вые $j-1$ уравнений системы (4):

$$\begin{gathered} l_{11}y_{1j}=0, \\ l_{21}y_{1j}+l_{22}y_{2j}=0, \\ \dots\dots\dots\dots \\ l_{j-1,1}y_{1j}+l_{j-1,2}y_{2j}+\ldots+l_{j-1,j-1}\,y_{j-1,j}=0. \end{gathered}$$

Учитывая невырожденность матрицы L, отсюда получим

$$y_{1j}=y_{2j}=\ldots=y_{j-1j}=0.$$

При этом оставшиеся уравнения системы (4) имеют вид

$$\begin{gathered} l_{jj}y_{jj}=1, \\ l_{ij}y_{jj}+l_{i,j+1}y_{j+1,j}+\ldots+l_{ii}y_{ij}=0, \\ i=j+1,\ j+2,\ \ldots,\ m. \end{gathered}$$

Отсюда последовательно находятся неизвестные y_{ij} по формулам

$$y_{ij}=-\frac{\sum\limits_{k=j}^{i-1} l_{ik}y_{kj}}{l_{ii}}, \qquad i=j+1, j+2, \ldots, m, \tag{6}$$

$$y_{jj}=1/l_{jj}. \tag{7}$$

Подсчитаем число умножений и делений, необходимое для проведения вычислений по формулам (6). При фиксированном i для вычислений по формуле (6) требуется 1 деление и $i-j$ умножений. Вычисления по формулам (6), (7) при фиксированном j потребуют

$$1+\sum_{i=j+1}^{m}(i-j+1)=\frac{(m-j+2)(m-j+1)}{2}$$

действий. Наконец, решение указанным способом систем (4) при всех $j=1, 2, \ldots, m$ потребует

$$\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{m}(m-j+2)(m-j+1)=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{m}k(k+1)=\frac{m(m+1)(m+2)}{6}$$

действий. Общее число действий умножения и деления, необходимое для обращения матрицы указанным способом,

$$\frac{m(m^2-1)}{3}+\frac{m^2(m-1)}{2}+\frac{m(m+1)(m+2)}{6}=m^3.$$

Тем самым обращение матрицы требует не намного больше времени, чем решение системы уравнений.

§ 5. Метод квадратного корня

1. Факторизация эрмитовой матрицы. Метод предназначен для решения систем уравнений

$$Ax=f \tag{1}$$

с симметричной (в комплексном случае — эрмитовой) матрицей. Он основан на разложении матрицы A в произведение

$$A = S^* D S, \qquad (2)$$

где S — верхняя треугольная матрица с положительными элементами на главной диагонали, S^* — транспонированная к ней (или комплексно сопряженная) матрица, D — диагональная матрица, на диагонали которой находятся числа, равные ± 1.

Возможность представления (2) можно получить как следствие теоремы об LU-разложении (см. § 2). Пусть все угловые миноры матрицы A отличны от нуля. Тогда справедливо разложение $A = LU$, где L — нижняя треугольная матрица, имеющая обратную, и U — верхняя треугольная с единичной диагональю.

Представим матрицу L в виде произведения $L = MK$, где M — нижняя треугольная матрица с единичной главной диагональю и K — диагональная матрица, главная диагональ которой совпадает с главной диагональю матрицы L, т. е.

$$K = \operatorname{diag}[l_{11}, l_{22}, \ldots, l_{mm}]. \qquad (3)$$

По условию диагональные элементы матрицы L отличны от нуля, и, следовательно, разложение $L = MK$ существует. Тогда

$$A = MKU, \qquad (4)$$

где M и U — треугольные матрицы с единичной главной диагональю и K — диагональная матрица, имеющая обратную. Из условия $A^* = A$ получаем $U^* K^* M^* = MKU$ и

$$K^{-1} M^{-1} U^* K^* = U M^{*-1}. \qquad (5)$$

Матрица, находящаяся в левой части равенства (5), является нижней треугольной, а в правой части — верхней треугольной. Поэтому из равенства (5) следует, что обе матрицы UM^{*-1} и $K^{-1}M^{-1}U^*K^*$ являются диагональными.

Далее, поскольку матрица UM^{*-1} имеет единичную главную диагональ, она является единичной матрицей, $UM^{*-1} = E$, т. е. $U = M^*$. Отсюда и из (4) получаем разложение

$$A = MKM^*. \qquad (6)$$

Представим матрицу K, определенную согласно (3) в виде произведения трех диагональных матриц:

$$K = |K|^{1/2} D |K|^{1/2},$$

где обозначено

$$|K|^{1/2} = \operatorname{diag}[\sqrt{|l_{11}|}, \sqrt{|l_{22}|}, \ldots, \sqrt{|l_{mm}|}],$$

$$D = \operatorname{diag}[\operatorname{sign} l_{11}, \operatorname{sign} l_{22}, \ldots, \operatorname{sign} l_{mm}].$$

Тогда из (6) получим разложение (2), где $S = |K|^{1/2} M^*$ — верхняя треугольная матрица с положительными элементами на главной диагонали.

2. Пример. Если разложение (2) получено, то решение системы (1) сводится к последовательному решению двух систем уравнений с треугольными матрицами

$$S^* D y = f, \qquad (7)$$

$$S x = y. \qquad (8)$$

Покажем на примере матриц второго порядка как можно получить разложение (2). Пусть A — действительная симметричная матрица

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix}.$$

Будем искать S и D в виде

$$S=\begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} \\ 0 & s_{22} \end{bmatrix}, \quad D=\begin{bmatrix} d_{11} & 0 \\ 0 & d_{22} \end{bmatrix},$$

где каждое из чисел d_{11}, d_{22} может быть либо $+1$, либо -1. Тогда

$$S^*DS=\begin{bmatrix} s_{11}^2 d_{11} & s_{11}s_{12}d_{11} \\ s_{11}s_{12}d_{11} & s_{12}^2 d_{11}+s_{22}^2 d_{22} \end{bmatrix}$$

и из условия (2) получаем три уравнения:

$$s_{11}^2 d_{11}=a_{11}, \quad s_{11}s_{12}d_{11}=a_{12}, \quad s_{12}^2 d_{11}+s_{22}^2 d_{22}=a_{22}.$$

Из первого уравнения находим $d_{11}=\operatorname{sign} a_{11}$, $s_{11}=\sqrt{|a_{11}|}$. Далее, если $a_{11}\neq 0$, то

$$s_{12}=a_{12}/(s_{11}d_{11}),$$

и, наконец,

$$s_{22}^2 d_{22}=a_{22}-s_{12}^2 d_{11},$$

т. е.

$$d_{22}=\operatorname{sign}(a_{22}-s_{12}^2 d_{11}), \quad s_{22}=\sqrt{|a_{22}-s_{12}^2 d_{11}|}.$$

3. Общие расчетные формулы. Получим разложение (2) в случае эрмитовой матрицы A произвольного порядка m. Если $S=[s_{ij}]$ и $D=\operatorname{diag}[d_{11}, \ldots, d_{mm}]$, то элемент матрицы DS, имеющий индексы (i, j), равен

$$(DS)_{ij}=\sum_{l=1}^{m} d_{il}s_{lj}=d_{ii}s_{ij}.$$

Кроме того, $S^*=[\bar{s}_{ji}]$, поэтому

$$(S^*DS)_{ij}=\sum_{l=1}^{m} \bar{s}_{li}d_{ll}s_{lj},$$

где $\bar{s}_{li}$— число, комплексно сопряженное s_{li}. Из условия (2) получаем уравнения

$$\sum_{l=1}^{m} \bar{s}_{li}d_{ll}s_{lj}=a_{ij}, \qquad i, j=1, 2, \ldots, m. \tag{9}$$

Так как матрица A эрмитова, можно, не ограничивая общности, считать, что в системе (9) выполняется неравенство $i\leqslant j$. Перепишем (9) в виде

$$\sum_{l=1}^{i-1} \bar{s}_{li}s_{lj}d_{ll}+s_{ii}s_{ij}d_{ii}+\sum_{l=i+1}^{m} \bar{s}_{li}s_{lj}d_{ll}=a_{ij}$$

и заметим, что $\bar{s}_{li}=0$ для $l>i$. Таким образом, получим систему уравнений

$$s_{ii}s_{ij}d_{ii}+\sum_{l=1}^{i-1} \bar{s}_{li}s_{lj}d_{ll}=a_{ij}, \qquad i\leqslant j. \tag{10}$$

В частности, при $i=j$ получаем

$$|s_{ii}|^2 d_{ii} = a_{ii} - \sum_{l=1}^{i-1} |s_{li}|^2 d_{ll},$$

т. е.

$$d_{ii} = \operatorname{sign}\left(a_{ii} - \sum_{l=1}^{i-1} |s_{li}|^2 d_{ll}\right), \tag{11}$$

$$s_{ii} = \left(\left|a_{ii} - \sum_{l=1}^{i-1} |s_{li}|^2 d_{ll}\right|\right)^{1/2}. \tag{12}$$

Далее, при $i<j$ из (10) получим

$$s_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum\limits_{l=1}^{i-1} \bar{s}_{li} s_{lj} d_{ll}}{s_{ii} d_{ii}}. \tag{13}$$

По формулам (11)—(13) находятся рекуррентно все ненулевые элементы матриц D и S.

4. Подсчет числа действий. Метод квадратного корня применяется обычно к системам с положительно определенной эрмитовой матрицей A. В этом случае из (6) следует положительность диагональных элементов матрицы K, и тем самым $D=E$ в разложении (2). Если предположить дополнительно, что A — действительная матрица, то из (11)—(13) получим следующие расчетные формулы:

$$s_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad s_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{l=1}^{i-1} s_{li}^2}, \quad i = 2, 3, \ldots, m, \tag{14}$$

$$s_{1j} = a_{1j}/s_{11}, \quad j = 2, 3, \ldots, m, \tag{15}$$

$$s_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum\limits_{l=1}^{i-1} s_{li} s_{lj}}{s_{ii}}, \quad j = 2, 3, \ldots, m, \quad i = 2, 3, \ldots, j-1. \tag{16}$$

Подсчитаем сначала число умножений. Вычисления по формуле (14) требуют

$$\sum_{i=2}^{m} (i-1) = \frac{m(m-1)}{2}$$

умножений. Вычисления по формуле (16) при каждом фиксированном j требуют

$$\sum_{i=2}^{j-1} (i-1) = \frac{(j-2)(j-1)}{2}$$

умножений, а всего здесь требуется

$$\sum_{j=2}^{m} \frac{(j-2)(j-1)}{2} = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{m-1} k(k-1) = \frac{m(m-1)(m-2)}{6}$$

умножений. Следовательно, общее число умножений

$$\frac{m(m-1)}{2} + \frac{m(m-1)(m-2)}{6} = \frac{m(m^2-1)}{6}.$$

Число делений, необходимых для вычислений по формулам (14)—(16), совпадает с числом наддиагональных элементов матрицы S и равно $m(m-1)/2$.

Таким образом, общее число действий умножения и деления, необходимое для факторизации $A=S^*S$,

$$\frac{m(m^2-1)}{6} + \frac{m(m-1)}{2} = \frac{m(m-1)(m+4)}{6} \approx \frac{m^3}{6}.$$

При больших m это число примерно в два раза меньше числа умножений и делений в прямом ходе метода Гаусса. Такое сокращение числа действий объясняется тем, что A — симметричная матрица. Заметим, что данный метод требует m операций извлечения корня.

Если матрица A факторизована в виде $A=S^*S$, то обратный ход метода квадратного корня состоит в последовательном решении двух систем уравнений

$$S^*y=f, \quad Sx=y.$$

Решения этих систем находятся по рекуррентным формулам

$$y_i = \frac{f_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} s_{ji}y_j}{s_{ii}}, \quad i=2,3,\ldots,m, \qquad y_1 = f_1/s_{11}, \tag{17}$$

$$x_i = \frac{y_i - \sum\limits_{j=i+1}^{m} s_{ij}x_j}{s_{ii}}, \quad i=m-1, m-2, \ldots, 1, \qquad x_m = y_m/s_{mm}. \tag{18}$$

Вычисления по каждой из формул (17), (18) требуют m делений и $0{,}5\,m(m-1)$ умножений. Следовательно, всего для обратного хода требуется $m(m+1)$ операций умножения и деления. Всего метод квадратного корня при факторизации $A=S^*S$ требует

$$m(m+1) + \frac{m(m-1)(m+4)}{6} = \frac{m(m^2+9m+2)}{6}$$

операций умножения и деления и m операций извлечения квадратного корня.