TẠP CHÍ KHOA HỌC TÍNH TOÁN VÀ ĐIỀU KHIỂN, Tập II (1986). Số 4 (20–25)

VỀ PHƯƠNG PHÁP GAUSS VỚI MA TRẬN THƯA CỠ LỚN

NGUYỄN CÔNG ĐIỀU
HOÀNG VĂN LAI
NGUYỄN LÊ THU

1. Mở đầu.

Chúng ta thường hay phải giải phương trình đại số tuyến tính:

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

Trong đó A là ma trận vuông cỡ N. Với N đủ lớn các thuật toán thông thường giải hệ (1) thường gặp khó khăn ngay cả trên máy tính điện tử (MTĐT) mạnh. Do đó khi gặp các trường hợp như vậy, chúng ta cần sử dụng các thuật toán sao cho có thể tiết kiệm được bộ nhớ của MTĐT và tiết kiệm được số lượng phép tính. Trong bài [1] chúng tôi đã giới thiệu cách lưu trữ ma trận thưa và một số phương pháp giải lặp. Trong bài này chúng tôi giới thiệu tiếp một phương pháp giải đúng hay được sử dụng: phương pháp Gauss dưới dạng profil, và đưa ra một điều kiện đủ để thực hiện phương pháp này. Điều kiện này mở rộng hơn điều kiện chéo trội thường gặp.

2. Phương pháp Gauss với ma trận thưa.

Phương pháp Gauss cổ điển là một phương pháp rất phổ biến, nhưng phải thực hiện tuần tự nhiều phép tính ngay cả với các phần tử của ma trận A khi nó bằng 0. Trong thực tế, ma trận A thường hay có những cấu trúc đặc biệt, chẳng hạn các phần tử khác không của nó nằm tập trung gần đường chéo chính (như dạng ma trận băng) khi đó chúng ta có thể lợi dụng tính chất này để lưu trữ ma trận A dưới dạng profil [1]. Dùng thuật toán Gauss với các phần tử nằm trong profil, chúng ta có thể nâng cao hiệu quả của thuật toán.

Phương pháp Gauss để giải hệ (1) thực chất là việc phân tích ma trận A thành dạng

$$A = L.U \tag{2}$$

trong đó L ma trận tam giác dưới, có phần tử đường chéo bằng 1, còn U là ma trận tam giác trên. Như một định lý ở [2] đã chứng minh, các ma trận L và U có profil hoàn toàn giống như profil của phần tam giác dưới và phần tam giác trên của ma trận A.

Do đó phương pháp này rất thích hợp khi ma trận A được giữ dưới dạng profil. Sau đó chúng ta lần lượt giải:

$$Ly = b \tag{3}$$

$$Ux = y \tag{4}$$

việc giải (3) (4) không có gì khó khăn.

Nếu chúng ta kí hiệu các phần tử của L và U lần lượt là l_{ij}, u_{ij}. Ngoài ra:

$$\lambda(i) = \min \{ j : 1 \leqslant j \leqslant i \leqslant n;\ a_{ij} \neq 0 \} \tag{5}$$

$$\beta(j) = \min \{ i : 1 \leqslant i \leqslant j \leqslant n;\ a_{ij} \neq 0 \} \tag{6}$$

Khi đó công thức (2) viết được dưới dạng chi tiết sau

$$u_{1j} = a_{1j};\ l_{i1} = a_{i1}/u_{11};\ i = 2, 3, \ldots, n \tag{7}$$

$$u_{1j} = a_{1j},$$

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=m}^{i-1} l_{ik} u_{kj};\ i = 2, 3, \ldots, n \tag{8}$$

$$l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=m}^{i-1} l_{ik} u_{kj}) / u_{jj};\ j = i+1, \ldots, h \tag{9}$$

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=m}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \tag{10}$$

$$m = \max(\lambda(i), \beta(j))$$

còn các công thức để giải (3) (4) sẽ là :

$$y_1 = b$$

$$y_i = b_i - \sum_{k=m}^{i-1} l_{ik} y_k;\ i = 2, 3, \ldots, n \tag{11}$$

$$x_n = y_n$$

$$x_i = y_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} x_j;\ \ i = n-1, \ldots, l \tag{12}$$

3. Điều kiện đủ để phân tích ma trận A.

Nhìn vào các công thức trên, ta thấy ngay một điều kiện đủ để tiến hành phân tích là $u_{ii} \neq 0$. Thực vậy, nếu $u_{ii} \neq 0$, $i = 1, 2, \ldots, i_o - 1$, trong đó i_o nằm trong khoảng từ 1 đến n. Khi đó rõ ràng theo công thức (7) – (10) ta có thể xác định được u_{ij} và l_{ij}. Ta cũng thấy là minor chính thứ i_o của A là bằng tích $u_{11} u_{22} \ldots u_{i_o i_o}$. Vậy điều kiện cần và đủ để $u_{ii} \neq 0$ là các minor chính của A phải khác không. Rõ ràng ta thấy ngay các ma trận xác định dương hay mang tính chất đường chéo trội cho ta ngay được phân tích trên [3]. Tính chất xác định dương của A thường không có nếu bài toán xuất phát không mang tính chất này, còn tính đường chéo trội thường dẫn đến những hạn chế nhất định về tỉ lệ các bước lưới nếu ta nói đến việc giải các phương trình bằng phương pháp sai phân.

Ta xét ma trận A có cấu trúc ba đường chéo khối :

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 & & & \\ C_2 & A_2 & B_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & C_{m-1} & A_{m-1} & B_{m-1} \\ & & & C_m & A_m \end{pmatrix} \tag{13}$$

Nhận xét rằng nếu A_i, B_i, C_i là các ma trận đầy đủ, phương pháp truy đuổi khối là phương pháp đúng có hiệu quả để giải. Tuy nhiên, thực tế cho thấy các ma trận A_i, B_i, C_i hay có cấu trúc thưa. Khi đó sử dụng phương pháp truy đuổi không hiệu quả bằng phương pháp phân tích Gauss.

Giả sử các ma trận A có dạng sau:

$$A_i = \begin{pmatrix} 1 & \alpha_{i1} & & & \\ \beta_{i2} & 1 & \cdot & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & \cdot & \varkappa_{i,\, m_i-1} \\ & & & & \beta_{i,\, m_i-1} & 1 \end{pmatrix}; \quad B_i = \begin{pmatrix} \gamma_{i1} & & & 0 \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ 0 & & & \gamma_{im} \end{pmatrix}; \quad C_i = \begin{pmatrix} \delta_{i1} & & & 0 \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ 0 & & & \delta_{im} \end{pmatrix}$$

Trong đó các hệ số thỏa mãn đánh giá:

$$|\alpha_{ij}| \leqslant \alpha; \ |\beta_{ij}| \leqslant \alpha; \ |\gamma_{ij}| \leqslant \alpha; \ |\delta_{ij}| \leqslant \varkappa \tag{14}$$

Dễ dàng suy ra để có tính đường chéo trội, điều kiện đủ là $\varkappa \leqslant \frac{1}{4}$. Để mở rộng điều kiện này, ta xét một bổ đề sau.

Trước hết ta xét ma trận đơn giản bậc m:

$$\widehat{A} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha & & & \\ \alpha & 1 & \alpha & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & \cdot & \cdot & \alpha \\ & & & & & \alpha & 1 \end{pmatrix} \tag{15}$$

Bổ đề: với $\alpha < \frac{1}{2}$ ta có đánh giá

$$\| \widehat{A}^{-1} \| \leqslant \frac{q_1(q_1-\alpha^2)}{(q_1-2\alpha^2)^2} \tag{16}$$

trong đó

$$q_1 = \frac{1+\sqrt{1-4\alpha^2}}{2} \tag{17}$$

Chứng minh: trước hết thấy rằng $\det \widehat{A} \neq 0$.

Tìm điều kiện để $\widehat{A}$ có phân tích:

$$\widehat{A} = \begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ \beta_2 & 1 & & & \\ & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot \\ 0 & & & \beta_m & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_1 & \alpha & & & 0 \\ & \gamma_2 & \alpha & & \\ & & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot \\ 0 & & & & \gamma_m \end{pmatrix} \tag{18}$$

Trong đó:

$$\gamma_i = 1 - \alpha\beta_i, \qquad \beta_{i+1} = \alpha/\gamma_i \qquad i = 2, 3, \ldots, m-1 \tag{19}$$

Vậy điều kiện đủ để có phân tích (18) là:

$$|\alpha\beta_i| < 1; \ i = 2, \ldots, m.$$

Điều kiện này được thỏa mãn vì

$$0 < \beta_i < \frac{i}{i+1}, \quad \gamma_i \geqslant \frac{i+1}{2i}$$

Ta cần đánh giá β_{i+1}:

$$\beta_{i+1} = \frac{\alpha}{\gamma_i} = \frac{\alpha}{1-\alpha\beta_i}\ ;\quad \beta_2 = \alpha\ ;\quad i = 2, 3, \dots m-1.$$

Sau khi phân tích β_i — dưới dạng phân số dây chuyền [4], ta có:

$$\beta_i = \frac{\dfrac{1-\alpha^2-q_2}{q_1^2(q_1-q_2)}\, q_1^{i-1} - \dfrac{1-\alpha^2-q_1}{q_2^2(q_1-q_2)}}{\dfrac{1-\alpha^2-q_2}{q_1^2(q_1-q_2)}\, q_1^{i} - \dfrac{1-\alpha^2-q_1}{q_2^2(q_1-q_2)}\, q_2^{i}}\ ;\quad i = 2, 3, \dots, m.$$

$$q_2 = \frac{1-\sqrt{1-4\alpha^2}}{2}.$$

Ta có thể thấy rằng

$$0 < \beta_i < \frac{\alpha}{q_1} = \frac{2\alpha}{1+\sqrt{1-4\alpha^2}} < 1;\ i = 2, 3, \dots, m$$

và từ đây ta có đánh giá:

$$\gamma_i = 1-\alpha\beta_i > 1-\frac{\alpha^2}{q_1} > \frac{1}{2};\quad i = 2, 3, \dots, m$$

và vì vậy $\quad 0 < \dfrac{\alpha}{\gamma_i} < 1.$

Từ phân tích (18) ta có thể viết

$$\widehat{A} = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ \beta_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & \beta_m & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \delta_1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \delta_{m-1} \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \gamma_m \end{pmatrix}$$

Từ đây dễ dàng tính được $\widehat{A}^{-1}$ và cho ta đánh giá:

$$\|\widehat{A}^{-1}\| \leqslant \frac{q_1}{q_1-\alpha^2}\Big[\left(1+q_3+q_3^2+\dots+q_3^{m-1}\right)+\left(q_3+q_3^2+\dots+q_3^{m-1}\right)+ + \dots + \left(q_3^{m-2}+q_3^{m-1}\right)+q_3^m\Big]$$

$$q_3 = \frac{\alpha^2}{q_1-\alpha^2}.$$

Từ đây suy ra:

$$\|\widehat{A}^{-1}\| \leqslant \frac{q_1}{q_1-\alpha^2}\left[\frac{1-q_3^m}{1-q_3}\right]^2 \leqslant \frac{q_1}{(q_1-\alpha^2)(q_1-q_3)^2} = \frac{q_1(q_1-\alpha^2)}{(q_1-2\alpha^2)^2}.$$

Đây là điều phải chứng minh.

Bây giờ ta có thể chứng minh được định lý sau:

Định lý. Để có phân tích (2) với ma trận dạng (13) điều kiện đủ là:

$$0 \leqslant \alpha \leqslant \alpha_0 < \frac{1}{2} \tag{20}$$

trong đó α_0 là nghiệm của phương trình

$$1-2\alpha-4\alpha^2+\alpha\left(1-\sqrt{1-4\alpha^2}\right) = 0 \tag{21}$$

Nhận xét: Phương trình (21) có ít nhất 1 nghiệm nằm trong khoảng (0,1/2) bởi vì nó là giao của đồ thị các hàm $p(\alpha) = 1 - 2\alpha - 4\alpha^2$ và $q(\alpha) = -\alpha(1 - \sqrt{1-4\alpha^2})$; nghiệm của nó $\alpha_0 > \frac{1}{4}$ và tính gần đúng $\approx 0{,}3264$.

Chứng minh: Đầu tiên ta có nhận xét rằng với điều kiện trên các ma trận A_i đều có ma trận ngược A_i^{-1}. Do đó ma trận hệ (1) tương đương với hệ $\tilde{A}x = \tilde{f}$

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} E_1 & \tilde{B}_1 & & & \\ \tilde{C}_2 & E_2 & \tilde{B}_2 & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & \tilde{B}_{m-1} \\ & & & \tilde{C}_m & E_m \end{pmatrix} \tag{22}$$

E_i là ma trận đơn vị

$$\tilde{B}_i = (A_i)^{-1} B_i ; \quad \tilde{C}_i = A_i^{-1} C_i \tag{23}$$

Giả sử ta có phân tích:

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} E_1 & & & \\ F_2 & E_2 & & \\ & \cdot & \cdot & \\ & & F_m & E_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_1 & \tilde{B}_1 & & \\ & G_2 & \cdot & \\ & & \cdot & \tilde{B}_{m-1} \\ & & & G_m \end{pmatrix} \tag{24}$$

$$G_1 = E_1 ; \quad F_2 = \tilde{C}_2$$

$$G_i = E_i - F_i \tilde{B}_{i-1} ; \quad i = 2, 3, \ldots, m \tag{25}$$

$$F_{i+1} = \tilde{C}_i + F_i \, G_i^{-1}$$

Từ (25) ta thấy điều kiện đủ để phân tích $\tilde{A}$ về dạng (24) là

$$\| F_i \tilde{B}_{i-1} \| \leqslant 1 ; \; i = 2, 3, \ldots, m \tag{26}$$

Từ đây ta thấy rằng nếu các điều kiện sau đây thỏa mãn

$$\| \tilde{B}_i \| \leqslant 1/2 , \quad \| \tilde{C}_i \| \leqslant 1/2 \tag{27}$$

thì ta có ngay đánh giá (26).

Bây giờ chúng ta lại tìm điều kiện đủ để (27) thực hiện $\tilde{B}_i$ và $\tilde{C}_i$ có biểu diễn (23), muốn đánh giá được chúng cần đánh giá $\| A_i^{-1} \|$. Nhưng những phần tử của A_i thỏa mãn (14) vậy chúng ta cũng có đánh giá $\| A_i^{-1} \|$ tương tự $\| \hat{A}^{-1} \|$.

Hay là

$$\| A_i^{-1} \| \leqslant \frac{q_1 (q_1 - \alpha^2)}{(q_1 - 2\alpha^2)^2}$$

Nếu $q_2 = \frac{\alpha^2}{q_1}$ ta thấy từ biểu diễn (23) ta cần có đánh giá

$$\|\widetilde{B}\| < \frac{\alpha(1-q_2)}{(q-2q_2)^2} < \frac{1}{2}$$

Hay ta cần đánh giá α sao cho thỏa mãn

$$4q_2^2 - 4q_2 + 1 - 2\alpha - 2\alpha q_2 > 0. \tag{28}$$

Bất đẳng thức (28) tương đương với bất đẳng thức

$$1 - 2\alpha - 4\alpha^2 + 2\alpha q_2 = 1 - 2\alpha - 4\alpha^2 + \alpha(1 - \sqrt{1-4\alpha^2}) > 0 \tag{29}$$

Rõ ràng là (29) được thỏa mãn với mọi α thỏa mãn (20).

Cuối cùng nhận xét rằng các trường hợp ma trận A_1, B_1, C_1 trong (13) là thưa bất kỳ. Khi đó để đánh giá $\|\widetilde{B}_1\|$ và $\|\widetilde{C}_1\|$ chúng ta cần có đánh giá $\|A_1^{-1}\|$. Một trong những phương pháp là biểu diễn $A_1 = \widehat{A}_1 + \widetilde{A}_1$, $\widehat{A}_1$ có dạng ba đường chéo. Khi đó $\|\widetilde{A}_1\|$ đủ nhỏ thì ta có thể sử dụng các đánh giá (10) để lập các điều kiện tương tự (20).

Chương trình viết theo thuật toán (7) – (12) có thể làm quen trong bộ chương trình [1].

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. N.C. Điều, H.V. Lai, N.L. Thu. Một số thuật toán và chương trình giải hệ phương trình đại số tuyến tính với ma trận thưa cỡ lớn. Tạp chí KHTT và ĐK, số 1, 1986.
2. Kalitkin N.N., Phương pháp số (tiếng Nga). M. 1978.
3. Lankaster, Lý thuyết ma trận (tiếng Nga). M. 1978.
4. Khintsin A.A., Phân số dây chuyền (tiếng Nga). M. 1961

ABSTRACT

On the method Gauss for large sparse matrices.

In this paper the method Gauss for linear algebraic systems with large sparse matrices is developed. The storage of those matrices is in the compact form. Here we give one sufficient condition for Gauss factorisation, which is more general than the dominant diagonal's condition.

SỰ TỒN TẠI VÀ DUY NHẤT NGHIỆM..,

(Tiếp theo trang 7)

ABSTRACT

Existence and uniqueness theorems for a class of initial value problem

In this paper we consider initial value problem of evolutione quations

$$u' + A(u,u) = f, \quad u(0) = u_0 \qquad (1)$$

where $A \in (H \times V \to V^*)$ is an operator of the variation – type.
In the 2 sections we prove an Existence and Uniqueness result for (1). The Uniqueness of solution of (1) can be improved if the solution u satisfy certain regularity condition.
In section III we apply our abstract result of section II to the diffusion – equations of the type:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}\,[b(u, \operatorname{grad} u)] + \gamma\Delta^2 u = f(u) \\ u = 0 \text{ and } \Delta u = 0 \text{ on } \partial G \\ u|_{t=0} = u_0. \end{cases}$$