

# Chương 1

## Giải hệ phương trình

Chúng ta có 2 loại hệ phương trình:

- Hệ phương trình tuyến tính
- Hệ phương trình phi tuyến

Chúng ta đã biết các phương pháp giải trực tiếp và gián tiếp hệ phương trình tuyến tính:

- Các phương pháp giải trực tiếp:
  - Phương pháp Cramer
  - Phương pháp thế
  - Phương pháp sử dụng ma trận nghịch đảo
  - Phương pháp khử Gauss, Gauss-Jordan
- Các phương pháp giải gián tiếp
  - Phương pháp lặp đơn
  - Phương pháp lặp Seidel
- Các phương pháp tìm trị riêng và véc tơ riêng của ma trận

### 1.1 Đặt bài toán và phương pháp giải

Hệ phương trình tuyến tính  $n$  phương trình,  $n$  ẩn  $x_1, x_2, \dots, x_n$  là tập  $n$  phương trình  $E_1, E_2, \dots, E_n$  dạng

$$\begin{cases} E_1 : a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ E_2 : a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \\ E_n : a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

với các hệ số  $a_{jk}$  và  $b_j$  đã biết. Hệ được gọi là thuần nhất nếu các  $b_j$  bằng 0, trong trường hợp ngược lại được gọi là hệ không thuần nhất.

Dùng cách biểu diễn ma trận, ta có thể viết hệ (1.1) dưới dạng:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (1.1)$$

Ở đây, ma trận hệ số  $A = [a_{jk}]$  là ma trận vuông cấp  $n$ ,  $x$  và  $b$  là các véc tơ cột:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Ma trận  $\tilde{\mathbf{A}}$  sau được gọi là ma trận mở rộng (augmented matrix) của hệ (1.1):

$$\tilde{\mathbf{A}} = [\mathbf{A}, \mathbf{b}] = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & \vdots & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & \vdots & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & \vdots & b_n \end{pmatrix}$$

Nghiệm của (1.1) là bộ số  $x_1, x_2, \dots, x_n$  thỏa mãn tất cả phương trình của hệ.

Véc tơ nghiệm của (1.1) là  $\mathbf{x}$  mà các thành phần của nó lập thành một nghiệm của (1.1).

Hệ phương trình (1.1) có thể giải được bằng

- *phương pháp trực tiếp* (phương pháp khử Gauss, ...), hoặc
- *phương pháp gián tiếp* hay *phương pháp lặp*

## 1.2 Phương pháp khử Gauss

Chúng ta đã biết phương pháp sử dụng định thức để giải hệ phương trình (1.1), đó là *phương pháp Cramer*. Ở đây ta xét *phương pháp khử Gauss*, cũng là một phương pháp trực tiếp, để giải hệ phương trình tuyến tính.

## 1.2.1 Phương pháp khử Gauss

**Phương pháp 1.1: Phương pháp khử Gauss**

Phương pháp này khử liên tiếp các ẩn để từng bước đưa ma trận mở rộng  $\tilde{\mathbf{A}}$  về dạng tam giác trên (upper triangular matrix, hay dạng bậc thang). Phương pháp gồm hai phần thực hiện lần lượt như sau:

1. *Quá trình thuận (forward elimination)*: Dùng các phép biến đổi hàng sơ cấp để đưa  $\tilde{\mathbf{A}}$  về dạng tam giác trên:

- (a) Khử  $x_1$  từ  $E_{\geq 2}$  bằng cách:

$$E_j := E_j - \frac{a_{j1}}{a_{11}} E_1 \quad \forall j \in [2, n] \quad (1.2)$$

$a_{11}$  gọi là *phần tử trục xoay (pivot)*,  $E_1$  gọi là phương trình chính (pivot equation).

- (b) Khử  $x_i$  từ  $E_{>i}$  bằng cách tương tự như trên, cuối cùng thu được dạng tam giác trên.

2. *Quá trình ngược (back substitution)*: Giải  $\mathbf{x}$  từ cuối lên:

- (a) Giải  $x_n$  từ  $E_n$ , giải tiếp được  $x_{n-1}$  do đã biết  $x_n$ .
- (b) Tương tự giải được đến  $x_1$ , cuối cùng thu được nghiệm  $\mathbf{x}$ .

(“back” trong cụm “back substitution” nghĩa là các ẩn được giải từ cuối lên, do trước đó đã đưa được  $\mathbf{A}$  về dạng tam giác trên. Tương tự, nếu  $\mathbf{A}$  ở dạng tam giác dưới, việc thế từ trên xuống sẽ gọi là “forward substitution”. Dù hai dạng này tương đương, trong khử Gauss ta chỉ nói đến back substitution).

Xem xét kĩ hơn, ta thấy (1.2) có một chi tiết nhạy cảm là phép chia. Nếu  $a_{11} = 0$ , phương pháp không thể thực hiện được, cho dù thực tế hệ phương trình có thể có nghiệm. Một cách xử lý trường hợp này là *đổi vị trí hàng*, như trong hai ví dụ sau:

**Ví dụ 1.1.** *Hãy giải hệ phương trình:*

$$8x_2 + 2x_3 = -7 \quad (E_1)$$

$$3x_1 + 5x_2 + 2x_3 = 8 \quad (E_2)$$

$$6x_1 + 2x_2 + 8x_3 = 26 \quad (E_3)$$

Chúng ta xoay trục từ  $E_1$ , nhưng do  $E_1$  không có ẩn  $x_1$ , trong khi đó hệ số của  $x_1$  trong phương trình  $E_3$  là lớn nhất. Vì vậy ta đổi chỗ  $E_1$  và  $E_3$  cho nhau. Tới đây ta có ma trận mở rộng như sau:

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 6 & 2 & 8 & \vdots & 26 \\ 3 & 5 & 2 & \vdots & 8 \\ & 8 & 2 & \vdots & -7 \end{pmatrix}$$

Khử  $x_1$  được:

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 & 8 & : & 26 \\ & 4 & -2 & : & -5 \\ & 8 & 2 & : & -7 \end{pmatrix}$$

Khử  $x_2$  được:

$$\begin{pmatrix} 6 & 2 & 8 & : & 26 \\ & 4 & -2 & : & -5 \\ & & 6 & : & 3 \end{pmatrix}$$

Vậy ta giải được  $x_3 = 0,5$ ,  $x_2 = -1$ ,  $x_1 = 4$ .

**Ví dụ 1.2.** Hãy giải hệ phương trình:

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + 2x_3 - x_4 & = -8 & (E_1) \\ 2x_1 - 2x_2 + 3x_3 - 3x_4 & = -20 & (E_2) \\ x_1 + x_2 + x_3 & = -2 & (E_3) \\ x_1 - x_2 + 4x_3 + 3x_4 & = 4 & (E_4) \end{cases}$$

Ta có ma trận mở rộng như sau:

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 & : & -8 \\ 2 & -2 & 3 & -3 & : & -20 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & : & -2 \\ 1 & -1 & 4 & 3 & : & 4 \end{pmatrix}$$

Phương pháp khử Gauss còn có một số biến thể:

- Phương pháp Gauss-Jordan: đưa  $A$  về dạng đường chéo thay vì dạng tam giác trên.
- Phương pháp Doolittle, phương pháp Crout, phương pháp Cholesky: đều dựa trên phân tích LU (LU factorization), sẽ giới thiệu ở phần sau.

### 1.2.2 Độ phức tạp

Ta phân tích độ phức tạp của phương pháp khử Gauss:

- Có tổng cộng  $n - 1$  bước khử.
- Ở bước  $k$ , ta khử  $x_k$  trong các phương trình  $E_{>k}$ , tổng cộng là  $n - k$  phương trình.
- Trong mỗi phương trình:
  - Có 1 phép chia: ví dụ  $\frac{a_{i1}}{a_{11}}$  trong (1.2)
  - Có  $n - k + 1$  phép nhân: ví dụ  $\frac{a_{i1}}{a_{11}}E_1$  trong (1.2)
  - Có  $n - k + 1$  phép trừ: ví dụ chính (1.2)

Do đó, tổng số phép tính của phương pháp này là:

$$C(n) = \sum_{k=1}^{n-1} (n - k) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} (n - k)(n - k + 1)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{s=1}^{n-1} s + 2 \sum_{k=1}^{n-1} s(s+1) \text{ (with } s = n - k) \\
&= \frac{1}{2}n(n-1) + \frac{2}{3}n(n^2-1) \\
&\approx \frac{2}{3}n^3
\end{aligned}$$

Ta nói rằng phương pháp khử Gauss có độ phức tạp  $\mathcal{O}(n^3)$ .

### 1.3 Phân tích LU và Ma trận nghịch đảo

Chúng ta tiếp tục thảo luận các phương pháp số giải hệ phương trình tuyến tính  $n$  phương trình,  $n$  ẩn. Trong phần này, ta xem xét ba phương pháp cải tiến từ phương pháp khử Gauss, cho phép tìm nghiệm nhanh chóng hơn, gồm phương pháp Doolittle, phương pháp Cholevsky, và phương pháp Crout. Cả ba phương pháp đều dựa trên phân tích LU.

Điểm chung của các phương pháp này là đều cố gắng đưa ma trận về tích của các ma trận tam giác trên (Upper triangular matrix) và ma trận tam giác dưới (Lower triangular matrix). Hai dạng ma trận này rất hữu ích vì cho phép tìm  $\mathbf{x}$  với độ phức tạp  $\mathcal{O}(n^2)$ ; nếu xét theo khía cạnh này, phương pháp khử Gauss khác ở điểm là *trực tiếp* biến đổi về dạng tam giác. Tất nhiên, phần lớn tính toán lại chuyển về việc phân tích ra dạng ma trận đặc biệt này, và với một số dạng ma trận đặc biệt, độ phức tạp có thể thấp hơn  $\mathcal{O}(n^3)$ .

Ba phương pháp được trình bày trong phần này đều gắn chặt với một kiểu phân tích ra ma trận tam giác. Vì rất dễ để giải nghiệm từ dạng tam giác, tên phương pháp vừa chỉ phương pháp phân tích ra dạng tam giác tương ứng, vừa chỉ phương pháp giải hệ tuyến tính từ dạng tam giác đã phân tích.

#### 1.3.1 Phân tích LU & phương pháp Doolittle

##### Định nghĩa 1.1: Phân tích LU (LU factorization)

Phân tích LU là việc phân tích ma trận vuông  $\mathbf{A}$  thành tích của hai ma trận

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}$$

trong đó  $\mathbf{L}$  là ma trận tam giác dưới và  $\mathbf{U}$  là ma trận tam giác trên.

Một số lưu ý về phân tích LU:

- Không phải mọi ma trận vuông đều có phân tích LU. Tuy nhiên, ta thừa nhận một kết quả quan trọng là mọi ma trận khả nghịch  $\mathbf{A}_0$  đều có thể sắp xếp lại các hàng để thu được một ma trận  $\mathbf{A}$  có phân tích LU.
- Có thể có nhiều cách phân tích LU.

Sau đây ta tìm hiểu phương pháp Doolittle để phân tích LU. Ta sẽ xem xét kết quả của phương pháp phân tích LU này với bài toán giải hệ phương trình tuyến tính trước, sau đó mới đi sâu vào công thức toán học của nó.

### Phương pháp Doolittle: Dùng dạng LU để giải hệ tuyến tính

#### Định lí 1.1

Nếu hệ tuyến tính  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  có thể giải được bằng khử Gauss mà không cần đổi vị trí hàng, thì  $\mathbf{A}$  có thể phân tích thành tích của ma trận tam giác trên  $\mathbf{L}$  và tam giác dưới  $\mathbf{U}$  (tức  $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ ) với dạng sau:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}, \text{ và } \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ m_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ m_{n1} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}$$

trong đó

- $a_{ji}^k$  là hệ số của  $x_i$  trong phương trình  $E_j$  tại bước khử thứ  $k$
- $m_{ji} = \frac{a_{ji}^{(i)}}{a_{ii}^{(i)}}$  là hệ số của  $E_j$  trong, ví dụ, công thức (1.2).

$\mathbf{U}$  cũng chính là ma trận  $\mathbf{A}$  thu được sau khi khử Gauss.

Định lí trên cũng chính là công thức cho phương pháp Doolittle.

Chú ý rằng  $\mathbf{U}$  là  $\mathbf{A}$  sau khi khử Gauss, tức ma trận  $\tilde{\mathbf{A}}$  trong phần 1.2 nhưng bỏ đi cột cuối.

Cần nhắc lại rằng, đến đây, ta vẫn cần giả sử hệ có thể giải được bằng khử Gauss mà *không* cần đổi vị trí hàng. Mở rộng phương pháp Doolittle cho trường hợp cần đổi vị trí hàng không khó. Trước hết, ta cần tìm cách biểu diễn việc tráo đổi vị trí hàng.

#### Định nghĩa 1.2: Ma trận hoán vị (permutation matrix)

Ma trận hoán vị  $\mathbf{P}$  là ma trận có được bằng cách sắp xếp lại các hàng của  $\mathbf{I}$  tùy ý.

Nhân  $\mathbf{P}$  vào bên trái  $\mathbf{A}$  sẽ tráo các hàng của  $\mathbf{A}$  theo đúng cách tráo các hàng của  $\mathbf{I}$  để tạo ra  $\mathbf{P}$ . Nói cách khác,  $\mathbf{P}$  là tích các ma trận biến đổi sơ cấp tráo hàng (row swapping elementary operation).

Ta chọn  $\mathbf{P}$  sao cho  $\mathbf{PA}$  có thể giải bằng khử Gauss mà không cần tráo vị trí hàng.  $\mathbf{P}$  được xây dựng đơn giản bằng cách áp dụng cách tráo hàng của Gauss cho ma trận  $\mathbf{I}$ .

**Ví dụ 1.3.** *Tìm ma trận hoán vị cho ma trận trong ví dụ 1.1, sao cho sau khi ma trận đó với ma trận gốc, nhận được một ma trận có thể dùng phương pháp khử Gauss.*

Trong ví dụ trên, hệ có thể dùng phương pháp khử Gauss sau khi đổi chỗ  $E_1$  và  $E_3$ . Vậy một ma trận hoán vị phù hợp là:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Sau khi tìm được  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{PA}$  có thể áp dụng phương pháp khử Gauss mà không cần tráo vị trí hàng. Theo định lý 1.1,  $\mathbf{PA}$  có phân tích LU:

$$\begin{aligned} \mathbf{PA} &= \mathbf{LU} \\ \Leftrightarrow \mathbf{A} &= \mathbf{P}^{-1}\mathbf{LU} = (\mathbf{P}^t\mathbf{L})\mathbf{U} \text{ (do } \mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P}^t) \end{aligned}$$

### Chứng minh phương pháp Doolittle

Phần này chứng minh kỹ hơn về tính đúng đắn của phương pháp Doolittle, và có thể bỏ qua.

*Chứng minh định lý 1.1.* Ta xem xét công thức (1.2). Xét trường hợp  $j = 2$ :

$$E_2 := E_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}}E_1 = E_2 - m_{21}E_1$$

Sử dụng phép biến đổi sơ cấp cộng một hàng với  $\alpha$  lần một hàng khác (row addition elementary operation), ta có ma trận biến đổi sau:

$$\mathbf{M}_2^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -m_{21} & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

Tương tự, cùng trong bước khử đầu tiên (khử  $x_1$ ) này, ta có dạng tổng quát hơn của  $\mathbf{M}_j^{(1)}$ :

$$\mathbf{M}_j^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ -m_{j1} & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

Sau khi kết thúc bước khử  $x_1$ ,  $\mathbf{A}$  được biến đổi thành

$$\mathbf{M}_2^{(1)}\mathbf{M}_3^{(1)} \dots \mathbf{M}_n^{(1)}\mathbf{A} = \mathbf{M}^{(1)}\mathbf{A} = \mathbf{M}^{(1)}\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}^{(2)}$$

và hơn nữa

$$\mathbf{A}^{(2)}\mathbf{x} = \mathbf{M}^{(1)}\mathbf{Ax} = \mathbf{M}^{(1)}\mathbf{b} = \mathbf{b}^{(2)}$$

Để dàng chứng minh được  $\mathbf{M}^{(1)}$  ở trên, gọi là ma trận biến đổi Gauss thứ nhất, có dạng sau:

$$\mathbf{M}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -m_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & 1 \end{pmatrix}$$

Tương tự, ta chứng minh được  $\mathbf{M}^k$  (ma trận biến đổi Gauss thứ  $k$ ) có dạng sau:

$$\mathbf{M}^{(k)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & -m_{k+1,k} & \ddots & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & -m_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix}$$

Cuối cùng, sau khi kết thúc bước khử  $x_n$ :

$$\mathbf{M}^{(1)} \mathbf{M}^{(2)} \dots \mathbf{M}^{(n)} \mathbf{A} = \mathbf{M} \mathbf{A} = \mathbf{A}^{(n)}$$

trong đó  $\mathbf{A}^{(n)}$  chính là ma trận  $\mathbf{A}$  sau khi khử Gauss:

$$\mathbf{A}^{(n)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}$$

Tới đây, chúng ta đã biến đổi được phương trình ban đầu (1.1) sang dạng sau:

$$\mathbf{A}^{(n)} \mathbf{x} = \mathbf{M}^{(n-1)} \mathbf{A}^{(n-1)} \mathbf{x} = \mathbf{M}^{(n-1)} \mathbf{b}^{(n-1)} = \mathbf{b}^{(n)} \quad (1.3)$$

trong đó  $\mathbf{A}^{(n)}$  là một ma trận tam giác trên.

Giờ đây, nếu coi  $\mathbf{A}^{(n)}$  là thành phần  $\mathbf{U}$  cần tìm, ta cần nhân vào trước hai vế của (1.3) một thành phần  $\mathbf{L}$  nào đó để đưa (1.3) về lại (1.1).

Thành phần  $\mathbf{U}$  đã thấy chỉ đơn giản là  $\mathbf{A}$  qua một chuỗi các biến đổi sơ cấp cộng một hàng với  $\alpha$  lần một hàng khác. Do đó  $\mathbf{L}$  chỉ cần là một ma trận có thể đảo ngược chuỗi biến đổi này.

Xét biến đổi  $\mathbf{M}_2^{(1)}$ , biến đổi

$$\mathbf{L}_2^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ m_{21} & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

sẽ đảo ngược được  $\mathbf{M}_2^{(1)}$ . Lý do cũng rất đơn giản:



- $M_2^{(1)}$  lấy  $E_2$  trừ đi  $m_{21}$  lần  $E_1$ , thì
- $L_2^{(1)}$  lấy  $E_2$  cộng với  $m_{21}$  lần  $E_1$

Tương tự, ta dễ dàng thấy

$$L^{(k)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & m_{k+1,k} & \ddots & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & m_{n,k} & & 1 \end{pmatrix}$$

sẽ đảo ngược được  $M^{(k)}$ .

Nhân  $L^{(k)}$  vào trước hai vế của (1.3) theo thứ tự  $k$  tăng dần từ 1 đến  $n-1$ , ta có:

$$\begin{aligned} L^{(1)}L^{(2)} \dots L^{(n-1)}A^{(n)}x &= L^{(1)}L^{(2)} \dots L^{(n-1)}b^{(n)} \\ \iff L^{(1)}L^{(2)} \dots L^{(n-1)}M^{(n-1)} \dots M^{(2)}M^{(1)}Ax &= L^{(1)}L^{(2)} \dots L^{(n-1)}M^{(n-1)} \dots M^{(2)}M^{(1)}b \\ &\iff Ax = b \end{aligned}$$

Đến đây, ta nhận được phương trình (1.1) ban đầu. Vậy tích các  $L^{(k)}$  theo thứ tự trên là một giá trị  $L$  phù hợp. Không khó để chứng minh rằng:

$$L = L^{(1)}L^{(2)} \dots L^{(n-1)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & \ddots & & & \\ \vdots & \ddots & 1 & & \\ \vdots & \vdots & m_{k+1,k} & \ddots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \\ m_{n1} & \dots & m_{n,k} & \dots & m_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}$$

Vậy ta đã xây dựng được phân tích LU của  $A$ , với  $L$  và  $U$  có dạng như yêu cầu.

đpcm.

### 1.3.2 Phân tích LL' & phương pháp Cholevsky

Thuật toán Cholesky phân tích một ma trận xác định dương ra dạng LL'. Để tìm hiểu phân tích này, ta cần biết về ma trận xác định dương.

**Định nghĩa 1.3: Ma trận xác định dương (positive definitive matrix)**

Ma trận  $\mathbf{A}$   $n \times n$  gọi là xác định dương nếu:

- $\mathbf{A}$  đối xứng, và
- $\mathbf{x}^t \mathbf{A} \mathbf{x} > 0 \forall \mathbf{x} \neq 0$

$\mathbf{L}$  có dạng như sau (viết rõ lại để tiện biểu diễn về sau):

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & \dots & \dots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

Ta thừa nhận định lí sau:

**Định lí 1.2**

Ma trận  $\mathbf{A}$  là xác định dương khi và chỉ khi nó phân tích được ra dạng  $\mathbf{L}\mathbf{L}^t$ , trong đó  $\mathbf{L}$  là ma trận tam giác dưới với đường chéo chính khác 0.

Do có số ẩn không lớn (với ma trận  $n \times n$  cần tìm tổng cộng  $\frac{n(n+1)}{2}$  ẩn), đồng thời ma trận tích có dạng phù hợp, nên phương pháp này có thể giải bằng tay các ẩn theo cách thể thông thường với  $n$  nhỏ. Nếu không tiện tính tay, ta có phương pháp chính xác sau:

**Phương pháp 1.2: Phương pháp Cholevsky**

Phương pháp Cholevsky phân tích ma trận xác định dương  $\mathbf{A}$  thành dạng  $\mathbf{L}\mathbf{L}^t$ .

Lần lượt tính phần tử khác 0 ở cột 1, 2, .... Bước thứ  $i$  sẽ tính các phần tử thuộc cột  $i$  như sau:

- Tính  $l_{ii}$ :

$$l_{ii} = \left( a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \right)^{0,5}$$

- Tính các phần tử còn lại, nếu có:

$$l_{ji} = \frac{1}{l_{ii}} \left( a_{ji} - \sum_{k=i+1}^n l_{jk} l_{ik} \right) \mid j \in [i+1, n]$$

### 1.3.3 Phân tích LU cho ma trận dải & thuật toán Crout

Ta quay trở lại với phân tích LU, tuy nhiên sử dụng thuật toán khác, nhanh vượt trội so với Doolittle, cho một loại ma trận đặc biệt, ma trận dải.

#### Định nghĩa 1.4: Ma trận dải (band matrix)

Ma trận  $n \times n$  gọi là ma trận dải nếu có  $1 < p, q < n$  sao cho  $a_{ij} = 0$  khi  $j - i \geq p$  hoặc  $i - j \geq q$ .

Nói cách khác, hai chỉ số  $p, q$  chỉ số đường chéo mà các phần tử trên đó không nhất thiết bằng 0:

- $p$  đường chéo trên đường chéo chính, gồm cả đường chéo chính
- $q$  đường chéo dưới đường chéo chính, gồm cả đường chéo chính

Ta lại xét tiếp một trường hợp đặc biệt: ma trận dải với  $p = q = 2$ , gọi là *ma trận ba đường chéo (tridiagonal matrix)*.

Nếu  $\mathbf{A}$  trong (1.1) có dạng ba đường chéo:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & & & \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & & \\ & a_{32} & a_{33} & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & a_{n-1,n} \\ & & & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix}$$

thì có thể phân tích  $\mathbf{A}$  ra dạng LU như sau:

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ & l_{32} & l_{33} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_{n,n-1} & l_{nn} \end{pmatrix}, \text{ và } \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & & & \\ & 1 & u_{23} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & u_{n-1,n} \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

Do có số ẩn không lớn (với ma trận  $n \times n$  cần tìm tổng cộng  $3n - 2$  ẩn), đồng thời ma trận tích có dạng phù hợp, nên phương pháp này có thể giải bằng tay các ẩn theo cách thể thông thường với  $n$  nhỏ. Nếu không tiện tính tay, ta giới thiệu qua phương pháp sau:

**Phương pháp 1.3: Phương pháp Crout cho ma trận ba đường chéo**

Phương pháp Crout dùng để phân tích ma trận ra dạng LU. Dạng LU của phương pháp Crout có khác biệt so phương pháp Doolittle:

- Phương pháp Crout tạo ra ma trận  $U$  có đường chéo chính bằng 1.
- Phương pháp Doolittle tạo ra ma trận  $L$  có đường chéo chính bằng 1.

## 1.4 Các phương pháp lặp

Phương pháp khử Gauss và các biến thể của nó trong hai phần cuối cùng là các *phương pháp trực tiếp* để giải hệ phương trình tuyến tính; đây là những phương pháp đưa ra nghiệm sau một số tính toán có thể được xác định trước. Ngược lại, trong trường hợp *giải gián tiếp* hoặc *phương pháp lặp* (*iterative method*) chúng ta bắt đầu từ một giá trị xấp xỉ đến nghiệm đúng và, nếu thành công, sẽ có được xấp xỉ tốt hơn và tốt hơn từ một quá trình tính toán lặp đi lặp lại để đạt được độ chính xác cần thiết, số phép tính phụ thuộc vào độ chính xác cần thiết.

Chúng ta áp dụng các phương pháp lặp nếu tốc độ hội tụ là đủ nhanh (nếu ma trận có các phần tử nằm trên đường chéo chính lớn hơn các phần tử nằm ngoài, như ta sẽ thấy), hoặc với *ma trận thưa* (*sparse matrix*), tức ma trận có phần lớn các phần tử là 0.

### 1.4.1 Phương pháp lặp Gauss - Seidel

Đây là một phương pháp lặp quan trọng, được nghiên cứu và sử dụng nhiều. Trước khi đi vào công thức chi tiết, ta xem xét phương pháp qua ví dụ sau:

**Ví dụ 1.4.** Xét hệ phương trình

$$\begin{cases} x_1 - 0,25x_2 - 0,25x_3 &= 50 \\ -0,25x_1 + x_2 &- 0,25x_4 = 50 \\ -0,25x_1 + &x_3 - 0,25x_4 = 25 \\ &- 0,25x_2 - 0,25x_3 + x_4 = 25 \end{cases}$$

Viết lại hệ theo cách sau:

$$\begin{cases} x_1 = & 0,25x_2 + 0,25x_3 & + 50 \\ x_2 = 0,25x_1 & & + 0,25x_4 + 50 \\ x_3 = 0,25x_1 & & + 0,25x_4 + 25 \\ x_4 = & 0,25x_2 + 0,25x_3 & + 25 \end{cases} \quad (1)$$

Ta bắt đầu bằng một xấp xỉ (cho dù có thể khác xa nghiệm cần tìm), ví dụ  $x_1^{(0)} = x_2^{(0)} = x_3^{(0)} = x_4^{(0)} = 100$  và tính  $\mathbf{x}^{(1)}$  từ các giá trị này, theo công thức (1) như sau:

$$\begin{array}{rcl}
 & \text{Giá trị cũ (chưa có giá trị mới)} \downarrow & \\
 x_1^{(1)} = & 0,25x_2^{(0)} + 0,25x_3^{(0)} & + 50 = 100 \\
 x_2^{(1)} = & 0,25x_1^{(1)} & + 0,25x_4^{(0)} + 50 = 100 \\
 x_3^{(1)} = & 0,25x_1^{(1)} & + 0,25x_4^{(0)} + 25 = 75 \\
 x_4^{(1)} = & 0,25x_2^{(1)} + 0,25x_3^{(1)} & + 25 = 68,75 \\
 & \uparrow \text{Giá trị mới} &
 \end{array}$$

Trong tính toán trên,  $\mathbf{x}^{(1)}$  được tính theo công thức (1), nhưng với các giá trị  $x$  mới nhất có được ở thời điểm tính toán. Tiếp tục tính toán, ta có bảng sau:

Rõ ràng, nghiệm hội tụ rất nhanh.

### Phương pháp Gauss-Seidel

Ta đã thấy Gauss-Seidel, cũng giống như phương pháp Newton hay phương pháp điểm bất động, là một phương pháp lặp (iterative method), tức tính một hàm lặp đi lặp lại, kết quả lần lặp trước là đầu vào của lần lặp sau. Trong phần này, ta sẽ đưa ra công thức lặp Gauss-Seidel theo một cách trực quan từ ví dụ 1.4.

Ví dụ 1.4 thực hiện được dễ dàng nhất khi hệ số của  $x_i$  trong phương trình thứ  $i$  là 1, tức đường chéo chính của  $\mathbf{A}$  chỉ chứa 1. Để tiện trong việc đưa ra công thức, ta giả sử rằng  $a_{jj} = 1 \forall j \in [1, n]$ , do mọi hệ phương trình có thể đưa được về dạng này, thông qua các biến đổi hàng sơ cấp.

Ta tách  $\mathbf{A}$  như sau:

$$\mathbf{A} = \mathbf{I} + \mathbf{L} + \mathbf{U}$$

trong đó  $\mathbf{I}$  là ma trận đơn vị,  $\mathbf{L}$  là ma trận tam giác dưới chặt (strictly),  $\mathbf{U}$  là ma trận tam giác trên chặt.

Thay vào (1.1), ta có:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{Ax} &= (\mathbf{I} + \mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x} = \mathbf{b} \\
 \iff \mathbf{x} &= \mathbf{b} - \mathbf{Lx} - \mathbf{Ux}
 \end{aligned}$$

Theo ví dụ 1.4, ta thấy  $\mathbf{U}$  chứa các giá trị  $x$  cũ, còn  $\mathbf{L}$  chứa các giá trị  $x$  mới. Từ đó, ta có công thức lặp tổng quát:

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{b} - \mathbf{Lx}^{(m+1)} - \mathbf{Ux}^{(m)} \quad (1.4)$$

trong đó  $\mathbf{x}^{(m)}$  là véc tơ nghiệm xấp xỉ thứ  $m$ .

**Phương pháp 1.4: Phương pháp Gauss-Seidel**

Phương pháp này xấp xỉ nghiệm  $\mathbf{x}$  của hệ  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  khi

- biết xấp xỉ bắt đầu  $\mathbf{x}^{(0)}$ , và
- $\mathbf{A}$  không chứa 0 trên đường chéo chính

Gọi các phương trình trong hệ là  $E_i$ . Ta đưa hết  $x_i$  sang riêng về trái của  $E_i$  sao cho hệ số của  $x_i$  là 1. Nói cách khác, ta tính  $x_i$  qua các  $x_j$ ,  $j \neq i$ . Phương pháp Gauss-Seidel thực hiện như sau:

1. Trong mỗi lần lặp, tính  $\mathbf{x}$  như sau:
  - lần lượt tính  $x_i$  theo thứ tự  $i$  tăng dần như công thức đã tách về trái ở trên, và
  - dùng giá trị  $x_j$  với mới nhất có thể khi tính  $x_i$
2. Dừng lại khi đạt điều kiện dừng, nếu không lặp lại bước trên

Chú ý rằng, phương pháp trên chỉ cần điều kiện đường chéo chính của  $\mathbf{A}$  không chứa 0. Điều kiện đường chéo chính chứa toàn 1 được bỏ qua vì trong bước đưa  $x_i$  sang về trái của  $E_i$ , hệ số của  $x_i$  đã được chuyển thành 1.

**Điều kiện hội tụ**

Ta viết lại (1.4) như sau:

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(m+1)} &= \mathbf{b} - \mathbf{L}\mathbf{x}^{(m+1)} - \mathbf{U}\mathbf{x}^{(m)} \\ \iff (\mathbf{I} + \mathbf{L})\mathbf{x}^{(m+1)} &= \mathbf{b} - \mathbf{U}\mathbf{x}^{(m)} \\ \iff \mathbf{x}^{(m+1)} &= \mathbf{C}\mathbf{x}^{(m)} + (\mathbf{I} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{b} \text{ với } \mathbf{C} = -(\mathbf{I} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{U}\end{aligned}$$

Chú ý rằng, nếu muốn tính  $\mathbf{C}$  theo công thức trên,  $\mathbf{A}$  phải ở dạng đường chéo chính chứa toàn 1.

Trước hết ta nhớ lại định nghĩa về *véc tơ riêng* và *giá trị riêng* của ma trận:

**Định nghĩa 1.5: Véc tơ riêng (eigenvector) & giá trị riêng (eigenvalue)**

Với mỗi ma trận  $\mathbf{A}$ , véc tơ  $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$  và vô hướng  $\lambda$  được gọi lần lượt là véc tơ riêng và giá trị riêng ứng với véc tơ riêng đó nếu:

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$$

Điều kiện cần và đủ để  $\lambda$  là giá trị riêng là:

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0$$

Quay trở lại phương pháp Gauss-Seidel, ta thừa nhận phương pháp này hội tụ khi và chỉ khi tất cả trị riêng của  $\mathbf{C}$  có giá trị tuyệt đối nhỏ hơn 1. Cụ thể hơn, ta xét *bán kính phổ* của  $\mathbf{C}$ .

**Định nghĩa 1.6: Bán kính phổ (spectral radius)**

Bán kính phổ của ma trận  $\mathbf{C}$  là giá trị tuyệt đối lớn nhất của các giá trị riêng của  $\mathbf{C}$ .

Phương pháp Gauss-Seidel, với bán kính phổ  $r$  của  $\mathbf{C}$ , sẽ hội tụ:

- khi và chỉ khi  $r < 1$
- nhanh hơn khi  $r$  nhỏ

Như vậy, ta đã biết điều kiện *cần và đủ* để phương pháp Gauss-Seidel hội tụ. Giờ ta sẽ xem xét một số điều kiện *đủ* cho sự hội tụ này.

Phương pháp Gauss-Seidel sẽ hội tụ khi

$$\|\mathbf{C}\| < 1$$

$\|\mathbf{C}\|$  là *chuẩn (norm)* của  $\mathbf{C}$ . Ta có một số chuẩn hay gặp như sau:

- Chuẩn Frobenius, tức căn bậc hai của tổng của bình phương mọi phần tử:

$$\|\mathbf{C}\| = \sqrt{\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_{jk}^2}$$

- Chuẩn tổng cột, tức giá trị lớn nhất trong tổng các trị tuyệt đối của phần tử một cột:

$$\|\mathbf{C}\| = \max_k \sum_{j=1}^n |c_{jk}|$$

- Chuẩn tổng hàng, tức giá trị lớn nhất trong tổng các trị tuyệt đối của phần tử một hàng:

$$\|\mathbf{C}\| = \max_j \sum_{k=1}^n |c_{jk}|$$

Ba chuẩn này không tương đương với nhau. Hoàn toàn có thể có trường hợp một chuẩn thỏa mãn điều kiện trị tuyệt đối nhỏ hơn 1, đủ để kết luận phương pháp hội tụ, nhưng dùng chuẩn khác thì lại không thể kết luận về sự hội tụ.

### 1.4.2 Phương pháp Jacobi

Phương pháp Gauss-Seidel là một phương pháp *hiệu chỉnh liên tiếp* (*successive correction*) vì trong mỗi bước lặp, ta cập nhật giá trị một thành phần  $x_j$  mỗi khi thành phần đó có xấp xỉ mới. *Phương pháp Jacobi* sẽ giới thiệu dưới đây lại thuộc loại *hiệu chỉnh đồng thời*, tức xấp xỉ mới của  $x_j$  không được dùng cho đến khi toàn bộ  $\mathbf{x}$  trong một bước được tính xong.

Khác biệt về việc sử dụng giá trị xấp xỉ mới nói ở trên là điểm khác biệt chính yếu của hai phương pháp này. Do đó, ta có thể viết công thức lặp tổng quát cho phương pháp Jacobi dựa trên (1.4) như sau:

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(m+1)} &= \mathbf{b} - \mathbf{L}\mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{U}\mathbf{x}^{(m)} \\ &= \mathbf{b} - (\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x}^{(m)} \\ &= \mathbf{b} - (\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{x}^{(m)} \\ &= \mathbf{b} + (\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{x}^{(m)}\end{aligned}\tag{1.5}$$

Tiếp tục chú ý,  $\mathbf{A}$  ở đây vẫn phải ở dạng có đường chéo chính toàn 1.

Phương pháp Jacobi sẽ hội tụ với mọi  $\mathbf{x}^{(0)}$  khi và chỉ khi bán kính phổ của  $\mathbf{I} - \mathbf{A}$  nhỏ hơn 1.

Phương pháp Jacobi gần đây được chú ý nhiều vì cho phép tính toán song song. Bản chất cập nhật lập tức của phương pháp Gauss-Seidel khiến việc song song hóa rất khó khăn, còn việc cập nhật sau mỗi lần lặp khiến phương pháp Jacobi có thể được song song hóa vô cùng dễ dàng.