ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC

VŨ VĂN TẦN

VỀ MỘT SỐ THUẬT TOÁN TÍNH GIÁ TRỊ RIÊNG CỦA MA TRẬN CỠ LỚN

LUẬN VĂN THẠC SĨ TOÁN HỌC

Thái Nguyên - 2015

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC

VŨ VĂN TẦN

VỀ MỘT SỐ THUẬT TOÁN TÍNH GIÁ TRỊ RIÊNG CỦA MA TRẬN CỠ LỚN

Chuyên ngành: Toán ứng dụng
Mã số: 60 46 01 12

LUẬN VĂN THẠC SĨ TOÁN HỌC

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC

TS. NGUYỄN THANH SƠN

Thái Nguyên - 2015

Mục lục

Lời cảm ơn **iii**

Mở đầu **1**

1 Kiến thức chuẩn bị **3**

1.1 Nhắc lại sơ lược kiến thức trong đại số tuyến tính 3

1.1.1 Tầm quan trọng của giá trị riêng 3

1.1.2 Một số khái niêm và ký hiệu 6

1.1.3 Bài toán giá trị riêng 8

1.2 Không gian con Krylov 12

2 Một số phương pháp tìm giá trị riêng **15**

2.1 Phương pháp luỹ thừa 15

2.1.1 Lặp đơn vectơ 15

2.1.2 Trường hợp đối xứng 17

2.1.3 Lặp nghịch đảo vectơ 18

2.1.4 Tính giá trị riêng bậc cao 20

2.2 Phương pháp Arnoldi 21

2.2.1 Cơ sở trực giao cho không gian Krylov 21

2.2.2 Phương pháp Arnoldi tính giá trị riêng 23

2.3 Phương pháp Lanczos 24

3 Ví dụ số **27**

3.1 Một vài giải thích cho phương pháp Arnoldi và phương pháp Lanczos 27

3.1.1 Thuật toán QR 28
3.1.2 Thuật toán Chia để Trị của Cuppen 29
3.2 Ví dụ số 34
3.2.1 Phương pháp Arnoldi 34
3.2.2 Phương pháp Lanczos 36
3.2.3 Nhận xét 37

Kết luận **38**

Tài liệu tham khảo **39**

Lời cảm ơn

Tôi xin bày tỏ lòng biết ơn chân thành và sâu sắc đến TS. Nguyễn Thanh Sơn, người thầy đã tận tình chỉ bảo, hướng dẫn tôi trong suốt thời gian làm luận văn.

Tôi xin chân thành cảm ơn sự giúp đỡ quý báu của các thầy, cô giáo đã tham gia giảng dạy lớp cao học khóa 7 của Khoa Toán - Tin trường Đại học Khoa học - Đại học Thái Nguyên, đã truyền thụ và mang đến cho tôi những kiến thức bổ ích trong khoa học và cuộc sống.

Tôi xin cảm ơn sự động viên, giúp đỡ, tạo điều kiện của gia đình, bạn bè, đồng nghiệp, Ban chuyên môn, Ban giám hiệu trường THPT Nguyễn Trung Ngạn - Ân Thi, Hưng Yên đã dành cho tôi trong quá trình nghiên cứu và hoàn thành luận văn.

Thái Nguyên, tháng 11 năm 2015

Vũ Văn Tần

Học viên Cao học Toán K7Y,

Trường ĐH Khoa học - ĐH Thái Nguyên

Mở đầu

Giá trị riêng đóng một phần quan trọng trong các ứng dụng của đại số tuyến tính, là bài toán điển hình trong nhiều lĩnh vực lý thuyết và ứng dụng thực tế. Những phương pháp giải trực tiếp cho kết quả chính xác nhưng chỉ làm được với những bài toán cỡ nhỏ, không đáp ứng được các ứng dụng trong thực tế. Với bài toán có kích thước lớn phương pháp này là không khả thi và các giá trị riêng phải được tính bằng các phương tiện khác. May mắn thay là có tồn tại một số kỹ thuật khác để tìm ra giá trị riêng và vectơ riêng của ma trận. Những phương pháp này, là những phương pháp lặp, làm việc bằng cách liên tục cải tiến xấp xỉ các giá trị riêng, và có thể được chấm dứt bất cứ khi nào những xấp xỉ đạt được một mức độ phù hợp chính xác. Các phương pháp lặp cho kết quả gần đúng nhưng đáp ứng được nhiều ứng dụng trong thực tế, đặc biệt là các ma trận cỡ lớn. Nó hình thành cơ sở của nhiều đại tính toán giá trị riêng ngày nay.

Luận văn này chúng tôi đã tìm hiểu và trình bày "Về một số thuật toán tính giá trị riêng của ma trận cỡ lớn". Ngoài phần mở đầu và kết luận, luận văn này gồm ba chương.

Chương 1: Kiến thức chuẩn bị. Chương này nhắc lại sơ lược các kiến thức trong đại số tuyến tính như một số khái niệm và ký hiệu, bài toán giá trị riêng và không gian con Krylov.

Chương 2: Một số phương pháp tìm giá trị riêng. Nội dung của chương này nhằm trình bày phương pháp lũy thừa, phương pháp Arnoldi và phương pháp Lanczos.

Chương 3: Ví dụ số. Chương này trình bày một vài giải thích cho phương pháp Arnoldi và phương pháp Lanczos là thuật toán QR cơ bản, thuật toán chia để trị của

Cuppen, cuối cùng là một số ví dụ số.

Kết quả làm việc chính của chúng tôi là chạy những thuật toán đã biết trên MATLAB với những ma trận lớn đươc lấy từ thực tiễn.

Dù đã nghiêm túc nghiên cứu và rất cố gắng thực hiện luận văn, nhưng với thời gian hạn chế cùng nhiều lý do khác, luận văn chắc chắn không tránh khỏi những thiếu sót. Chúng tôi mong nhận được những ý kiến đánh giá, phê bình để luận văn này hoàn chỉnh và nhiều ý nghĩa hơn.

Thái Nguyên, ngày 01 tháng 11 năm 2015

Vũ Văn Tần

Học viên Cao học Toán lớp Y, khóa 01/2014 - 01/2016

Chuyên ngành Toán ứng dụng

Trường Đại học Khoa học - Đại học Thái Nguyên

Email: `vuvantanntn@gmail.com`

Chương 1

Kiến thức chuẩn bị

Chương 1 được viết dựa trên tài liệu tham khảo [1], [3], [4].

1.1 Nhắc lại sơ lược kiến thức trong đại số tuyến tính

1.1.1 Tầm quan trọng của giá trị riêng

Trong vật lý, giá trị riêng thường gắn với các dao động. Các đối tượng như dây đàn, trống, cầu,... dao động ở tần số nhất định. Và trong một số tình huống chúng dao động rất nhiều đến mức bị phá hủy. Ngày 07 tháng 11 năm 1940, cây cầu Tacoma Narrows, Washington, Hoa Kỳ bị sập sau khi khai trương gần nửa năm. Gió mạnh kích thích cây cầu quá nhiều khiến cây cầu bị sụp đổ. Một vài năm trước đây cây cầu đi bộ Thiên niên kỷ ở London bắt đầu lắc lư và bị đóng cửa. Đây là những ví dụ nổi bật của cấu trúc dao động.

Nhưng giá trị riêng xuất hiện ở nhiều nơi khác. Điện trường tại cyclotrones, một hình thức đặc biệt của máy gia tốc hạt có dao động một cách chính xác để đẩy nhanh tiến độ các hạt tích điện quay tròn quanh tâm của nó. Các giải pháp của phương trình Schrodinger từ vật lý lượng tử và hóa học lượng tử có những giải pháp tương ứng với dao động của các mô hình phân tử. Các giá trị riêng tương ứng với mức năng lượng mà phân tử có thể chiếm. Nhiều giá trị đặc trưng trong khoa học là giá trị riêng.

Xét dao động dây là sự dịch chuyển của các vị trí tại x, $0 < x < L$, và thời gian t được ký hiệu là $u(x,t)$. Chúng ta có phương trình vi phân có dạng

$$-\rho(x)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x}\left(p(x)\frac{\partial u}{\partial x}\right) + q(x)u(x,t) = 0, \tag{1.1}$$

với $u(0,t) = u(1,t) = 0$. Ở đây $\rho(x)$ đóng vai trò của mật độ khối lượng, $p(x)$ là modul đàn hồi khác nhau tại địa phương.

Từ vật lý chúng tôi biết rằng $\rho(x) > 0$ và $p(x) > 0$ với mọi x. Để đơn giản chúng tôi giả sử rằng $\rho(x) = 1$. Để tìm u trong (1.1) chúng tôi phân tích

$$u(x,t) = v(t)w(x), \tag{1.2}$$

trong đó v là một hàm mà chỉ phụ thuộc vào thời gian t, trong khi w chỉ phụ thuộc vào biến không gian x. Với phân tích này (1.1) trở thành

$$v"(t)w(x) - v(t)(p(x)w'(x))' - q(x)v(t)w(x) = 0. \tag{1.3}$$

Bây giờ chúng tôi rút các biến phụ thuộc vào t theo biến phụ thuộc vào x

$$\frac{v''(t)}{v(t)} = \frac{1}{w(x)}(p(x)w'(x))' + q(x).$$

Chúng tôi có thể thay đổi t và x độc lập với nhau mà không cần thay đổi giá trị trên mỗi vế của phương trình. Do đó, mỗi vế của phương trình phải bằng một giá trị không đổi, chúng tôi biểu thị giá trị này bằng λ. Như vậy, từ vế trái chúng tôi có được phương trình

$$-v''(t) = \lambda v(t).$$

Phương trình này có nghiệm $v(t) = a.\cos(\sqrt{\lambda}t) + b.\sin(\sqrt{\lambda}t)$ với giả sử $\lambda > 0$. Vế bên phải của (1.3) cho ta bài toán

$$-(p(x)w'(x))' + q(x)w(x) = \lambda w(x), \qquad w(0) = w(1) = 0. \tag{1.4}$$

Một giá trị λ thuộc (1.4) có một nghiệm không tầm thường (tức là khác không) được gọi là một giá trị riêng, w là một hàm riêng tương ứng. Tất cả các giá trị riêng của (1.4) là dương. Bằng phân tích (1.2) chúng tôi nhận được

$$u(x,t) = w(x)[a.\cos(\sqrt{\lambda}t) + b.\sin(\sqrt{\lambda}t)]$$

là một nghiệm của (1.1). Ta thấy (1.4) có vô số các giá trị riêng thực dương $0 < \lambda_1 < \lambda_2 < ... < \lambda_k$, ($\lambda_k \to \infty$ khi $k \to \infty$), mỗi nghiệm khác không $w(x)$ của (1.4) chỉ

cho ta những giá trị đặc biệt λ_k. Vì vậy, nghiệm chung của (1.1) có dạng

$$u(x,t) = \sum_{k=0}^{\infty} w_k(x)[a_k.\cos(\sqrt{\lambda_k}t) + b_k.\sin(\sqrt{\lambda_k}t)].$$

Các hệ số a_k và b_k được xác định bởi các điều kiện ban đầu và kết thúc. Chúng tôi giả sử

$$u(x,0) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k w_k(x) = u_0(x),$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{\lambda_k} b_k w_k(x) = u_1(x).$$

Ở đây u_0 và u_1 là các hàm đã cho. Các w_k tạo thành một cơ sở trực giao trong không gian của các hàm khả tích vuông $L_2(0,1)$. Vì vậy không khó khăn để tính toán các hệ số a_k và b_k. Ta thấy rằng bài toán khó là giải quyết bài toán giá trị riêng (1.4).

Phương trình (1.4) có thể được giải quyết chỉ trong phân tích tình huống rất đặc biệt, chẳng hạn nếu tất cả các hệ số là hằng số. Nói chung phương pháp số là cần thiết để giải quyết vấn đề của bài toán (1.4). Để giải quyết bài toán (1.4) chúng tôi xấp xỉ $w(x)$ bởi giá trị của nó tại các điểm rời rạc $x_i = ih,\ h = 1/(n+1),\ i = 1, ..., n.$. Tại thời điểm x_i chúng tôi xấp xỉ các đạo hàm bởi các điểm khác biệt hữu hạn. Đầu tiên chúng tôi viết

$$\frac{d}{dx}g(x_i) \approx \frac{g(x_{i+\frac{1}{2}}) - g(x_{i-\frac{1}{2}})}{h}.$$

Cho $g = p\dfrac{dw}{dx}$ chúng tôi nhận được

$$g(x_{i+\frac{1}{2}}) = p(x_{i+\frac{1}{2}})\frac{w(x_{i+1}) - w(x_i)}{h}$$

và cuối cùng, cho $i = 1, \ldots, n$,

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx}\left(p\frac{dw}{dx}(x_i)\right) &\approx -\frac{1}{h}\left[p(x_{i+\frac{1}{2}})\frac{w(x_{i+1}) - w(x_i)}{h} - p(x_{i-\frac{1}{2}})\frac{w(x_i) - w(x_{i-1})}{h}\right] \\ &= \frac{1}{h^2}[p(x_{i-\frac{1}{2}})w_{i-1} + (p(x_{i-\frac{1}{2}}) + p(x_{i+\frac{1}{2}}))w_i + p(x_{i+\frac{1}{2}})w_{i+1}]. \end{aligned}$$

Lưu ý rằng ở các điểm cuối khoảng $w_0 = w_{n+1} = 0$.

Chúng tôi thu thập tất cả các phương trình trong một phương trình ma trận