 계산합니다:

$$l_{22} = \sqrt{55 - (6.1237)^2} \approx 4.1833$$

세 번째 대각 성분 l_{33}을 계산합니다:

$$l_{33} = \sqrt{979 - (22.454)^2 - (20.917)^2} \approx 6.1101$$

5.2 비대각 성분 계산

이제 비대각 성분을 계산합니다.

첫 번째 열의 두 번째 성분 l_{21}:

$$l_{21} = \frac{15}{2.4495} \approx 6.1237$$

첫 번째 열의 세 번째 성분 l_{31}:

$$l_{31} = \frac{55}{2.4495} \approx 22.454$$

두 번째 열의 세 번째 성분 l_{32}:

$$l_{32} = \frac{225 - 6.1237 \times 22.454}{4.1833} \approx 20.917$$

---

6. Cholesky 분해의 성질

Cholesky 분해는 LU 분해와 유사하지만, 대칭 행렬이라는 특수한 조건에서 더욱 효율적입니다. 특히, 양의 정부호 행렬에 대해서는 다음과 같은 성질을 갖습니다:

1. **대칭성과 양의 정부호성**을 이용한 안정적인 분해:
   - 모든 고유값이 양수인 행렬만 다루므로 수치적으로 안정적입니다.
2. **계산량의 절반 감소**:
   - 대칭 행렬의 특성으로 인해 LU 분해보다 계산량이 절반으로 줄어듭니다.
3. **직교성**:
   - Cholesky 분해를 통해 얻은 L과 L^T는 서로 직교하는 성질을 갖습니다.

     $$LL^T = A$$

     $$L^T L = A^T = A$$

결론

Cholesky 분해는 대칭적이고 양의 정부호인 행렬을 다루는 문제에서 매우 유용하며, 수치해석과 공학적 문제에서 중요한 역할을 합니다. LU 분해와 달리 대칭 행렬의 특성을 활용하여 더 적은 계산으로 문제를 해결할 수 있습니다. Cholesky 분해는 구조 해석, 열전도 문제, 최적화 문제 등 다양한 분야에서 널리 사용됩니다.