Ⅱ. 本　論

1. LU 分解定理

임의의 正方行列 A에 대한 LU分解定理는 최초로 Alan Turing에 의해 證明되었으며, 行列式, 線形方程式, 固有値問題 등에 이용되어진다.

LU 알고리즘은 Rutishauser[9]에 의해 발견되었고, Bauer[1]는 LU 알고리즘과 固有値를 구하는 演算過程(simultaneous iteration)이 同値임을 證明하였고, Wilkinson[11]은 LU와 QR 알고리즘과의 관련성을 입증하였다.

Gauss소거법과 연관된 行列의 分解들에서 가장 중요한 하나는 LU分解로서 다음과 같은 형태를 갖는다:

$$A = LU$$

여기서 $A \in M_n$ ($n \times n$복소행렬의 집합), $L \in M_n$은 單位下三角行列(unit lower triangular matrix)이고, $U \in M_n$는 上三角行列(upper triangular matrix)이다.

이 障에서는 行列 $A \in M_n$가 LU分解를 갖기 위한 必要充分條件을 논하고, 잘 알려진 Gauss소거법을 LU分解와 관계지어서 LU分解에 대한 또다른 必要充分條件을 주도록 할 것이다.

【 定　理 1 】[5] 만일 A가 位數(rank) k인 n차의 正方行列이면서 $\det A[\{1,\cdots,j\}] \neq 0 \quad (j = 1,\cdots,k)$이라 하면 行列 $A \in M_n$는 다음과 같이 分解되어 진다:

$$A = LU$$

여기서 $L \in M_n$은 單位下三角行列이고 $U \in M_n$는 上三角行列이다.

임의의 行列 $A \in M_n$에 대한 LU分解의 存在性과 L과 U의 唯一性은 일반적으로 얘기할 수 없다. 그 이유는 行列 A 또는 A의 主-部分行列들(leading principal submatrices)의 非正則性(singularity)에서 야기된다. 따라서, 正則(nonsingular)인 경우에는 分解를 유일하게 결정할 수 있는 正規形態를 줄 수 있다.

【 定　理 2 】[5] 行列 $A \in M_n$가 正則이라 하자. 그러면 $A \in M_n$가 LU(L은 單位下三角行列, U는 上三角行列)로 分解되어질 必要充分條件은 $\det A[\{1,\cdots,j\}] \neq 0 \quad (j = 1,\cdots,n)$이다. 또한, L과 U는 正則이며 유일하게 결정되어 진다.

LU分解의 내용은 특수한 형태의 行列들에 대하여는 더욱 개선된 결과들을 준다. 하나의 예로, 行列 $A \in M_n$에 對稱(symmetric)이라는 조건을 주었을 때의 行列分解는 다음과 같이 얻어진다.

【 定 理 3 】[4] 行列 $A \in M_n$ 가 對稱이고, 正則이라 하자. 그러면 $A \in M_n$ 는 다음과 같이 分解되어 진다:

$$A = LDL^T$$

여기서 D 는 대각행렬이고, L 은 單位下三角行列이다.

위 定理는 對稱行列에 대한 LDL^T 分解라고 불리기도 한다. 그러면 이제 일반적인 $m \times n$ 行列에 대한 LU 分解에 대한 결과들을 分析해 보자.

다음 定理는 正方行列에 대한 LU 分解를 $m \times n$ 行列로 일반화한 내용이다.

【 定 理 4 】 行列 $A \in M_{m,n}$ $(n \geq m)$ 이고 $\det A[\{1, \cdots, j\}] \neq 0$ $(j = 1, \cdots, m)$ 이라 하면 $A \in M_{m,n}$ 는 다음과 같이 分解되어진다:

$$A = LU$$

여기서 $L \in M_m$ 은 單位下三角行列이고 $U \in M_{m,n}$ 는 上三角行列이며 L 과 U 는 유일하게 결정되어진다.

(證明) 본 證明은 m 에 관한 數學的 歸納法을 이용할 것이다.

만일 $j = 1$ 이면, $L = [1]$, $U = A$ 를 취하면 $A = LU$ 가 성립한다.

또 $j = m-1$ 이면, $A' = L'U'$ 로 유일하게 分解되어진다는 것을 假定하고 A 를 아래와 같이 쓰자:

$$A := \begin{bmatrix} A' & B \\ c & a \end{bmatrix}$$, 여기서 $A' \in M_{m-1}$, $B \in M_{m-1,n-m}$
$c \in M_{1,m-1}$, $a \in M_{1,n-m}$

그러면 A'는 歸納法 假說에 의해 單位下三角行列 $L' \in M_{m-1}$와 上三角行列 $U' \in M_{m-1}$의 곱으로 쓰여질 수 있다. 이때,

$$L := \begin{bmatrix} L' & 0 \\ w & 1 \end{bmatrix} \in M_m, \quad U := \begin{bmatrix} U' & E \\ 0 & v \end{bmatrix} \in M_{m,n}$$

이라 하자. 그러면 $c = wU'$, $a = wE + v$이다. 따라서 w, v, E가 유일하게 결정되므로 $A = LU$가 성립하는 L과 U는 유일하다. ■

위 定理를 관찰하여 보면 LU分解와 Gauss소거법 사이의 聯關性을 찾을 수 있다.

이제 $1 \leq r \leq m$일때, $Q_{r,m}$을 $\{1, \cdots, m\}$에서 골라진 r개의 증가수열 (strictly increasing sequence)들의 집합이라고 하자. 예를들어, $Q_{2,3}$은 $\{(1,2), (1,3), (2,3)\}$이라는 집합이 된다. 일반적으로 $Q_{r,m}$의 위수는

$${}_mC_r = \frac{m!}{r!\,(m-r)!}$$ 이다.

$$A = \begin{bmatrix} L_r' & 0 \\ X_r & I_{m-r} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_r' & Y_r \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_r' \\ X_r \end{bmatrix} [U_r' \ \ Y_r]$$

여기서 $L \in M_m$ 또는 $L \in M_{m,r}$이다.

그러므로 $A = LU$이다.

(⇒) 만일 Gauss소거법에 의해 $A = LU$로 分解되어진다면 Cauchy-Binet定理에 의해

$$\det A[\alpha \mid \alpha] = \sum_{w \in Q_{r,k}} \det L[\alpha \mid \omega] \ \det U[\omega \mid \alpha], \quad \alpha = \{1, \cdots, k\}$$

이다. 그런데 L이 單位下三角行列이므로 $\omega \neq \alpha$ 일 때 $\det L[\alpha \mid \omega] = 0$이고 $\det L[\alpha \mid \alpha] = 1$이다. 따라서

$$\begin{aligned} \det A[\alpha \mid \alpha] &= \det L[\alpha \mid \alpha] \times \det U[\alpha \mid \alpha] \\ &= \det U[\alpha \mid \alpha] \end{aligned}$$

이다. 한편, U의 主對角成分(main diagonal entries)은 Gauss소거과정에서 樞軸成分이고 0이 아니다. 그러므로 $\det U[\alpha \mid \alpha] \neq 0$, $\alpha \in Q_{r,m}$이고

$\det A[\alpha \mid \alpha] \neq 0$, $\alpha \in Q_{r,m}$이다. ■

2. QR 分解定理와 알고리즘

【定　理 7】[5] 行列 $A \in M_{m,n}$ $(n \geq m)$에 대해서, $A = QR$인 正規直交列(orthonormal columns)을 가진 行列 $Q \in M_{m,n}$와 上三角行列 $R \in M_n$이 존재한다. 또한, $m = n$이면 行列 Q는 unitary이고 만약 行列 A가 正則이면 行列 Q와 R은 유일하게 결정되어 진다.

QR 分解는 Gram-Schmidt 正規直交化過程(orthonormalization process)의 行列表現(matrix realization)이다.

실제로 行列 A가 正則이고 $a_1, a_2, \cdots, a_n$을 A의 列(columns)이고 $q_1, q_2, \cdots, q_n$을 Q의 列(columns)이라 가정하면

$$a_1 = q_1 r_{11}, \quad a_2 = q_1 r_{12} + q_2 r_{22},$$

$$a_k = q_1 r_{1k} + q_2 r_{2k} + \cdots + q_k r_{kk}, \quad r_{kk} > 0 \quad (k = 1, 2, \cdots, n).$$

따라서

$$\langle a_1 \rangle = \langle q_1 \rangle, \quad \langle a_1, a_2 \rangle = \langle q_1, q_2 \rangle,$$

$$\langle a_1, a_2, \cdots, a_k \rangle = \langle q_1, q_2, \cdots, q_k \rangle, \qquad (k = 1, 2, \cdots, n).$$

즉, 行列 Q의 列(columns)은 行列 A의 列을 正規直交化 한다.