正定値行列の Cholesky 分解可能性に関する証明

N 次実対称行列 $A \in S_N(\mathbb{R})$ を正定値行列とする．すなわち，A は任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^N$ に対し，

$$\boldsymbol{x} \neq 0 \Rightarrow \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} > 0$$

を常に満たすような行列とする．以下では，ある上三角行列 M が存在して

$$A = M^T M$$

とかけることをいくつかのステップに分けて証明する．

以下の証明では, 正定値行列 $A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1,N} & \cdots & a_{N,N} \end{pmatrix}$ と各 $i \in \{2, \cdots, N-1\}$ に対し，ベクトル $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^i$ と対称行列 $A_i \in S_i(\mathbb{R})$ をそれぞれ

$$\boldsymbol{a}_i := \begin{pmatrix} a_{1,i} \\ a_{2,i} \\ \vdots \\ a_{i-1,i} \end{pmatrix}, \quad A_1 := (a_{1,1}), \quad A_i := \begin{pmatrix} A_{i-1} & \boldsymbol{a}_i \\ \boldsymbol{a}_i^T & a_{i,i} \end{pmatrix}$$

によって定義する．また，正定値行列の固有値は全て正であることに注意する．

さらに行列 $Y \in \mathbb{R}^{N \times N}$ が $U^T DU$ 分解可能であるということを，ある単位上三角行列 U，対角行列 D を用いて

$$Y = U^T DU$$

の形に分解できることとして定義する．

A_i が正則行列，特に正定値行列であること

　対角行列 $P_i \in \mathbb{R}^{N\times i}$ を

$$P_i := (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_i)$$

によって定義する．ここで，各 i に対し e_i を $\mathbb{R}^N$ における i 番目の標準基底とした．このとき，

$$\begin{aligned}
P_i^T A P_i &= \left(\begin{array}{ccc} 1 & \cdots & O \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ O & \cdots & 1 \\ \hline \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \end{array}\right)^T \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N,1} & \cdots & a_{N,N} \end{pmatrix} \left(\begin{array}{ccc} 1 & \cdots & O \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ O & \cdots & 1 \\ \hline \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{ccc} 1 & \cdots & O \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ O & \cdots & 1 \\ \hline \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \end{array}\right)^T \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N,1} & \cdots & a_{N,i} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i,1} & \cdots & a_{i,i} \end{pmatrix} = A_i
\end{aligned}$$

となるので

$$A_i = P_i^T AP$$

が成立することがわかる．さらに，P_i の各列の線形独立性より $\mathrm{rank}\ P_i = i$ であることがわかるので，これと線形写像の次元に関する定理から

$$\mathrm{null} P_i = i - \mathrm{rank} P_i = 0$$

であることがわかり，したがって $\mathrm{Ker} P_i = \{\mathbf{0}\}$ であることがわかる．よって任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^i$ に対して

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x} \neq \mathbf{0} &\Rightarrow P_i \boldsymbol{x} \neq \mathbf{0} \\
&\Rightarrow (P_i \boldsymbol{x})^T A (P_i \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T P_i^T A P_i \boldsymbol{x} > 0 \\
&\Rightarrow \boldsymbol{x}^T A_i \boldsymbol{x} > 0
\end{aligned}$$

が常に成立するので，A_i が正定値行列であることがわかる．

A_2 が $U^T DU$ 分解可能であること

各 $i \in \{1, \cdots, N\}$ に対し，$a_{i,i} \neq 0$ であることに注意する．実際 $a_{i,i} = 0$ であるとすると，
$\boldsymbol{e}_i \in \mathbb{R}^N$ に対して

$$\boldsymbol{e}_i{}^T A \boldsymbol{e}_i = a_{i,i} = 0$$

となるが，これは A が正定値であることに矛盾する．したがって特に $a_{1,1} \neq 0$ であるので，これを踏まえた上で，実数 $u, k \in \mathbb{R}$ を

$$u := \frac{a_{1,2}}{a_{1,1}}, \quad k := a_{2,2} - a_{1,1} u^2$$

で定めれば

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} 1 & u \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u \\ 0 & 1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ u & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,1} u \\ 0 & k \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,1} u \\ a_{1,1} u & k + a_{1,1} u^2 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{1,2} & a_{2,2} \end{pmatrix} = A_2
\end{aligned}$$

となるので

$$A_2 = \begin{pmatrix} 1 & u \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

とかけること，すなわち A_2 が $U^T DU$ 分解可能であることがわかる．

A_{i-1} が U^TDU 分解可能なら A_i も U^TDU 分解可能であること

A_{i-1} が U^TDU 分解可能であるとする．すなわちある単位上三角行列 $U_* \in \mathbb{R}^{i\times i}$ と対角行列 $D_* \in \mathbb{R}^{i\times i}$ が存在して

$$A_{i-1} = U_*^T D_* U_*.$$

ここで A_{i-1} は正定値行列で特に正則行列であることより，あるベクトル $\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^{i-1}$ が存在して

$$A_{i-1}\boldsymbol{r} = \boldsymbol{a}_{i-1}$$

が成立することがわかる．したがってベクトル $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{i-1}$ を $\boldsymbol{u} := U_*\boldsymbol{r}$ によって定義すれば

$$U_*^T D_* \boldsymbol{u} = U_*^T D_* U_* \boldsymbol{r} = A_{i-1}\boldsymbol{r} = \boldsymbol{a}_{i-1}$$

が成立し，さらに

$$k := a_{i,i} - \boldsymbol{u}^T D_* \boldsymbol{u}$$

とすることで

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} U_* & \boldsymbol{u} \\ \mathbf{0}^T & 1 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} D_* & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^T & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_* & \boldsymbol{u} \\ \mathbf{0}^T & 1 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} U_*^T & \mathbf{0} \\ \boldsymbol{u}^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_*U_* & D_*\boldsymbol{u} \\ \mathbf{0}^T & k \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} U_*^T D_* U_* & U_*^T D_* \boldsymbol{u} \\ \boldsymbol{u}^T D_* U_* & \boldsymbol{u}^T D_* \boldsymbol{u} + k \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} A_{i-1} & \boldsymbol{a}_{i-1} \\ \boldsymbol{u}^T & a_{i,i} \end{pmatrix} = A_i
\end{aligned}$$

が成立することから

$$A_i = \begin{pmatrix} U_* & \boldsymbol{u} \\ \mathbf{0}^T & 1 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} D_* & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^T & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_* & \boldsymbol{u} \\ \mathbf{0}^T & 1 \end{pmatrix}$$

と A_i が U^TDU 分解できることがわかる．これと A_2 が U^TDU 分解できることより，$i \in \{2, \cdots N\}$ に対して A_i が U^TDU 分解できることがわかる．

D の対角成分が全て正であること

先の議論で特に $i = N$ とすれば，正定値 $A = A_N$ が $U^T DU$ 分解できることがわかるので，その分解を与える単位上三角行列，対角行列をそれぞれ U, D とする．すなわち

$$A = U^T DU$$

さらに U は単位上三角行列であったことから，各列の線形独立性より U は正則行列であることに注意する．

対角行列 D は

$$D = (U^T)^{-1}(U^T DU)(U^{-1}) = (U^{-1})^T AU^{-1}$$

と変形することができる．また，U^{-1} が正則行列であること，すなわち

$$\mathrm{Ker}\, U^{-1} = \{\mathbf{0}\}$$

であることと A が正定値であることより，$(U^{-1})^T AU^{-1}$ が正定値となることがわかるので D も正定値となることがわかる．これと正定値行列の対角成分が全て正であることより，D の対角成分が全て正であることがわかる．

以上より A は単位上三角行列 U と成分が全て正である対角行列 D を用いて

$$A = U^T DU$$

と分解できることが示せた．ここで U の対角成分をそれぞれ $d_1, \cdots, d_N$ とし，

$$D^{1/2} := \begin{pmatrix} \sqrt{d_1} & & O \\ & \ddots & \\ O & & \sqrt{d_N} \end{pmatrix}$$

によって定義すると $D = D^{1/2}D^{1/2}$ が成立し，さらに

$$A = U^T DU = U^T(D^{1/2})^T D^{1/2}U = (D^{1/2}U)^T(D^{1/2}U)$$

とかけることがわかる．$D^{1/2}U$ は上三角行列であるので，改めて $M = D^{1/2}U$ とすれば A は上三角行列 M を用いて

$$A = M^T M$$

とかけること，すなわち A が Cholesky 分解可能であることが示せた． □

分解の一意性に関する補足

正定値 A の Cholesky 分解 $A = M^T M$ が一意であることを示す；A の $U^T DU$ 分解 $A = U^T DU$ に対し，ある単位上三角行列 U' と D' が存在して $A = {U'}^T D'U'$ を満たしたとする．このとき

$$({U'}^T)^{-1}U^T D = ({U'}^T)^{-1}(U^T DU)U^{-1} = ({U'}^T)^{-1}({U'}^T D'U')U^{-1} = D'U'U^{-1} \tag{1}$$

が成立することがわかる．ここで $({U'}^T)^{-1}, U^T$ がどちらも単位下三角行列であることより積 $({U'}^T)^{-1}, U^T$ の対角成分は全て 1 となり，したがって $({U'}^T)^{-1}U^T D$ の対角成分はすべて D の対角成分に等しい．
同様に U', U^{-1} はどちらも単位上三角行列であることより積 $U'U^{-1}$ の対角成分は全て 1 であり，したがって $D'U'U^{-1}$ の対角成分は全て D' の対角成分に等しいことがわかる．

以上と等式 (1) より，$D = D'$ であることがまずわかる．

さらに，等式

$$U^T DU = {U'}^T D'U'$$

の両辺に左から $({U'}^T)^{-1}$，右から $U^{-1}D^{-1}$ をかけることで等式

$$({U'}^T)^{-1}U^T = D'U'U^{-1}D^{-1}$$

が得られ，上式の左辺は単位下三角行列，右辺は単位上三角行列であることから

$$({U'}^T)^{-1}U^T = D'U'U^{-1}D^{-1} = U'U^{-1} = E$$

とかけることがわかる．ただし E は単位行列とした．

以上と逆行列の一意性より

$$U'^{-1} = U^{-1}$$
$$\therefore U' = U$$

がわかるので，これより Cholesky 分解の一意性がわかる． $\square$