Cholesky 분해법(Cholesky Decomposition)

생성자	재 재환 김
태그	엔지니어링

1. Cholesky 분해법의 이론

Cholesky 분해는 대칭 행렬 A에 대해 다음과 같이 표현됩니다:

$$A = L \cdot L^T$$

- A: 대칭이고 양의 정부호인 $n \times n$ 행렬.
- L: 하삼각 행렬 (Lower triangular matrix).
- L^T: L의 전치행렬 (Transpose of L).

Cholesky 분해는 LU 분해와 달리 행렬 A를 두 개의 삼각 행렬로 분해하되, 두 행렬이 서로 전치 관계에 있기 때문에 대칭 행렬의 구조를 활용하여 연산량을 절감할 수 있습니다.

양의 정부호 행렬

양의 정부호 행렬이란, 행렬 A의 모든 고유값이 양수인 경우를 말합니다. 이는 수치적으로 안정적인 해를 보장하며, Cholesky 분해가 가능한 조건이기도 합니다.

---

2. Cholesky 분해법의 수식

Cholesky 분해법의 수식은 다음과 같이 전개됩니다.

2.1 Cholesky 분해

행렬 A는 다음과 같은 요소로 표현됩니다:

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

이 행렬을 하삼각 행렬 L과 그 전치 L^T로 분해할 수 있습니다:

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

이때, 각 l_{ij}는 다음과 같은 공식을 이용하여 계산됩니다:

- **대각 성분** l_{ii}:

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

- **비대각 성분** $l_{ij} (i > j)$:

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{jj}}$$

이 공식들은 대칭성과 하삼각 행렬의 구조를 고려하여 순차적으로 계산됩니다.

2.2 Cholesky 분해를 통한 해법

Cholesky 분해법은 선형 방정식 $A \cdot x = b$를 푸는 데 유용합니다. A를 $L \cdot L^T$로 분해한 후, 두 단계로 문제를 해결할 수 있습니다.

1. **전진 대입(Forward Substitution)**:

   먼저 $L \cdot y = b$를 풀어 중간 변수 y를 계산합니다.

   $$y_i = \frac{b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k}{l_{ii}}$$

2. **후진 대입(Backward Substitution)**:

   다음으로 $L^T \cdot x = y$를 풀어 최종 해 x를 구합니다.

   $$x_i = \frac{y_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k}{l_{ii}}$$

---

3. 구체적인 사례: Cholesky 분해를 이용한 선형 방정식 풀이

문제 설정

다음의 대칭 행렬 A와 우변 벡터 b가 주어졌다고 합시다.

$$A = \begin{bmatrix} 6 & 15 & 55 \\ 15 & 55 & 225 \\ 55 & 225 & 979 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \end{bmatrix}$$

이 문제를 Cholesky 분해법으로 풀어 해 x를 구해봅시다.

3.1 Cholesky 분해 과정

우선 A를 Cholesky 분해하여 하삼각 행렬 L을 구합니다.

1. 첫 번째 행에서 l_{11}을 계산합니다:

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

2. 두 번째 행에서 l_{21}과 l_{22}를 계산합니다:

   $$l_{21} = \frac{15}{2.4495} \approx 6.1237, \quad l_{22} = \sqrt{55 - (6.1237)^2} \approx 4.1833$$

3. 세 번째 행에서 l_{31}, l_{32}, l_{33}를 계산합니다:l31=2.449555≈22.454,l32=4.1833225−6.1237×22.454≈20.917,l33=979−(22.454)2−(20.917)2≈6.1101

   $$l_{31} = \frac{55}{2.4495} \approx 22.454,$$
   $$l_{32} = \frac{225 - 6.1237 \times 22.454}{4.1833} \approx 20.917,$$

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

최종적으로 하삼각 행렬 L은 다음과 같습니다:

$$L = \begin{bmatrix} 2.4495 & 0 & 0 \\ 6.1237 & 4.1833 & 0 \\ 22.454 & 20.917 & 6.1101 \end{bmatrix}$$

3.2 전진 대입 (Forward Substitution)

이제 $L \cdot y = b$를 풀어 중간 변수 y를 구합니다.

1. 첫 번째 요소 y_1:

   $$y_1 = \frac{1}{2.4495} \approx 0.4082$$

2. 두 번째 요소 y_2:

$$y_2 = \frac{3 - 6.1237 \times 0.4082}{4.1833} \approx -0.1220$$

3. 세 번째 요소 y_3:

$$y_3 = \frac{5 - 22.454 \times 0.4082 - 20.917 \times (-0.1220)}{6.1101} \approx 0.6541$$

따라서, 중간 변수 y는 다음과 같습니다:

$$y = \begin{bmatrix} 0.4082 \\ -0.1220 \\ 0.6541 \end{bmatrix}$$

3.3 **후진 대입 (Backward Substitution)**

이제 $L^T \cdot x = y$를 풀어 최종 해 x를 구합니다.

1. 마지막 요소 x_3:

$$x_3 = \frac{0.6541}{6.1101} \approx 0.1071$$

2. 두 번째 요소 x_2:

$$x_2 = \frac{-0.1220 - 20.917 \times 0.1071}{4.1833} \approx -0.5912$$

3. 첫 번째 요소 x_1:

$$x_1 = \frac{0.4082 - 6.1237 \times (-0.5912)}{2.4495} \approx 2.0404$$

따라서 최종 해 x는 다음과 같습니다:

$$x = \begin{bmatrix} 2.0404 \\ -0.5912 \\ 0.1071 \end{bmatrix}$$

---

4. Cholesky 분해법의 실제 적용 사례

4.1 수치 해석에서의 열전도 문제

- 1차원 열전도 방정식을 수치적으로 풀 때, 유한 차분법을 사용하면 대칭 행렬이 생성됩니다. Cholesky 분해법은 이 행렬을 효율적으로 분해하는 데 사용됩니다.
- **예시**: 금속 막대의 온도 분포 계산에서 Cholesky 분해법을 활용하여 열 전달 방정식을 신속하게 해결할 수 있습니다.

4.2 확률 및 통계: 회귀 분석

- 최소 제곱법을 사용한 회귀 분석에서 생성되는 대칭 행렬을 Cholesky 분해법으로 효율적으로 처리할 수 있습니다.
- **예시**: 선형 회귀 모델 학습 시 Cholesky 분해를 통해 회귀 계수를 계산할 수 있습니다.

4.3 최적화 문제

- 이차 형식의 최소화 문제에서 자주 등장하는 대칭 행렬을 Cholesky 분해로 처리하면 계산 시간을 크게 단축할 수 있습니다.
- **예시**: 제한 조건 하에서 비용 함수를 최소화하는 문제에서 Cholesky 분해를 이용해 대칭 행렬을 빠르게 처리할 수 있습니다.

4.4 전기 회로 분석

- 전기 회로망 해석 시 발생하는 대칭 행렬을 Cholesky 분해법으로 해결할 수 있습니다. 이는 대규모 회로망의 전압과 전류 계산에 유용합니다.
- **예시**: 복잡한 전기 회로의 노드 전압 계산 시 대칭 행렬을 Cholesky 분해하여 시스템을 효율적으로 해결할 수 있습니다.

결론

Cholesky 분해법은 대칭적이고 양의 정부호인 행렬을 다루는 문제에서 매우 효율적입니다. 구조 해석, 회귀 분석, 열전도 문제, 최적화 문제 등 다양한 분야에서 널리 사용되며, 특히 대규모 행렬 시스템의 계산 효율성을 크게 향상시킵니다.