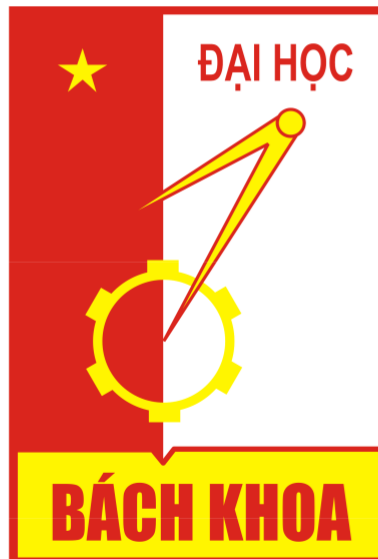


TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA HÀ NỘI
VIỆN TOÁN ỨNG DỤNG VÀ TIN HỌC



BÁO CÁO MÔN HỌC
GIẢI TÍCH SỐ

ĐỀ TÀI:

PHƯƠNG PHÁP CHOLESKY
GIẢI PHƯƠNG TRÌNH $AX = B$

GVHD: TS. HÀ THỊ NGỌC YẾN

Nhóm sinh viên thực hiện:

Họ và tên

Nguyễn Duy Hảo

Nguyễn Trung Kiên

Nguyễn Quang Huy

Đào Đức Huy

Lê Văn Nhiên

Dương Quý Toàn

MSSV

20185347

20195894

20195888

20195886

20173567

20173593

Hà Nội, tháng 5 năm 2021

Lời nói đầu

Sau khi học một số Toán đại cương, với những kiến thức nền tảng và dưới sự hướng dẫn của giảng viên bộ môn, TS. Hà Thị Ngọc Yến, chúng em tiến hành tìm hiểu về phương pháp Cholesky để giải bài toán hệ phương trình tuyến tính dưới dạng ma trận $AX=B$. Nội dung chính của bản báo cáo bao gồm:

- Lý thuyết
- Thuật toán
- Chương trình
- Ứng dụng

Chúng em xin chân thành cảm ơn giảng viên bộ môn - TS. Hà Thị Ngọc Yến đã giúp đỡ và hướng dẫn chúng em tận tình trong suốt thời gian viết bài báo cáo, tạo những tiền đề, những kiến thức để tiếp cận vấn đề, phân tích giải quyết vấn đề. Nhờ đó mà chúng em hoàn thành bài báo cáo của mình được tốt hơn.

Với khả năng có hạn về kiến thức và thời gian nên bản báo cáo không thể tránh khỏi những thiếu sót về mặt nội dung cũng như hình thức. Rất mong giảng viên bộ môn cùng bạn đọc thông cảm và góp ý để bản báo cáo được hoàn thiện hơn.

Mục lục

Lời nói đầu	2
I. Giới thiệu phương pháp	4
II. Lý thuyết	5
1. Bài toán	5
2. Sự phân tách LU	5
3. Phương pháp Cholesky	7
3.1. Sơ lược về phương pháp	7
3.2. Phương pháp Cholesky	9
III. Thuật toán	13
1. Thuật toán tổng quát	13
2. Thuật toán chi tiết	13
IV. Chương trình	15

I. Giới thiệu phương pháp

Trong đại số tuyến tính, khai triển LU (LU decomposition, LU factorization) là phương pháp phân tích ma trận thành tích của một ma trận tam giác dưới và một ma trận tam giác trên. Phép phân tích này thường được dùng trong giải tích số để giải hệ phương trình tuyến tính hoặc tính định thức của ma trận. Phương pháp Cholesky là phương pháp phân tách LU với A là ma trận đối xứng và xác định dương.

II. Lý thuyết

1. Bài toán

Nhiều bài toán thực tế trong nhiều lĩnh vực khác nhau như sinh học, thương mại, hóa học, khoa học máy tính, điện, kỹ thuật và cả các khoa học xã hội cần áp dụng việc giải hệ phương trình tuyến tính rất phổ biến. Tuy nhiên ở phương pháp này, chúng ta chỉ xét đến việc hệ phương trình tuyến tính có nghiệm duy nhất hay không? Hay hệ phương trình tuyến tính có n ẩn và n phương trình.

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Trong đó x_i là các ẩn ($i = 1, 2, 3, \dots, n$).

Hay còn có thể được viết gọn dưới dạng phương trình $AX=B$ với:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}}_A \underbrace{\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix}}_X = \underbrace{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix}}_B$$

Giải hệ phương trình $A = (7)$ và $B = (21)$ hay phương trình $7x=21$

- Cách 1: Giải trực tiếp theo phép chia $x = 21/7 = 3$
- Cách 2: Nghịch đảo 7^{-1} rồi nhân với 21 sẽ dẫn đến

$$x = 7^{-1} \times 21 = 0.142857 \times 21 = 2.999997$$

Rõ ràng cách 1 tốt hơn cách 2, thêm nữa cách 2 còn có khối lượng tính toán lớn hơn khi đi xác định nghịch đảo 7^{-1} .

Ngay cả trong lời giải tổng quát, khi ta xét hệ gồm nhiều phương trình thì việc giải nó thường là tạo ra lời giải trực tiếp mà không qua tính giá trị nghịch đảo A^{-1} . Chẳng hạn ở đây, chúng ta sẽ đi đến cách giải bằng phân tích LU và phân tích Cholesky.

2. Sự phân tách LU (hay phân tích LU):

Gọi A là một ma trận vuông (với $\det A \neq 0$). Phân tích LU của A là cách viết A thành tích của một ma trận tam giác trên và một ma trận tam giác dưới.

L: ma trận tam giác dưới.

U: ma trận tam giác trên.

$A=LU$

Ví dụ với ma trận A cỡ 3x3

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}}_A = \underbrace{\begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix}}_L \underbrace{\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix}}_U$$

Hay với ma trận A vuông cấp n:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}}_A = \underbrace{\begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & l_{nn} \end{pmatrix}}_L \underbrace{\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}}_U$$

Từ $A=LU$ ta cần giải ra các nghiệm L_{ij} và U_{ij} . Ta có $n^2 + n$ ẩn với n^2 phương trình. Như vậy, để tìm được ra ma trận L và U ta cần biết trước n ẩn.

Thông thường trong trường hợp này người ta chọn $L_{ii} = 1 \forall i$, ta được hệ n^2 phương trình với n^2 ẩn.

Chúng ta có thể tìm ma trận L và U như sau:

Các phần tử của ma trận L và ma trận U được xác định bởi:

$$\begin{cases} u_{1j} = a_{1j} & (1 \leq j \leq n) \\ l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}} & (2 \leq i \leq n) \\ u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} & (1 < i \leq j) \\ l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}} [a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot u_{kj}] & (1 < i < j) \end{cases}$$

Đây là cách làm trong bộ môn đại số tuyến tính. Sử dụng phương pháp Gauss, khi chuyển ma trận A ban đầu về ma trận tam giác trên U, sẽ xuất hiện các hệ số tương ứng với các phần tử của ma trận L (L được gọi là ma trận chứa các nhân tử).

Ví dụ: Phân tích ma trận $A = \begin{bmatrix} 2 & 2 & -3 \\ -4 & -3 & 4 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix}$ bằng phương pháp phân tách

LU

Giải: Ta có $A=L.U$ và đặt $l_{ii} = 1 \forall i$, thu được:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 2 & -3 \\ -4 & -3 & 4 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}$$

$$\text{Áp dụng công thức: } \begin{cases} u_{11} = 2, u_{12} = 2, u_{13} = -3 \\ l_{21} = -2, l_{31} = 1 \\ l_{32} = \frac{1}{u_{22}} (a_{32} - l_{31} u_{12}) = -1 \\ u_{22} = a_{22} - l_{21} u_{12} = 1 \\ u_{23} = a_{23} - l_{21} u_{13} = -2 \\ u_{33} = a_{33} - l_{31} u_{13} - l_{32} u_{23} = 3 \end{cases}$$

$$\Rightarrow A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 2 & -3 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

3. Phương pháp Cholesky

3.1 Sơ lược về phương pháp

- Phương pháp Cholesky là phương pháp phân tách LU với A là ma trận đối xứng và xác định dương.

Ma trận vuông $A = [a_{ij}]$ trong đó 2 phần tử đối xứng đi qua đường chéo chính thì bằng nhau, hay $[a_{ij}] = [a_{ji}]$

Ma trận xác định dương:

Ma trận vuông $A = [a_{ij}]$ (n hàng, n cột) xác định dương nếu:

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j > 0, \forall \mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$$

Ma trận A xác định dương \Leftrightarrow tất cả các định thức con chính của A đều dương

Ví dụ: $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$ Các định thức con chính:

$$\Delta_1 = 1 > 0, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 1 > 0, \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 4 \end{vmatrix} =$$

$$-1 \begin{vmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 0 \end{vmatrix} - 0 \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \end{vmatrix} + 4 \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 2 > 0$$

Vậy ma trận A xác định dương.

Định lý 1: Nếu A là ma trận xác định dương, thì A là ma trận khả nghịch.

Hệ quả: Nếu A là ma trận xác định dương \Rightarrow hệ $AX = B$ có đúng một nghiệm.

Định lý 2: Cho $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ là ma trận khả nghịch và cho $A = M^T M \Rightarrow A$ là ma trận xác định dương.

Định lý ở trên cho ta 1 cách xây dựng ma trận xác định dương: Chỉ cần nhân một ma trận khả nghịch với ma trận chuyển vị của nó.

Định lý phân tách Cholesky:

Mọi ma trận đối xứng xác định dương đều có thể đưa về dạng $M^T M$ với ma trận M nào đó

3.2. Phương pháp Cholesky:

Là phương pháp phân tách LU có dạng: $A = U^T \cdot U$

Trong đó:

- A là ma trận đối xứng, xác định dương
- U là ma trận tam giác trên và có tất cả các phần tử đường chéo chính > 0 . (U được gọi là thừa số Cholesky của ma trận A)

Khái quát phương pháp:

- Giải phương trình $AX = B$ (1)
 - Phân tích $A = U^T U \Rightarrow U^T \cdot U \cdot X = B$
 - Đặt $U \cdot X = Y$ (2) $\Rightarrow U^T \cdot Y = B$ (3)
 - Giải (3) được Y . Sau đó giải tiếp (2) ta tìm được ma trận X là nghiệm của phương trình (1)
- **Mô tả cụ thể cách làm:**

Bước 1: Tìm khai triển Cholesky U của ma trận A :

Từ $A = U^T \cdot U$, ta có:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{1n} & a_{2n} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_{11} & 0 & \dots & 0 \\ U_{12} & U_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ U_{1n} & U_{2n} & \dots & U_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & \dots & U_{1n} \\ 0 & U_{22} & \dots & U_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & U_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow a_{ij} = \sum_{k=1}^n U_{ki} U_{kj} \quad (j \geq i)$$

Ma trận U:

$$U = [U_{ij}]_{n \times n} \text{ được xác định bởi } \begin{cases} U_{11} = \sqrt{a_{11}}; U_{1j} = \frac{a_{1j}}{U_{11}}; \quad (j = \overline{2, n}) \\ U_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} U_{ki}^2}; \quad (i = \overline{2, n}) \\ U_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} U_{ki} U_{kj}}{U_{ii}}; \quad (i < j) \\ U_{ij} = 0; \quad (i > j) \end{cases}$$

Bước 2: Giải hệ $U^T \cdot Y = B$ tìm Y:

$$\begin{bmatrix} U_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ U_{21} & U_{22} & 0 & \dots & 0 \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ U_{n1} & U_{n2} & U_{n3} & \dots & U_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix} \quad (U_{ij} = U_{ji} \quad \forall i, j)$$

$$\Rightarrow b_i = \sum_{k=1}^i U_{ki} y_k$$

Ma trận Y:

$$Y = [y_i]_{n \times 1} \text{ được xác định bởi } \begin{cases} y_1 = \frac{b_1}{U_{11}} \\ y_i = \frac{b_i - \sum_{k=1}^{i-1} U_{ki} y_k}{U_{ii}} \end{cases} \quad (i > 1)$$

Bước 3: Giải hệ $U \cdot X = Y$ tìm X:

$$\begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & \dots & U_{1n} \\ 0 & U_{22} & U_{23} & \dots & U_{2n} \\ 0 & 0 & U_{33} & \dots & U_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & U_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow y_i = \sum_{k=i}^n U_{ik} x_k$$

Ma trận \mathbf{X} :

$$\mathbf{X} = [\mathbf{x}_i]_{n \times 1} \text{ được xác định bởi } \begin{cases} \mathbf{x}_n = \frac{y_n}{U_{nn}} \\ \mathbf{x}_i = \frac{y_i - \sum_{k=i+1}^n U_{ik} x_k}{U_{ii}} \end{cases} \quad (i < n)$$

\Rightarrow Ma trận \mathbf{X} chính là nghiệm cần tìm của hệ phương trình $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$

▪ Ví dụ: Giải hệ phương trình $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$ với $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$ và $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$

Ta có \mathbf{A} là ma trận đối xứng và xác định dương.

Bước 1: Khai triển $\mathbf{A} = \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{U}$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_{11} & 0 & 0 \\ U_{12} & U_{22} & 0 \\ U_{13} & U_{23} & U_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{bmatrix}$$

$$U_{11} = \sqrt{a_{11}} = 1, \quad U_{12} = \frac{a_{12}}{U_{11}} = 1, \quad U_{13} = \frac{a_{13}}{U_{11}} = -1$$

$$U_{22} = \sqrt{a_{22} - U_{12}^2} = 1$$

$$U_{23} = \frac{1}{U_{22}} [a_{23} - U_{12}U_{13}] = 1$$

$$U_{33} = \sqrt{a_{33} - U_{13}^2 - U_{23}^2} = \sqrt{2}$$

Bước 2: Giải hệ $\mathbf{U}^T \cdot \mathbf{Y} = \mathbf{B}$ tìm \mathbf{Y} :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & \sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} y_1 = 1 \\ y_1 + y_2 = 2 \\ -y_1 + y_2 + \sqrt{2}y_3 = 3 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 3/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

Bước 3: Giải hệ $\mathbf{U.X} = \mathbf{Y}$ tìm \mathbf{X} :

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \frac{3}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x_1 + x_2 - x_3 = 1 \\ x_2 + x_3 = 1 \\ \sqrt{2}x_3 = \frac{3}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 3 \\ -1/2 \\ 3/2 \end{bmatrix}$$

Nghiệm $x_1=3, x_2 = -1/2, x_3 = 3/2$

III. THUẬT TOÁN

1. Thuật toán tổng quát

INPUT: ma trận A, n

OUTPUT: ma trận U, hoặc thông báo A không đối xứng, hoặc thông báo A không xác định dương.

Bước 1: Kiểm tra tính đối xứng của A bằng hàm kiểm tra ma trận đối xứng.

Nếu $flag = False \Rightarrow$ in ra màn hình A không đối xứng, dừng thuật toán.

Ngược lại thì chuyển sang bước 2.

Bước 2: Tính bình phương của phần tử đường chéo chính a_{ii} , $i = 1, \dots, n$, $k = 1, \dots, i - 1$.

$$a_{ii} = a_{ii} - a_{ki}^2$$

Bước 3: Xét dấu của a_{ii} , $i = 1, \dots, n$.

Nếu $a_{ii} \leq 0 \Rightarrow$ dừng thuật toán. Ngược lại thì lấy căn bậc hai của a_{ii} , chuyển sang bước 4.

Bước 4: Tính các phần tử a_{ij} , $j = \overline{i + 1, n}$

$$a_{ij} = a_{ij} - a_{ki} * a_{kj}, \quad k = \overline{0, i}$$

$$a_{ij} = a_{ij} / a_{ii}$$

Bước 5: Trả về ma trận tam giác trên của A.

2. Thuật toán chi tiết:

INPUT: ma trận A, n

OUTPUT: ma trận U, hoặc thông báo A không đối xứng, hoặc thông báo A không xác định dương.

Bước 1: kiểm tra tính đối xứng của A

flag = hàm kiểm tra ma trận đối xứng

if flag = False:

Thông báo A không đối xứng

Dừng thuật toán

Bước 2: tính phần tử đường chéo chính a_{ii}

for $i = 1$ to n :

for $k = 1$ to $i - 1$:

$$a_{ii} = a_{ii} - a_{ki}^2$$

Bước 3: Xét dấu của a_{ii} , nếu ≤ 0 thì dừng thuật toán, không thì ta lấy căn.

if $a_{ii} \leq 0$:

Thông báo A không xác định dương

Dừng thuật toán

$$a_{ii} = \sqrt{a_{ii}}$$

Bước 4: Tính các phần tử a_{ij} , $j = i + 1, \dots, n$

for $j = i + 1$ to n :

for $k = 0$ to i :

$$a_{ij} = a_{ij} - a_{ki} * a_{kj}$$

$$a_{ij} = a_{ij} / a_{ii} \quad \# \text{ chia cho phần tử đường chéo chính.}$$

Bước 5: Return ma trận tam giác trên của A

Hàm kiểm tra tính đối xứng của ma trận A

INPUT: ma trận A

OUTPUT: flag

Bước 1:

$flag = True$

Bước 2: Duyệt nửa dưới của ma trận A

for $i = 1$ to n :

for $j = 1$ to i :

if $a_{ij} \neq a_{ji}$:

$flag = False$

break

return $flag$

IV. CHƯƠNG TRÌNH

Do phần code, ví dụ và ứng dụng khá dài nên chúng em xin phép được để trong 1 file riêng. Phần hướng dẫn sử dụng code đã có sẵn tại phần code.