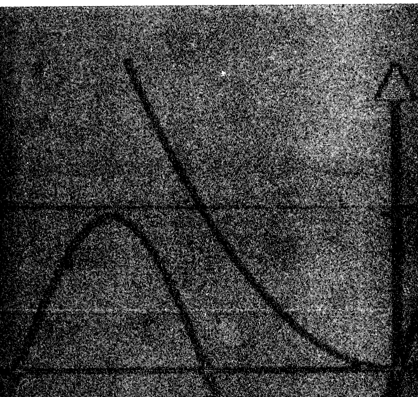
GIÁO TRÌNH
PHƯƠNG PHÁP TÍNH



NHÀ XUẤT BẢN
ĐẠI HỌC QUỐC GIA TP. HỒ CHÍ MINH

ĐẠI HỌC QUỐC GIA THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH
TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA

Lê Thái Thanh

GIÁO TRÌNH
PHƯƠNG PHÁP TÍNH

(Tái bản lần thứ hai có sửa chữa, bổ sung)

NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC QUỐC GIA
THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH – 2023

Mục lục

Mục lục 3

Lời nói đầu 7

Lời nói đầu cho lần tái bản 9

1 PHƯƠNG TRÌNH PHI TUYẾN **11**

1.1 Sai số 11

1.2 Giải phương trình $f(x) = 0$ 15

1.3 Phương pháp chia đôi 18

1.4 Phương pháp lặp đơn 20

1.5 Phương pháp Newton 25

1.6 Phương pháp dây cung 29

1.7 Phương pháp Muller 31

1.8 Áp dụng 33

1.8.1 Phương trình Van der Waals đối với chất khí 33

1.8.2 Bài toán về mạch điện 35

Bài tập chương 1 36

2 HỆ PHƯƠNG TRÌNH TUYẾN TÍNH **39**

2.1 Phương pháp Gauss 41

2.2 Các phương pháp phân rã 45

2.2.1 Phương pháp phân rã LU 46

2.2.2 Phương pháp Choleski 51

2.3 Chuẩn véc-tơ và chuẩn ma trận 54

2.4 Phương pháp lặp 57

2.4.1 Phương pháp Jacobi 60

2.4.2 Phương pháp Gauss-Seidel 64
2.5 Áp dụng 67
2.5.1 Phân tích lực trong giàn tĩnh 67
2.5.2 Dòng điện và điện thế trong mạch điện trở 68
Bài tập chương 2 70

3 NỘI SUY VÀ XẤP XỈ HÀM 74
3.1 Đa thức nội suy Lagrange 76
3.2 Đa thức nội suy Newton 82
3.3 Đa thức nội suy Hermite 86
3.4 Spline bậc ba 89
3.4.1 Spline bậc ba tự nhiên 91
3.4.2 Spline bậc ba ràng buộc 93
3.5 Đường cong tham số 96
3.6 Bài toán xấp xỉ hàm thực nghiệm 100
3.7 Áp dụng 103
Bài tập chương 3 105

4 ĐẠO HÀM VÀ TÍCH PHÂN 108
4.1 Tính gần đúng đạo hàm 108
4.2 Công thức Newton-Cotes 111
4.2.1 Công thức hình thang 112
4.2.2 Công thức Simpson 114
4.3 Công thức cầu phương Gauss 117
4.4 Tích phân suy rộng 121
4.5 Áp dụng 124
4.5.1 Xác định nhiệt lượng của vật liệu 124
4.5.2 Xác định cường độ dòng điện 125
Bài tập chương 4 126

5 PHƯƠNG TRÌNH VI PHÂN 129

5.1 Bài toán Cauchy 129
5.1.1 Công thức Euler 130
5.1.2 Công thức Euler cải tiến 130
5.1.3 Công thức Runge-Kutta 131
5.1.4 Hệ phương trình vi phân 137
5.1.5 Phương trình vi phân cấp cao 140
5.2 Bài toán biên tuyến tính cấp hai 141
5.2.1 Phương pháp sai phân hữu hạn 141
5.2.2 Phương pháp bắn 144
5.3 Phương trình vi phân đạo hàm riêng 147
5.3.1 Phương trình parabolic 147
5.3.2 Phương trình hyperbolic 152
5.3.3 Phương trình elliptic 155
Bài tập chương 5 158

CHỈ DẪN VÀ TRẢ LỜI **162**
Chỉ dẫn và trả lời bài tập chương 1 162
Chỉ dẫn và trả lời bài tập chương 2 166
Chỉ dẫn và trả lời bài tập chương 3 170
Chỉ dẫn và trả lời bài tập chương 4 174
Chỉ dẫn và trả lời bài tập chương 5 177
Tài liệu tham khảo 182

Lời nói đầu cho lần tái bản

Trong lần tái bản này chúng tôi bỏ chương Sai số và xem nó như một phần nhỏ của chương 1. Chúng tôi cũng bổ sung thêm những phần nhỏ trong các chương như: đường cong tham số, tính gần đúng tích phân suy rộng, phương pháp bắn giải bài toán biên tuyến tính và các dạng cơ bản của phương trình vi phân đạo hàm riêng: phương trình parabolic, phương trình hyperbolic, phương trình elliptic. Các phần này cũng rất cần thiết để giải các bài toán trong kỹ thuật. Chúng tôi cũng soạn lại và bổ sung thêm các bài tập cho sinh viên thực hành các thuật toán đã học.

Ngoài ra các thuật toán còn được lập trình bằng ngôn ngữ Python khá thông dụng hiện nay. Tuy nhiên các hàm viết bằng Python chỉ thể hiện phần chính của thuật toán, không kiểm tra các điều kiện. Cho nên khi áp dụng vào trong các bài toán cụ thể, bạn đọc phải sửa lại cho đúng với nhu cầu của mình.

Một lần nữa xin chân thành cảm ơn các thầy cô trong Bộ môn Toán Ứng dụng - Trường Đại học Bách khoa TP. HCM đã đóng góp nhiều ý kiến quý báu cho việc hoàn thành lần tái bản này.

TP. HCM, ngày 11 tháng 07 năm 2023

Tác giả

bản như Lagrange, Newton, Hermite, spline bậc ba cùng với giải bài toán xấp xỉ hàm thực nghiệm bằng phương pháp bình phương bé nhất.

Chương 5: Đạo hàm và tích phân. Trình bày các công thức tính gần đúng đạo hàm dựa trên các đa thức nội suy và tính gần đúng tích phân xác định như công thức Newton-Cotes, công thức cầu phương Gauss.

Chương 6: Phương trình vi phân. Trình bày bài toán Cauchy với các công thức Euler, Euler cải tiến và Runge-Kutta đối với một phương trình hoặc hệ phương trình vi phân cấp một. Chương này cũng xét bài toán biên tuyến tính cấp hai với phương pháp sai phân hữu hạn.

Để nắm bắt tốt nội dung môn học, sinh viên cần phải trang bị các kiến thức cơ bản của các môn học trước như Giải tích 1, Giải tích 2, Đại số, Tin học đại cương, v.v.

Chúng tôi xin chân thành cảm ơn quý thầy, cô và đồng nghiệp đã dành nhiều thời gian đọc bản thảo và đóng góp những ý kiến xác đáng. Những đóng góp này đã làm cho giáo trình ngày càng hoàn thiện hơn. Tuy nhiên, những thiếu sót là không tránh khỏi.

Mọi ý kiến đóng góp của bạn đọc xin gửi về:

Bộ môn Toán ứng dụng, Trường Đại học Bách khoa, ĐHQG TP HCM,

104 Nhà B4, 268 Lý Thường Kiệt, P.14, Q.10, TP HCM.

Điện thoại: 08-8647256 (ext. 5305)

E-mail: tlethai@hcmut.edu.vn

TP. HCM, ngày 20 tháng 03 năm 2017

Tác giả

Lời nói đầu cho lần tái bản

Trong lần tái bản này chúng tôi bỏ chương Sai số và xem nó như một phần nhỏ của chương 1. Chúng tôi cũng bổ sung thêm những phần nhỏ trong các chương như: đường cong tham số, tính gần đúng tích phân suy rộng, phương pháp bắn giải bài toán biên tuyến tính và các dạng cơ bản của phương trình vi phân đạo hàm riêng: phương trình parabolic, phương trình hyperbolic, phương trình elliptic. Các phần này cũng rất cần thiết để giải các bài toán trong kỹ thuật. Chúng tôi cũng soạn lại và bổ sung thêm các bài tập cho sinh viên thực hành các thuật toán đã học.

Ngoài ra các thuật toán còn được lập trình bằng ngôn ngữ Python khá thông dụng hiện nay. Tuy nhiên các hàm viết bằng Python chỉ thể hiện phần chính của thuật toán, không kiểm tra các điều kiện. Cho nên khi áp dụng vào trong các bài toán cụ thể, bạn đọc phải sửa lại cho đúng với nhu cầu của mình.

Một lần nữa xin chân thành cảm ơn các thầy cô trong Bộ môn Toán Ứng dụng - Trường Đại học Bách khoa TP. HCM đã đóng góp nhiều ý kiến quý báu cho việc hoàn thành lần tái bản này.

TP. HCM, ngày 11 tháng 07 năm 2023

Tác giả

PHƯƠNG TRÌNH PHI TUYẾN

Mục lục

1.1 Sai số **11**
1.2 Giải phương trình $f(x) = 0$ **15**
1.3 Phương pháp chia đôi **18**
1.4 Phương pháp lặp đơn **20**
1.5 Phương pháp Newton **25**
1.6 Phương pháp dây cung **29**
1.7 Phương pháp Muller **31**
1.8 Áp dụng **33**
1.8.1 Phương trình Van der Waals đối với chất khí . . 33
1.8.2 Bài toán về mạch điện 35
Bài tập chương 1 . . . . **36**

§1.1 SAI SỐ

Trong hầu hết các bài toán kỹ thuật, chúng ta thường không thể xác định được giá trị chính xác của một đại lượng mà chỉ làm việc với giá trị gần đúng của nó. Do đó, việc tìm hiểu sự sai lệch giữa giá trị chính xác và giá trị gần đúng là yêu cầu bắt buộc trước khi sử dụng các giá trị gần đúng trong các phép toán tiếp theo. Độ sai lệch giữa giá trị gần đúng và giá trị chính xác được gọi là *sai số*.

Số a được gọi là số gần đúng của số chính xác A nếu a khác A không đáng kể và được dùng thay cho A trong tính toán. Ta ký hiệu là $a \approx A$ (đọc là a xấp xỉ A). Ví dụ, số gần đúng $a = 3.14$ được sử dụng để thay thế số chính xác $A = \pi$; số gần đúng $a = 0.33$ dùng để thay thế số chính xác $A = \dfrac{1}{3}$, v.v... Đại lượng

$$\Delta = |a - A|$$

được gọi là *sai số tuyệt đối* của số gần đúng a so với A. Trong thực tế, do không biết A nên không tính được Δ. Do đó ta thường ước lượng một đại lượng dương Δ_a càng bé càng tốt thoả điều kiện

$$|A - a| \leqslant \Delta_a \tag{1.1}$$

được gọi là *sai số tuyệt đối giới hạn* của số gần đúng a so với A. Từ công thức (1.1) ta có: $a - \Delta_a \leqslant A \leqslant a + \Delta_a$. Tuy nhiên, ta thường viết bất đẳng thức trên dưới dạng $A = a \pm \Delta_a$.

Sai số tương đối giới hạn của số gần đúng a so với A là đại lượng δ_a được tính theo công thức

$$\delta_a = \frac{|A - a|}{|A|} \approx \frac{\Delta_a}{|a|} \quad (a \neq 0,\ A \neq 0)$$

Chú ý rằng, sai số tuyệt đối giới hạn là đại lượng có thứ nguyên trùng với thứ nguyên của đại lượng cần đo hoặc cần tính toán, trong khi sai số tương đối giới hạn là đại lượng không có thứ nguyên. Do đó trong thực hành, ta thường nhân sai số tương đối giới hạn với 100 để tính bằng phần trăm.

Ví dụ 1.1: Vận tốc của một vật thể đo được là $v = 2.8\ m/s$ với sai số 0.5%. Khi đó sai số tuyệt đối là: $\Delta_v = \dfrac{0.5}{100} \cdot 2.8\ m/s = 0.014\ m/s$.

Ví dụ 1.2: Đo độ dài hai đoạn thẳng ta được $a = 10\ cm$ và $b = 1\ cm$ với $\Delta_a = \Delta_b = 0.01\ cm$. Khi đó ta có $\delta_a = \dfrac{0.01}{10} = 0.1\%$ trong khi $\delta_b = \dfrac{0.01}{1} = 1\%$ hay $\delta_b = 10\delta_a$.

Hiển nhiên là phép đo a chính xác hơn phép đo b mặc dù $\Delta_a = \Delta_b$. Như vậy, độ chính xác của một phép đo thể hiện qua sai số tương đối.

Bây giờ ta tìm công thức tổng quát của sai số. Giả sử phải tìm đại lượng y theo công thức

$$y = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

Gọi $\bar{x}_i, \bar{y}$ và $x_i, y,\ i = 1, 2, \ldots, n$, là các giá trị chính xác và giá trị gần đúng của đối số và hàm số. Nếu f là hàm khả vi liên tục thì

$$|y - \bar{y}| = |f(x_1, x_2, \ldots, x_n) - f(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \ldots, \bar{x}_n)| \approx \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\partial f}{\partial x_i}\right| |x_i - \bar{x}_i|$$

trong đó các đạo hàm riêng $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ được tính tại các điểm trung gian. Do $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ liên tục và Δ_{x_i} khá bé, ta có thể xem

$$\Delta_y = \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1, x_2, \ldots, x_n) \right| \Delta_{x_i} \tag{1.2}$$

là sai số tuyệt đối cần tìm của hàm số và, do đó, ta có công thức tính sai số tương đối:

$$\delta_y = \frac{\Delta_y}{|y|} = \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial (\ln f)}{\partial x_i} \right| \Delta_{x_i} \tag{1.3}$$

Ví dụ 1.3: Diện tích của hình tròn được tính theo công thức $S = \pi R^2$ với $\pi = 3.14 \pm 0.002$ và $R = 5.25 \pm 0.001(m)$. Tính sai số của $S \approx s = 3.14(5.25)^2 = 86.54625(m^2)$. Xem S như là hàm của hai biến π và R, ta có $\frac{\partial S}{\partial \pi} = R^2$ và $\frac{\partial S}{\partial R} = 2\pi R$. Vậy $\Delta_s = (5.25)^2 \times 0.002 + 2 \times 3.14 \times 5.25 \times 0.001 \approx 0.0881$.

Từ các công thức sai số tổng quát (1.2) và (1.3), ta thu được đánh giá sai số của một số trường hợp đặc biệt sau.

Trường hợp 1: Xét hàm $f(x_1, \ldots, x_n) = \pm x_1 \pm \cdots \pm x_n$. Khi đó $\left|\frac{\partial f}{\partial x_i}\right| = 1, \forall i = \overline{1, n}$. Từ công thức (1.2) ta được $\Delta_y = \Delta_{x_1} + \cdots + \Delta_{x_n}$. Nói cách khác, sai số tuyệt đối của một tổng bằng tổng các sai số tuyệt đối.

Trường hợp 2: Xét hàm $f(x_1, \ldots, x_n) = x_1 x_2 \ldots x_n$. Khi đó $\left|\frac{\partial \ln f}{\partial x_i}\right| = \frac{1}{|x_i|}$. Từ công thức (1.3) ta được $\delta_y = \delta_{x_1} + \cdots + \delta_{x_n}$. Nói cách khác, sai số tương đối của một tích bằng tổng các sai số tương đối.

Bây giờ xét a là một số thập phân, khi đó ta có thể viết a dưới dạng

$$\begin{cases} a = \alpha_m \alpha_{m-1} \ldots \alpha_1 \alpha_0, \alpha_{-1} \alpha_{-2} \ldots \alpha_{-n} = \sum\limits_{k=-n}^{m} \alpha_k 10^k \\ m, n \in \mathbb{N},\ m \geqslant 0,\ n \geqslant 1,\ \alpha_m \neq 0,\ \alpha_k \in \{0, 1, 2 \ldots, 9\} \end{cases} \tag{1.4}$$

Ví dụ, số $a = 12.3456$ được viết dưới dạng

$$a = 1 \times 10^1 + 2 \times 10^0 + 3 \times 10^{-1} + 4 \times 10^{-2} + 5 \times 10^{-3} + 6 \times 10^{-4}.$$

Làm tròn một số thập phân a theo cách viết (1.4) là bỏ một số các chữ số bên phải a sau dấu phẩy thập phân để được một số a^* ngắn gọn hơn và gần đúng nhất so với a. Giả sử ta muốn làm tròn đến chữ số thứ k ($1 \leqslant k < n$) sau dấu phẩy thập phân của số a, ta xét chữ số thứ $k+1$. Nếu chữ số thứ $k+1$ lớn hơn hay bằng 5, ta tăng chữ số thứ k lên một đơn vị; còn nếu chữ số thứ $k+1$ nhỏ hơn 5, giữ nguyên chữ số thứ k. Sau đó bỏ phần đuôi từ chữ số thứ $k+1$ trở đi. Sai số thực sự của a^* so với a được gọi là *sai số làm tròn*: $\theta_{a*} = |a - a^*|$. Khi đó sai số tuyệt đối của a^* so với A được đánh giá như bởi: $|a^* - A| \leqslant |a^* - a| + |a - A| \leqslant \theta_{a*} + \Delta_a = \Delta_{a*}$.

Vì $\theta_{a*} \geqslant 0$ nên $\Delta_{a*} \geqslant \Delta_a$, nên sau khi làm tròn sai số tăng lên. Do đó trong thực tế tính toán ta tránh làm tròn các phép toán trung gian, chỉ làm tròn kết quả cuối cùng.

Trường hợp làm tròn số trong bất đẳng thức, ta sử dụng các khái niệm *làm tròn lên* và *làm tròn xuống*. Làm tròn lên $a^* = a^+$ hay làm tròn xuống $a^* = a^-$ cần lưu ý đến chiều bất đẳng thức. Ví dụ, $a < 13.9236$ khi làm tròn lên được $a < 13.93$ và $b > 78.6789$ khi làm tròn xuống được $b > 78.67$. Chú ý rằng, do sai số tuyệt đối giới hạn nằm ở phía lớn hơn của bất đẳng thức (1.1), nên *đối với sai số tuyệt đối giới hạn ta phải làm tròn lên.*

Ta xét ví dụ sau để thấy việc làm tròn số có thể dẫn đến sai lầm.

Ví dụ 1.4: Xét tích phân $I_n = \int_0^1 x^n e^{-x}\, dx, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$. Ta nhận thấy với mọi x thuộc $[0, 1]$, $x^n \geqslant 0$ và $e^{-x} > 0$, nên $I_n \geqslant 0$ với mọi $n \in \mathbb{N}$. Bằng cách lấy tích phân từng phần, ta đi đến công thức truy hồi:

$$\begin{cases} I_n = -\dfrac{1}{e} + nI_{n-1}, & n = 1, 2, 3, \ldots \\ I_0 = 1 - \dfrac{1}{e} \end{cases}$$

Đây là công thức đúng dùng để xác định I_n. Bây giờ ta làm tròn số $e \approx 2.71828$; khi đó $\dfrac{1}{e} \approx 0.36788$ và $1 - \dfrac{1}{e} \approx 0.63212$. Ta có công thức gần đúng để xác định I_n:

$$\begin{cases} I_n = -0.36788 + nI_{n-1}, & n = 1, 2, 3, \ldots \\ I_0 = 0.63212 \end{cases}$$

Bảng sau đây cho ta một số giá trị gần đúng của I_n:

n	I_n	n	I_n	n	I_n
1	0.26424	5	0.07112	8	−0.01588
2	0.16060	6	0.05884	9	−0.51080
3	0.11392	7	0.04400	10	−5.47588
4	0.08780				

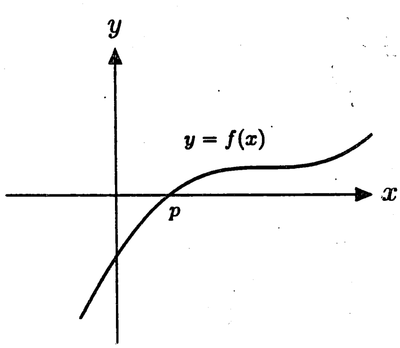
Ta nhận thấy bắt đầu từ $n = 8$ trở đi thì $I_n < 0$. Điều này mâu thuẫn với nhận xét $I_n \geqslant 0$ với mọi $n \in \mathbb{N}$. Kết quả sai lầm này là do chúng ta đã sử dụng giá trị gần đúng của số e sau khi làm tròn, mặc dù ta đã làm tròn "khá chính xác" đến 5 chữ số sau dấu phẩy thập phân.

§1.2 GIẢI PHƯƠNG TRÌNH $f(x) = 0$

Mục đích của chương này là tìm nghiệm gần đúng của phương trình

$$f(x) = 0 \tag{1.5}$$

với $f(x)$ là hàm liên tục trong miền xác định của nó.



Hình 1.1: *Nghiệm của phương trình* $f(x) = 0$

Nghiệm của phương trình (1.5) là giá trị p sao cho $f(p) = 0$. Về mặt hình học, nghiệm của phương trình (1.5) là hoành độ giao điểm của đường cong $y = f(x)$ với trục hoành (Hình vẽ 1.1).

Trong giáo trình này ta chỉ xét những nghiệm đơn và cô lập; nghĩa là có một khoảng đóng $[a, b]$ chứa duy nhất nghiệm đó và $f(a) \cdot f(b) < 0$. Khoảng đóng $[a, b]$ đó được gọi là *khoảng cách ly nghiệm*.

Định lý 1.1: *Nếu hàm $f(x)$ liên tục trên đoạn $[a, b]$ và $f(a)f(b) < 0$ thì phương trình (1.5) có nghiệm trên $[a, b]$. Thêm vào đó, nếu hàm $f(x)$ đơn điệu thì nghiệm là duy nhất.*

Chúng ta có thể tìm các khoảng cách ly nghiệm của một phương trình bằng nhiều cách và định lý trên là một công cụ hữu ích cho mục đích này.

Ví dụ 1.5: Tìm các khoảng cách ly nghiệm của phương trình $f(x) = x^3 - 3x + 1 = 0$. Chúng ta tính giá trị của hàm tại một số điểm đặc biệt và lập bảng giá trị như sau:

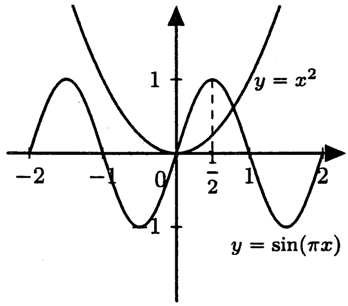
x	-2	-1	0	1	2
$f(x)$	-1	3	1	-1	3

Từ bảng trên ta thấy phương trình có nghiệm nằm trong các khoảng không giao nhau $(-2, -1)$, $(0, 1)$, $(1, 2)$. Vì phương trình bậc ba có tối đa ba nghiệm, nên mỗi đoạn trên chứa duy nhất một nghiệm. Vậy chúng là các khoảng cách ly nghiệm của phương trình đã cho.

Ví dụ 1.6: Xét phương trình $f(x) = x^5 + x - 12 = 0$. Ta có $f'(x) = 5x^4 + 1 > 0$ với mọi x. Cho nên f là hàm đơn điệu tăng. Ta cũng có $f(1) < 0$ và $f(2) > 0$, nên phương trình chỉ có duy nhất nghiệm nằm trong $[1, 2]$.

Ta cũng có thể sử dụng đồ thị để tìm khoảng cách ly nghiệm của phương trình.

Ví dụ 1.7: Xét phương trình $f(x) = x^2 - \sin(\pi x) = 0$. Ta đưa về phương trình tương đương $x^2 = \sin(\pi x)$. Nghiệm là hoành độ giao điểm của hai đường cong. Đồ thị của hai hàm $y = x^2$ và $y = \sin(\pi x)$ có dạng



Từ đồ thị ta thấy phương trình có hai nghiệm: một nghiệm $p_1 = 0$ và nghiệm thứ hai $p_2 \in \left[\frac{1}{2}, 1\right]$.

Thông thường, để tìm nghiệm của phương trình (1.5) chúng ta tiến hành theo các bước sau:

Bước 1: Tìm tất cả các khoảng cách ly nghiệm của phương trình (1.5).

Bước 2: Trong từng khoảng cách ly nghiệm, tìm nghiệm gần đúng của phương trình bằng một phương pháp nào đó. Phương pháp thông dụng nhất là xây dựng một dãy số $\{x_n\}_{n=0}^{\infty}$ sao cho tồn tại giới hạn $\lim\limits_{n\to\infty} x_n = p$.

Bước 3: Cố định n và xem $x_n \approx p$, ta cần đánh giá sai số của x_n so với p, nghĩa là tìm số $\Delta_{x_n} > 0$ sao cho $|p - x_n| \leqslant \Delta_{x_n}$.

Công thức đánh giá sai số tổng quát của nghiệm gần đúng của phương trình (1.5) được thể hiện qua định lý sau.

Định lý 1.2: *Giả sử hàm $f(x)$ liên tục trên $[a, b]$, khả vi trong (a, b). Nếu x^* là nghiệm gần đúng của nghiệm chính xác p trong $[a, b]$ và $\forall x \in [a, b]$, $|f'(x)| \geqslant m > 0$. Thế thì ta có công thức đánh* *giá sai số tổng quát sau đây*

$$|p - x^*| \leqslant \frac{|f(x^*)|}{m} \tag{1.6}$$

Ví dụ 1.8: Xét phương trình $f(x) = x^3 - 5x^2 + 12 = 0$ trong $[-2, -1]$ có nghiệm gần đúng $x^* = -1.37$.

Khi đó $|f'(x)| = |3x^2 - 10x| \geqslant 13 = m$, $\forall x \in [-2, -1]$.

Do đó: $|p - x^*| \leqslant \dfrac{|f(-1.37)|}{13} \approx 0.0034$.

§1.3 PHƯƠNG PHÁP CHIA ĐÔI

Xét phương trình (1.5) có nghiệm chính xác p trong khoảng cách ly nghiệm $[a, b]$ và $f(a)f(b) < 0$. Đặt $a_0 = a, b_0 = b, d_0 = b_0 - a_0 = b - a$. Chia đôi đoạn $[a_0, b_0]$ bởi điểm giữa $x_0 = \dfrac{a_0 + b_0}{2}$. Nếu $f(x_0) = 0$ thì x_0 chính là nghiệm và quá trình dừng lại. Ngược lại, nếu $f(x_0) \cdot f(a_0) < 0$, đặt $a_1 = a_0, b_1 = x_0$; còn nếu $f(x_0) \cdot f(b_0) < 0$, đặt $a_1 = x_0, b_1 = b_0$. Như vậy ta thu được khoảng cách ly nghiệm mới $[a_1, b_1] \subset [a_0, b_0]$ và độ dài $d_1 = b_1 - a_1 = \dfrac{d_0}{2} = \dfrac{b - a}{2}$. Tiếp tục quá trình chia đôi như vậy đến n lần, ta được các kết quả:

$$\begin{cases} a_n \leqslant p \leqslant b_n, & a_n \leqslant x_n = \dfrac{a_n + b_n}{2} \leqslant b_n, \\ f(a_n) \cdot f(b_n) < 0, & d_n = b_n - a_n = \dfrac{b - a}{2^n} \end{cases} \quad \forall n = 0, 1, 2, \ldots \tag{1.7}$$

Như vậy ta được $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$ là dãy tăng và bị chặn trên, còn $\{b_n\}_{n=0}^{\infty}$ là dãy giảm và bị chặn dưới. Do đó chúng cùng hội tụ. Từ (1.7) ta có

$$\lim_{n\to\infty} a_n = \lim_{n\to\infty} b_n = \lim_{n\to\infty} x_n = p \tag{1.8}$$

Thông thường ta sử dụng công thức đánh giá sai số:

$$|p - x_n| \leqslant \frac{b - a}{2^{n+1}} \tag{1.9}$$

Ví dụ 1.9: Cho phương trình $f(x) = 5x^3 - \cos 3x = 0$ trong khoảng cách ly nghiệm $[0, 1]$. Bằng phương pháp chia đôi, hãy tìm nghiệm gần đúng x_5 và đánh giá sai số của nó. Kết quả được cho trong bảng sau:

n	0	1	2	3	4	5
$a_n(-)$	0	0	1/4	3/8	3/8	13/32
$b_n(+)$	1	1/2	1/2	1/2	7/16	7/16
x_n	1/2	1/4	3/8	7/16	13/32	27/64
$sign f(x_n)$	+	−	−	+	−	

Như vậy $x_5 = \dfrac{27}{64}$ và $\Delta_{x_5} = \dfrac{1-0}{2^6} = \dfrac{1}{64}$. Do đó $p = \dfrac{27}{64} \pm \dfrac{1}{64}$.

Thuật toán chia đôi được thể hiện bởi hàm

$$x, tol = bisect(f, a, b, N, eps = None, m = None)$$

với f là hàm số, a, b là hai biên của khoảng cách ly nghiệm $[a, b]$, N là số lần lặp tối đa, eps là sai số và $m = \min_{[a,b]} |f'(x|$. Hàm trả về dãy lặp $x[]$ trong biến x và dãy các sai số tương ứng $tol[]$. Nếu không đưa vào các thông số eps và m, thì hàm chỉ tính dãy lặp $x[]$. Nếu có thông số eps mà không có m, thì hàm tính $tol[n] = |x_n - x_{n-1}|$. Cuối cùng, nếu có thông số m thì hàm tính dãy các sai số $tol[n]$ theo công thức đánh giá sai số tổng quát.

```
def bisect(f, a, b, N, eps=None, m=None):
    x = np.zeros(N + 1, dtype=float)
    tol = np.ones(N + 1, dtype=float)
    fa = f(a)
    n = 0
    while n <= N:
        x[n] = (b + a) / 2.0
        fc = f(x[n])
        if fa * fc > 0:
            a = x[n]
            fa = fc
        else:
            b = x[n]
```

```
        if n > 0 and eps is not None:
            if m is None:
                tol[n] = abs(x[n] - x[n-1])
            else:
                tol[n] = abs(f(x[n])) / m
            if tol[n] < eps:
                break
        n += 1
    return x, tol
```

Phương pháp chia đôi là phương pháp đơn giản nhất để tìm nghiệm gần đúng của phương trình (1.5), tuy nhiên độ chính xác không cao. Thông thường phương pháp chia đôi được sử dụng nếu không thể sử dụng các phương pháp khác hoặc với mục đích thu hẹp khoảng cách ly nghiệm.

§1.4 PHƯƠNG PHÁP LẶP ĐƠN

Đây là phương pháp phổ biến để giải phương trình (1.5) trong khoảng cách ly nghiệm $[a,b]$ chứa nghiệm chính xác p. Trước tiên, từ phương trình (1.5) ta chuyển về dạng tương đương trong $[a,b]$

$$x = g(x). \tag{1.10}$$

Khi đó nghiệm của phương trình (1.10) còn được gọi là *điểm bất động* của hàm $g(x)$. Về mặt hình học, nó là hoành độ giao điểm của đường thẳng $y = x$ và đường cong $y = g(x)$ (Hình 1.2).

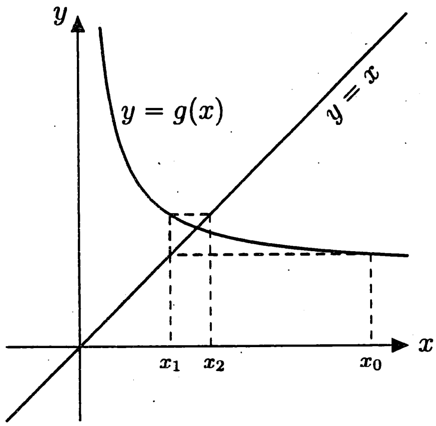
Bây giờ chọn một giá trị ban đầu $x_0 \in [a,b]$ tuỳ ý. Xây dựng dãy lặp $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ theo công thức lặp

$$x_n = g(x_{n-1}) \qquad \forall n = 1,2,3,\dots \tag{1.11}$$

Ta đi tìm điều kiện để cho dãy $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ hội tụ về nghiệm p của phương trình (1.10) và đưa ra công thức đánh giá sai số của x_n so với p. Ta có khái niệm hàm co như sau.

Hàm $g(x)$ được gọi là *hàm co* trong đoạn $[a,b]$ nếu tồn tại một số $q : 0 \leqslant q < 1$, gọi là *hệ số co*, sao cho:

$$\forall x_1, x_2 \in [a,b],\ |g(x_1) - g(x_2)| \leqslant q\,|x_1 - x_2|$$



Hình 1.2: *Ý nghĩa hình học của phương pháp lặp*

Ví dụ 1.10: Xét hàm $g(x) = \sqrt{x}$ trong đoạn $[1,2]$. Ta có $\forall x_1, x_2 \in [1,2]$,

$$|\sqrt{x_1} - \sqrt{x_2}| = \frac{1}{\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2}} |x_1 - x_2| \leqslant \frac{1}{2} |x_1 - x_2|$$

Do đó hàm $g(x) = \sqrt{x}$ là hàm co trong đoạn $[1,2]$ với hệ số co là $q = \frac{1}{2}$.

Ta có các định lý sau đây.

Định lý 1.3: *Nếu $g(x)$ là hàm co trên $[a,b]$, thì nó liên tục trên đó.*

Định lý 1.4: *Nếu $g(x)$ là hàm khả vi liên tục trên $[a,b]$ và với mọi x thuộc $[a,b]$ ta có $|g'(x)| \leqslant q < 1$, thì $g(x)$ là hàm co trên $[a,b]$ với hệ số co là q.*

Ví dụ 1.11: Xét hàm $g(x) = \sqrt[3]{10-x}$ trên đoạn $[0,1]$. Ta có $|g'(x)| = \left|\frac{-1}{3\sqrt[3]{(10-x)^2}}\right| \leqslant \frac{1}{3\sqrt[3]{9^2}} \approx 0.078 = q < 1$. Do đó $g(x)$ là hàm co trên $[0,1]$ với hệ số co $q = 0.078$.

Ví dụ 1.12: Bây giờ xét hàm $g(x) = \dfrac{x^2 - e^x + 2}{3}$ trên đoạn $[0,1]$. Ta có $g'(x) = \dfrac{2x - e^x}{3}$. Khảo sát hàm $g'(x)$ trên đoạn $[0,1]$ cho ta

$$\max_{x\in[0,1]} g'(x) = \frac{2\ln 2 - 2}{3} \approx -0.2046 \quad \text{và} \quad \min_{x\in[0,1]} g'(x) = -\frac{1}{3}$$

Từ đây ta được $\forall x \in [0,1]$, $|g'(x)| \leqslant \dfrac{1}{3} = q < 1$. Do đó $g(x)$ là hàm co trên $[0,1]$ với hệ số co $q = \dfrac{1}{3}$.

Sau đây là một định lý quan trọng và thường được gọi là nguyên lý ánh xạ co. Định lý này là cơ sở của phương pháp lặp đơn.

Định lý 1.5 (Nguyên lý ánh xạ co): *Giả sử $g(x)$ là hàm co trong $[a,b]$ với hệ số co là q. Khi đó với mọi giá trị x_0 ban đầu trong $[a,b]$, dãy lặp $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ xác định theo công thức (1.11) sẽ hội tụ về nghiệm duy nhất p của phương trình (1.10) và ta có công thức đánh giá sai số*

$$|x_n - p| \leqslant \frac{q^n}{1-q}|x_1 - x_0| \tag{1.12}$$

hoặc

$$|x_n - p| \leqslant \frac{q}{1-q}|x_n - x_{n-1}| \tag{1.13}$$

Công thức (1.12) thường được gọi là *công thức đánh giá sai số tiên nghiệm*; còn công thức (1.13) được gọi là *công thức đánh giá sai số hậu nghiệm*

Ví dụ 1.13: Xét phương trình $x^3 + x - 1000 = 0$ trong khoảng cách ly nghiệm $[9,10]$. Chuyển phương trình đã cho về dạng: $x = g(x) = \sqrt[3]{1000 - x}$. Khi đó

$$\forall x \in [9,10], \quad |g'(x)| \leqslant \frac{1}{3\sqrt[3]{990^2}} = q < 1$$

Do đó $g(x)$ là hàm co trên $[9,10]$. Ta cũng dễ dàng kiểm tra rằng $\forall x \in [9,10], g(x) \in [9,10]$. Do đó phương pháp lặp hội tụ. Chọn $x_0 = 10$, xây dựng dãy lặp theo công thức $x_{n+1} = \sqrt[3]{1000 - x_n}, \forall n = 0, 1, 2, \ldots$. Từ công thức (1.12) ta có sai số của nghiệm gần đúng x_n là $|x_n - \overline{x}| \leqslant \dfrac{q}{1-q}|x_n - x_{n-1}| = \Delta_{x_n}$. Ta có bảng sau:

n	x_n	Δ_{x_n}
0	10	
1	9.966554934	0.1127×10^{-3}
2	9.966667166	0.3779×10^{-6}
3	9.966666789	0.1270×10^{-8}
4	9.966666791	0.6735×10^{-11}

Ví dụ 1.14: Bây giờ ta xét phương trình $x = g(x) = \cos x$ có nghiệm duy nhất trong đoạn $[0,1]$. Dễ thấy $g(x)$ là hàm co trong $[0,1]$ với hệ số co $q = \sin 1 < 1$, và $\forall x \in [0,1], g(x) = \cos x \in [0,1]$. Chọn $x_0 = 1$, phương pháp lặp cho ta bảng sau:

n	x_n	Δ_{x_n}
0	1	
1	0.5403023059	2.6049536001
2	0.8575532158	1.7977551565
3	0.6542897905	1.1518260770
...	......	......
32	0.7390859996	0.0000121985
33	0.7390845496	0.0000082171
34	0.7390855264	0.0000055351

Qua hai ví dụ vừa nêu, ta nhận thấy rằng tốc độ hội tụ (thể hiện qua số lần lặp) của phương pháp lặp phụ thuộc vào giá trị của hệ số co q. Nếu hệ số co càng bé (gần với 0), thì phương pháp lặp hội tụ càng nhanh. Ngược lại, nếu hệ số co là lớn (gần với 1), thì phương pháp lặp hội tụ rất chậm. Ví dụ đầu tiên cho thấy đến lần lặp thứ 4, ta đã có nghiệm gần đúng với với sai số nhỏ hơn 10^{-10}. Còn trong ví dụ thứ hai, để đạt được sai số nhỏ hơn 10^{-5}, ta phải cần đến khoảng hơn 30 lần lặp.

Ví dụ 1.15: Xét phương trình $x = g(x) = \dfrac{x^2 - e^x + 2}{3}$ có nghiệm duy nhất trong đoạn $[0, 1]$. Ta đã biết $g(x)$ là hàm co trong $[0, 1]$ với hệ số co $q = \dfrac{1}{3}$ (ví dụ 1.12). Cần tìm số lần lặp n để cho khi chọn $x_0 = 0.5$, phương pháp lặp cho ta nghiệm gần đúng với sai số nhỏ hơn 10^{-5}.

Ta sử dụng công thức đánh giá sai số tiên nghiệm để xác định n.

$$\Delta_{x_n} = \frac{q^n}{1-q} \cdot |x_1 - x_0| < 10^{-5}$$

với $q = 1/3$, $x_0 = 0.5$ và $x_1 = 0.2004262431$. Từ bất đẳng thức trên

$$n > \frac{\ln\left(\dfrac{10^5\,|x_1 - x_0|}{1-q}\right)}{\ln\dfrac{1}{q}} \approx 9.7514$$

Do n nguyên dương nên chọn $n = 10$.

Thuật toán lặp được thể hiện bởi hàm

$$x, tol = iterate(g, x0, N, q = None, post = True, eps = 10**(-4))$$

với g là hàm co, $x0$ là giá trị lặp ban đầu, N là số lần lặp tối đa, q là hệ số co, *post* là thông số kiểu Boolean và *eps* là sai số. Hàm trả về dãy lặp $x[]$ trong biến x và dãy các sai số $tol[]$. Nếu không cho hệ số co q, thì hàm chỉ tính dãy lặp $x[]$. Ngược lại, hàm sẽ tính dãy các sai số theo công thức hậu nghiệm nếu $post = True$ và theo công thức tiên nghiệm nếu $post = False$. Giá trị mặc định của sai số *eps* là 10^{-5}.

```
def iterate(g,x0,N,q=None,post=True,eps=10**(-5)):
    x = np.zeros(N + 1, dtype=float)
    tol = np.ones(N + 1, dtype=float)
    x[0] = x0
    n = 1
    while n <= N:
```

```
        x[n] = g(x[n - 1])
        if q is not None:
            if post:
                tol[n] = q/(1-q)*abs(x[n]-x[n-1])
            else:
                tol[n] = q**n/(1-q)*abs(x[1]-x[0])
            if tol[n] < eps:
                break
        n += 1
    return x, tol
```

Trong ví dụ 1.15, ta thấy nghiệm gần đúng x_{10} của phương trình $x = \dfrac{x^2 - e^x + 2}{3}$ với $x_0 = 0.5$ sẽ xấp xỉ nghiệm chính xác với sai số nhỏ hơn 10^{-5} theo công thức tiên nghiệm. Bây giờ nếu sử dụng chương trình trên ta thu được nghiệm gần đúng $x_9 = 0.25752908$ có sai số $\Delta_{x_9} = 2.92 \times 10^{-6} < 10^{-5}$ theo công thức hậu nghiệm. Do đó, tuỳ theo yêu cầu của bài toán, ta có thể sử dụng một trong hai công thức đánh giá sai số. Tuy nhiên, thông thường công thức hậu nghiệm cho kết quả tốt hơn công thức tiên nghiệm.

§1.5 Phương pháp Newton

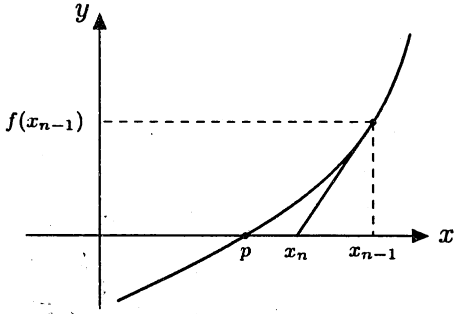
Xét phương trình (1.5) trong khoảng cách ly nghiệm $[a, b]$ chứa duy nhất nghiệm chính xác p. Giả sử hàm $f(x)$ có đạo hàm trong $[a, b]$. Ta xây dựng phương pháp Newton bằng hình học như sau: từ điểm có hoành độ x_{n-1} trên đồ thị của đường cong $y = f(x)$, ta kẻ tiếp tuyến với đường cong (Hình 1.3). Hoành độ giao điểm của tiếp tuyến với trục hoành sẽ là x_n. Phương trình tiếp tuyến có dạng:

$$y - f(x_{n-1}) = f'(x_{n-1})(x - x_{n-1})$$

Cho $y = 0$, $x = x_n$ ta thu được công thức xác định x_n cũng là công thức lặp của phương pháp Newton như sau:

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})} \qquad \forall n = 1, 2, 3, \ldots \tag{1.14}$$

Nói chung, sự hội tụ của dãy lặp Newton phụ thuộc vào cách chọn giá trị lặp ban đầu x_0. Ta có định lý sau.



Hình 1.3: *Phương pháp tiếp tuyến*

Định lý 1.6: *Giả sử hàm $f(x)$ có đạo hàm đến cấp hai liên tục và các đạo hàm $f'(x)$ và $f''(x)$ không đổi dấu trên đoạn $[a, b]$. Khi đó, nếu chọn x_0 thoả điều kiện Fourier $f(x_0)f''(x_0) > 0$, thì dãy lặp $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ xác định theo công thức (1.14) sẽ hội tụ về nghiệm p của phương trình* (1.5).

Chú ý:

- Để đánh giá sai số của phương pháp Newton, ta sử dụng công thức đánh giá sai số tổng quát (1.6).
- Điều kiện Fourier chỉ là điều kiện đủ, không phải là điều kiện cần. Từ điều kiện Fourier, ta có thể đưa ra quy tắc chọn giá trị ban đầu x_0 như sau: Nếu đạo hàm cấp một và đạo hàm cấp hai cùng dấu, thì chọn $x_0 = b$, ngược lại chọn $x_0 = a$.
- Trong phương pháp Newton, điều kiện $f'(x) \neq 0$ trong khoảng cách ly nghiệm $[a, b]$ là tiên quyết. Nếu có một điểm $c \in [a, b]$ để cho $f'(c) = 0$ thì phương pháp thường dùng là chia đôi để loại bỏ điểm c đó trước khi sử dụng phương pháp Newton.

Ví dụ 1.16: Cho một số $A > 0$. Chúng ta muốn tính gần đúng $p = \sqrt{A} \in [a, b]$ với $0 < a < b$. Ta có p là nghiệm của phương trình

$f(x) = x^2 - A = 0$ và công thức lặp Newton có dạng

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})} = x_{n-1} - \frac{x_{n-1}^2 - A}{2x_{n-1}} = \frac{1}{2}\left(x_{n-1} + \frac{A}{x_{n-1}}\right)$$

với mọi $n = 1, 2, 3, \ldots$, và thoả công thức đánh giá sai số:

$$|p - x_n| \leqslant \frac{|f(x_n)|}{m} = \frac{|x_n^2 - A|}{2a} = \Delta_{x_n}$$

Có thể chứng tỏ rằng dãy lặp hội tụ về $\sqrt{A}$ với mọi giá trị lặp dương ban đầu. Với trường hợp $A = 2$, $p = \sqrt{A} \in [1, 2]$, $x_0 = 1$ ta có bảng sau

n	x_n	Δ_{x_n}
0	1.0000000000	
1	1.5000000000	1.25×10^{-1}
2	1.4166666667	3.48×10^{-3}
3	1.4142156863	3.01×10^{-6}
4	1.4142135624	2.26×10^{-12}

Ví dụ 1.17: Bây giờ xét phương trình $f(x) = x^3 - 3x + 1 = 0$ trong khoảng cách ly nghiệm [0, 1]. Ta nhận thấy $f'(x) = 3x^2 - 3$ triệt tiêu tại $x = 1 \in [0, 1]$. Do đó ta dùng phương pháp chia đôi để thu hẹp khoảng cách ly nghiệm. Vì $f(0) > 0$ và $f(0.5) < 0$ nên nghiệm thuộc $[0, 0.5]$, mà trong đó $f'(x) < 0$. Dễ thấy $\forall x \in [0, 0.5], |f'(x)| \geqslant 2.25 = m$ và $f''(x) = 6x \geqslant 0$. Vì đạo hàm cấp một và đạo hàm cấp hai khác dấu, chọn $x_0 = 0$, xây dựng dãy $\{x_n\}_{n=0}^{\infty}$ theo công thức:

$$x_n = x_{n-1} - \frac{x_{n-1}^3 - 3x_{n-1} + 1}{3x_{n-1}^2 - 3} = \frac{2x_{n-1}^3 - 1}{3x_{n-1}^2 - 3}.$$

Khi đó nghiệm gần đúng x_n thoả mãn đánh giá:

$$|\overline{x} - x_n| \leqslant \frac{|x_n^3 - 3x_n + 1|}{2.25} = \Delta_{x_n}.$$

Kết quả tính toán cho ta bảng sau:

n	x_n	Δ_{x_n}
0	0.0000000000	
1	0.3333333333	1.65×10^{-2}
2	0.3472222222	8.70×10^{-5}
3	0.3472963532	2.55×10^{-9}

Thuật toán Newton được thể hiện bởi hàm

$$x, tol = newton(f0, f1, x0, N, m = None, eps = 10 * *(-6))$$

với $f0$ là hàm số và $f1$ là đạo hàm của nó, $x0$ là giá trị lặp ban đầu, N là số lần lặp tối đa, $m = \min_{[a,b]} |f'(x)|$ và eps là sai số. Hàm trả về dãy lặp $x[]$ trong biến x và dãy các sai số $tol[]$. Nếu không có tham số m thì sai số được tính theo công thức $tol[n] = |x_n - x_{n-1}|$. Còn nếu có m thì sai số được tính theo công thức đánh giá sai số tổng quát. Giá trị mặc định của sai số eps là 10^{-6}.

```
def newton(f0, f1, x0, N, m=None, eps=10**(-6)):
    x = np.zeros(N + 1, dtype=float)
    tol = np.ones(N + 1, dtype=float)
    x[0] = x0
    n = 1
    while n <= N:
        x[n] = x[n - 1] - f0(x[n - 1]) / f1(x[n - 1])
        tol[n] = (
            abs(x[n] - x[n - 1])
            if m is None
            else abs(f0(x[n])) / m
        )
        if tol[n] < eps:
            break
        n += 1
    return x, tol
```

Áp dụng cho phương trình $f(x) = x - \cos x = 0$ trong khoảng cách ly nghiệm $[0, 1]$ với $x_0 = 1$, $m = 1$ và sai số $eps = 10^{-6}$, ta được nghiệm xấp xỉ $x_5 = 0.73908513$ và $\Delta_{x_5} \approx 2.85 \times 10^{-10}$.

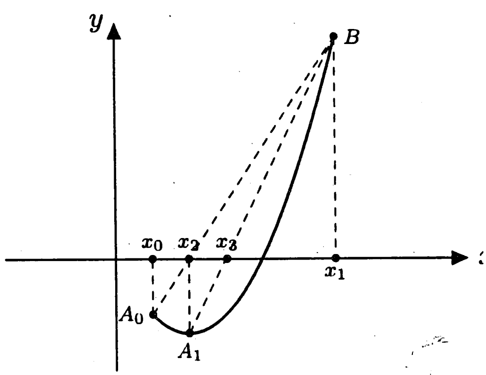
§1.6 PHƯƠNG PHÁP DÂY CUNG

Phương pháp Newton là công cụ hữu hiệu để tìm nghiệm gần đúng của phương trình. Tuy nhiên khó khăn của phương pháp này là cần phải tính được đạo hàm cấp một $f'(x)$ trong mỗi lần lặp. Để khắc phục điều này, trong công thức (1.14) ta xấp xỉ $f'(x_{n-1})$ theo cách như sau. Trước tiên, từ định nghĩa

$$f'(x_{n-1}) = \lim_{x \to x_{n-1}} \frac{f(x) - f(x_{n-1})}{x - x_{n-1}}$$

Nếu x_{n-2} gần với x_{n-1} thì ta có xấp xỉ

$$f'(x_{n-1}) \approx \frac{f(x_{n-2}) - f(x_{n-1})}{x_{n-2} - x_{n-1}} = \frac{f(x_{n-1}) - f(x_{n-2})}{x_{n-1} - x_{n-2}}$$



Hình 1.4: *Phương pháp dây cung*

Thay xấp xỉ này vào trong công thức lặp Newton (1.14), ta thu được

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})(x_{n-1} - x_{n-2})}{f(x_{n-1}) - f(x_{n-2})} \tag{1.15}$$

Đây là công thức lặp của phương pháp dây cung. Ý nghĩa hình học của nó như sau: Với hai xấp xỉ ban đầu x_0 và x_1, xấp xỉ tiếp theo x_2 là hoành độ giao điểm của đường thẳng nối hai điểm $(x_0, f(x_0))$ và $(x_1, f(x_1))$; xấp xỉ x_3 là hoành độ giao điểm của đường thẳng nối hai điểm $(x_1, f(x_1))$ và $(x_2, f(x_2))$, v.v... (Hình 1.4)

Ví dụ 1.18: Xét phương trình $f(x) = x^3 - 3x + 1$ trong khoảng cách ly nghiệm $[0, 0.5]$. Ta sử dụng phương pháp dây cung với $x_0 = 0$ và $x_1 = 0.5$. Để so sánh ta cũng sử dụng phương pháp Newton với $x_0 = 0$. Kết quả được cho trong bảng số sau:

n	Dây cung	Newton
0	0.00000000	0.00000000
1	0.50000000	0.33333333
2	0.36363636	0.34722222
3	0.34605598	0.34729636
4	0.34730453	
5	0.34729636	

Thuật toán dây cung được thể hiện bởi hàm

$$x, tol = secant(f, x0, x1, N, m = None, eps = 10 * *(-6))$$

với f là hàm số, $x0$, $x1$ là các giá trị lặp ban đầu, N là số lần lặp tối đa, $m = \min_{[a,b]} |f'(x)|$ và eps là sai số. Hàm trả về dãy lặp $x[]$ trong biến x và dãy các sai số $tol[]$. Nếu không có thông số m thì sai số được tính theo công thức $tol[n] = |x_n - x_{n-1}|$. Còn nếu có m thì sai số được tính theo công thức đánh giá sai số tổng quát. Giá trị mặc định của sai số eps là 10^{-6}.

```
def secant(f, x0, x1, N, m=None, eps=10**(-6)):
    x = np.zeros(N + 1, dtype=float)
    tol = np.ones(N + 1, dtype=float)
    x[0] = x0; x[1] = x1
    n = 2
    while n <= N:
        x[n] = x[n-1] - f(x[n-1]) * (x[n-1] - x[n-2])
        / (f(x[n-1]) - f(x[n-2]))
        tol[n] = abs(x[n]-x[n-1]) if m is None
                else abs(f(x[n]))/m
        if tol[n] < eps:
            break
        n += 1
    return x, tol
```

§1.7 PHƯƠNG PHÁP MULLER

Trong phần này ta xét phương trình đa thức, nghĩa là phương trình $P(x) = 0$, với $P(x) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + a_1 x + a_0$ là một đa thức bậc n ($a_n \neq 0$), các hệ số a_i có thể là các số thực hoặc phức.

Chúng ta xét phương pháp được đưa ra bởi Muller. Phương pháp này có thể áp dụng cho mọi phương trình, tuy nhiên nó hữu dụng khi tìm nghiệm của đa thức. Tương tự như phương pháp dây cung, từ hai xấp xỉ ban đầu để tìm xấp xỉ thứ ba, phương pháp Muller sử dụng ba xấp xỉ ban đầu x_0, x_1 và x_2 để tìm xấp xỉ tiếp theo x_3 bằng cách tìm giao điểm của trục hoành với parabol đi qua ba điểm $A_0(x_0, f(x_0))$, $A_1(x_1, f(x_1))$ và $A_2(x_2, f(x_2))$. Gọi $P(x)$ là đa thức bậc hai mà đồ thị của nó đi qua ba điểm A_0, A_1 và A_2:

$$P(x) = a(x - x_2)^2 + b(x - x_2) + c$$

Các hệ số a, b và c được xác định từ các điều kiện:

$$\begin{aligned}
f(x_0) &= P(x_0) = a(x_0 - x_2)^2 + b(x_0 - x_2) + c \\
f(x_1) &= P(x_1) = a(x_1 - x_2)^2 + b(x_1 - x_2) + c \\
f(x_2) &= P(x_2) = a(0)^2 + b(0) + c = c
\end{aligned}$$

Giải ra ta được

$$c = f(x_2) \tag{1.16}$$

$$b = \frac{(x_0 - x_2)^2[f(x_1) - f(x_2)] - (x_1 - x_2)^2[f(x_0) - f(x_2)]}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)(x_1 - x_2)} \tag{1.17}$$

$$a = \frac{(x_1 - x_2)[f(x_0) - f(x_2)] - (x_0 - x_2)[f(x_1) - f(x_2)]}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)(x_1 - x_2)} \tag{1.18}$$

Để tìm x_3, là nghiệm của $P(x)$, ta áp dụng công thức tìm nghiệm của phương trình bậc hai $P(x) = 0$:

$$x_3 - x_2 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{-2c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

Công thức trên cho ta hai giá trị của x_3. Theo phương pháp Muller, dấu $\pm$ ở trước dấu căn ở mẫu số sẽ được chọn sao cho nó cùng dấu với b. Khi đó:

$$x_3 = x_2 + \frac{-2c}{b + \text{sign}(b) \cdot \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

với a, b, c được cho bởi các công thức (1.16) đến (1.18). Sau khi chọn xong x_3, ta sử dụng x_1, x_2 và x_3 để tìm x_4, v.v... Phương pháp cứ tiếp tục cho đến khi thoả điều kiện dừng cho trước. Trong quá trình tính toán, ta thấy có tham gia biểu thức $\sqrt{b^2 - 4ac}$, cho nên phương pháp Muller có thể tìm nghiệm phức của đa thức nếu $b^2 - 4ac < 0$.

Thuật toán của phương pháp Muller như sau

$$x, tol = muller(f, x0, x1, x2, N, eps = 10 ** (-6))$$

Ở đây f là hàm số, $x0$, $x1$, $x2$ là các giá trị lặp ban đầu, N là số lần lặp tối đa và eps là sai số. Hàm trả về dãy lặp $x[]$ trong biến x và dãy các sai số $tol[]$.

```
def muller(f, x0, x1, x2, N, eps=10**(-6)):
    x = np.zeros(N + 1, dtype=complex)
    tol = np.ones(N + 1, dtype=float)
    x[0] = x0
    x[1] = x1
    x[2] = x2
    h1 = x[1] - x[0]
    h2 = x[2] - x[1]
    d1 = (f(x[1]) - f(x[0])) / h1
    d2 = (f(x[2]) - f(x[1])) / h2
    d = (d2 - d1) / (h2 + h1)
    n = 3
    while n <= N:
        b = d2 + h2 * d
        DD = b * b - 4 * f(x[n - 1]) * d
        D = cmath.sqrt(DD)
        if abs(b - D) < abs(b + D):
            E = b + D
        else:
            E = b - D
        h = -2 * f(x[n - 1]) / E
        x[n] = x[n - 1] + h
        tol[n] = abs(h)
        if tol[n] < eps:
```

```
            break
        h1 = x[n - 1] - x[n - 2]
        h2 = x[n] - x[n - 1]
        d1 = (f(x[n - 1]) - f(x[n - 2])) / h1
        d2 = (f(x[n]) - f(x[n - 1])) / h2
        d = (d2 - d1) / (h2 + h1)
        n += 1
    return x, tol
```

Ví dụ 1.19: Xét phương trình $f(x) = x^3 + 2x^2 + 3x - 8$. Bằng cách chọn các giá trị ban đầu (x_0, x_1, x_2) khác nhau và sử dụng thuật toán Muller với sai số nhỏ hơn 10^{-5} ta có bảng kết quả sau:

(1.0, 1.5, 2.0)		(−3.0, −2.5, −2.0)		(3.0, 3.5, 4.0)	
n	x_n	n	x_n	n	x_n
0	1.0	0	−3.0	0	3.0
1	1.5	1	−2.5	1	3.5
2	2.0	2	−2.0	2	4.0
3	1.1866	3	$-1.4091 + 1.4820j$	3	$1.3400 - 0.9615j$
4	1.1826	4	$-1.3895 + 2.0354j$	4	$0.4868 - 0.8961j$
5	1.1827	5	$-1.6023 + 2.0736j$	5	$-0.5752 - 0.8528j$
6	1.1827	6	$-1.5912 + 2.0571j$	6	$-1.7620 - 1.2359j$
		7	$-1.5914 + 2.0571j$	7	$-1.8354 - 2.2709j$
		8	$-1.5914 + 2.0571j$	8	$-1.5803 - 2.0275j$
				9	$-1.5913 - 2.0565j$
				10	$-1.5914 - 2.0571j$
				11	$-1.5914 - 2.0571j$

§1.8 ÁP DỤNG

1.8.1 PHƯƠNG TRÌNH VAN DER WAALS ĐỐI VỚI CHẤT KHÍ

Đối với chất khí lý tưởng ta có công thức

$$pV = nRT \tag{1.19}$$

với $R = 0.082054L \cdot atm/(mol \cdot K)$, p là áp suất tuyệt đối; T là nhiệt độ tuyệt đối, V là thể tích và n là số mole. Mặc dù được sử dụng rộng rãi (trong chương trình phổ thông) nhưng công thức (1.19) còn rất nhiều hạn chế, nhất là đối với khí thực. Khi đó ta thường dùng phương trình trạng thái của chất khí sau

$$\left(p + \frac{a}{\nu^2}\right)(\nu - b) = RT \tag{1.20}$$

và được gọi là phương trình Van der Waals. Trong phương trình (1.20), a, b là các hằng số phụ thuộc vào chất khí cụ thể và $\nu = V/n$ là thể tích mole.

Cần xác định thể tích mole ν của hai chất khí là carbon dioxide (CO_2) và oxygen (O_2) dưới áp suất $1atm$, $10atm$ và $100atm$ ở nhiệt độ $300K$, $500K$ và $700K$. Biết rằng đối với carbon dioxide ta có $a = 3.592$, $b = 0.04267$; còn đối với oxygen ta có $a = 1.360$, $b = 0.03183$.

Ta dễ dàng xác định thể tích mole ν đối với chất khí lý tưởng:

$$\nu = \frac{V}{n} = \frac{RT}{p} = 0.082054 \cdot \frac{T}{p}$$

và kết quả cho trong bảng sau:

	$p = 1$	$p = 10$	$p = 100$
$T = 300K$	24.61620	2.46162	0.24616
$T = 500K$	41.02700	4.10270	0.41027
$T = 700K$	57.43780	5.74378	0.57438

Tuy nhiên, đối với khí thực, ta cần một thuật toán tính gần đúng để tìm ν. Phương trình (1.20) được viết lại như sau:

$$f(\nu) = p\nu + \frac{a}{\nu} - \frac{ab}{\nu^2} - pb - RT = 0$$

Ta dễ dàng tìm được đạo hàm của $f(\nu)$:

$$f'(\nu) = p - \frac{a}{\nu^2} + \frac{2ab}{\nu^3}$$

Do đó, thuật toán Newton là thích hợp để xác định thể tích mole gần đúng ν. Giá trị lặp ban đầu ν_0 được chọn đối với chất khí lý tưởng tương ứng với nhiệt độ T và áp suất p. Ví dụ, ứng với $T = 300K$ và $p = 1atm$ thì chọn $\nu_0 = 24.6162$. Chọn sai số là 10^{-7}. Ta có kết quả tính toán được thể hiện trong các bảng sau:

Đối với carbon dioxide:

CO_2	$p = 1$	$p = 10$	$p = 100$
$T = 300K$	24.512588	2.354496	0.079511
$T = 500K$	40.982113	4.057780	0.366302
$T = 700K$	57.417958	5.724166	0.557554

Đối với oxygen:

O_2	$p = 1$	$p = 10$	$p = 100$
$T = 300K$	24.592801	2.438404	0.226359
$T = 500K$	41.025706	4.101630	0.411614
$T = 700K$	57.445969	5.752097	0.584197

1.8.2 BÀI TOÁN VỀ MẠCH ĐIỆN

Trong một số trường hợp, bài toán về mạch điện có thể được đưa về việc giải phương trình vi phân

$$L\frac{d^2q}{dt^2} + R\frac{dq}{dt} + \frac{q}{C} = 0$$

với L là độ tự cảm, R là điện trở, C là điện dung và $q = q(t)$ là điện tích phụ thuộc vào thời gian t. Đây là phương trình vi phân tuyến tính cấp hai hệ số hằng số. Nghiệm của nó có dạng

$$q(t) = q_0\, e^{-Rt/2L} \cos\left(t\sqrt{\frac{1}{LC} - \left(\frac{R}{2L}\right)^2}\right) \tag{1.21}$$

Trong một số trường hợp ta cần xác định R khi biết các tham số khác. Cụ thể, cần xác định R khi biết $q = 0.01q_0$ tại thời điểm $t = 0.05s$ với $L = 5$ và $C = 10^{-4}$. Từ công thức (1.21) ta thu được

$$f(R) = e^{-0.005R} \cos\left(0.05\sqrt{2000 - 0.01R^2}\right) - 0.01 = 0$$

Do $R > 0$ và $2000 - 0.01R^2 > 0$ ta thu được $0 < R < 448$. Việc tính $f'(R)$ khá phức tạp, nên ta sử dụng phương pháp chia đôi (hàm bisect()) và sau 20 lần lặp ta có kết quả sau:

$$x_{20} = 328.1512756347656 \approx R, \qquad |f(x_{20})| = 0.000000152733956$$

BÀI TẬP

Câu 1. Biết bán kính của hình cầu là $R = 2.15 \pm 0.0012$ (m) và số $\pi = 3.14 \pm 0.002$. Tính sai số tuyệt đối và sai số tương đối của thể tích hình cầu.

Câu 2. Tính sai số tuyệt đối Δ_F biết rằng:

(a) $F = x^2 + xy + y^2$, $x = 1.52 \pm 0.0021$, $y = 2.38 \pm 0.0012$

(b) $F = x^3 + y^3$, $x = 3.5 \pm 0.011$, $y = 4.5 \pm 0.035$

(c) $F = x\sin y + y\sin x$, $x = 0.3 \pm 0.0038$, $y = 0.5 \pm 0.0026$

Câu 3. Tìm khoảng cách ly nghiệm của các phương trình sau:

(a) $x^4 - 4x + 1 = 0$

(b) $\mathrm{e}^x - x^2 + 3x - 2 = 0$

(c) $x\cos x - 2x^2 + 3x - 1 = 0$

(d) $4\sin x + 1 - x = 0$

(e) $1 - x - \mathrm{e}^{-2x} = 0$

(f) $x^4 - 4x^3 + 2x^2 - 8 = 0$

(g) $\mathrm{e}^x - x^2 + x = 0$

(h) $3x^2 + \ln x = 0$

Câu 4. Tìm sai số của nghiệm gần đúng x^* theo công thức đánh giá sai số tổng quát:

(a) $x^4 - 4x^3 + 2x^2 - 8 = 0$ trong $[3, 4]$; $x^* = 3.62$.

(b) $\mathrm{e}^x - x^2 + x = 0$ trong $[-1, 0]$; $x^* = -0.44$.

(c) $4\sin x + 1 - x = 0$ trong $[2, 3]$; $x^* = 2.7$.

Câu 5. Sử dụng phương pháp chia đôi tìm nghiệm gần đúng x_5 của phương trình $f(x) = 0$ trong khoảng cách ly nghiệm đã cho. Sử dụng công thức đánh giá sai số tổng quát, tính sai số của nó và so sánh với sai số tính công thức đánh giá sai số của phương pháp chia đôi.

(a) $f(x) = x^3 + 2x^2 - 7 = 0$ trong $[1, 2]$.

(b) $f(x) = 3x^2 + \ln x = 0$ trong $[0.2, 1]$

Câu 6. Sử dụng phương pháp lặp, tìm nghiệm gần đúng với sai số nhỏ hơn 10^{-3} của các phương trình sau:

(a) $x^3 - 3x^2 - 5 = 0$ trong đoạn $[3, 4]$, chọn $x_0 = 3.5$;

(b) $x^3 - x - 1 = 0$ trong đoạn $[1, 2]$, chọn $x_0 = 1.5$;

Câu 7. Với các phương trình dưới đây, hãy xác định khoảng cách ly nghiệm $[a, b]$ mà trong đó phương pháp lặp hội tụ. Đánh giá số lần lặp cần thiết để tìm nghiệm gần đúng với sai số nhỏ hơn 10^{-4}. Chọn x_0 là điểm giữa của khoảng cách ly nghiệm.

(a) $x = \dfrac{5}{x^2} + 2$

(b) $x = (e^x/3)^{1/2}$

(c) $x = 6^{-x}$

(d) $x = \dfrac{1}{2}(\sin x + \cos x)$

Câu 8. Sử dụng phương pháp Newton tìm nghiệm gần đúng của các phương trình sau với sai số nhỏ hơn 10^{-6}.

(a) $e^x + 2^{-x} + 2\cos x - 6 = 0$ trong đoạn $[1, 2]$;

(b) $\ln(x-1) + \cos(x-1) = 0$ trong đoạn $[1.3, 2]$;

(c) $2x\cos 2x - (x-2)^2 = 0$ trong đoạn $[2, 3]$ và $[3, 4]$;

(d) $(x-2)^2 - \ln x = 0$ trong đoạn $[1, 2]$ và $[e, 4]$;

(e) $e^x - 3x^2 = 0$ trong đoạn $[0, 1]$ và $[3, 5]$;

(f) $\sin x - e^{-x} = 0$ trong đoạn $[0, 1]$, $[3, 4]$ và $[6, 7]$.

Câu 9. Lặp lại các bài tập trong câu 8, sử dụng phương pháp dây cung với sai số nhỏ hơn 10^{-4}. Chỉ ra số lần lặp n.

Câu 10. Sử dụng phương pháp Muller tìm nghiệm với sai số nhỏ hơn 10^{-4} của các đa thức sau

(a) $P(x) = x^3 + 3x - 5 = 0$

(b) $P(x) = x^4 + x^3 - 2x^2 - 6 = 0$

Câu 11. Thể tích V của một chất lỏng trong hình trụ tròn nằm ngang được cho bởi công thức

$$V = L\left[r^2 \arccos\frac{r-h}{r} - (r-h)\sqrt{2rh - h^2}\right]$$

với r và L là bán kính và chiều dài của hình trụ, h là chiều cao mực nước. Hãy xác định h nếu biết $r = 2\,m$, $L = 5\,m$ và $V = 8\,m^3$.

Câu 12. Vận tốc rơi của một vật được tính theo công thức:

$$v = \frac{gm}{c}\left(1 - e^{-\frac{c}{m}t}\right)$$

với $g = 9.8m/s^2$. Biết $c = 13.5kg/s$, hãy xác định khối lượng m để cho $v = 36m/s$ tại thời điểm $t = 6s$. Tính đến bốn chữ số đáng tin sau dấu phẩy thập phân.

Câu 13. Vận tốc thẳng đứng v của tên lửa có thể được tính theo công thức:

$$v = u \ln \frac{m_0}{m_0 - qt} - gt$$

với u là vận tốc xuất phát của tên lửa, m_0 là khối lượng ban đầu của tên lửa, q là hệ số tiêu thụ nhiên liệu và g là gia tốc trọng trường. Nếu $u = 2200m/s$, $m_0 = 160000kg$, $q = 2680kg/s$ và $g = 9.8m/s$, hãy xác định thời gian để cho $v = 1000m/s$.

Câu 14. Nhiệt độ (T) và áp suất (p) của khí thực thay đổi theo công thức

$$T = 400 + 225\cos\frac{2\pi t}{1440} \quad \text{và} \quad p = e^{-t/1440}$$

Hãy viết chương trình để tính thể tích mole ν của oxygen theo thời gian t theo từng phút trong vòng 1 giờ. Vẽ đồ thị của hàm thu được $\nu = \nu(t)$. Sử dụng công thức (1.20).

Câu 15. Chuyển vị của một cấu trúc được xác định bởi phương trình dao động tắt dần: $u = 10\,e^{-0.5t}\cos 2t$. Sử dụng đồ thị để xác định giá trị xấp xỉ thô của thời gian t khi $u = 4$. Sau đó, sử dụng phương pháp Newton, tìm thời gian khi $u = 4$ với sai số $< 10^{-5}$.

HỆ PHƯƠNG TRÌNH TUYẾN TÍNH

Mục lục

2.1 Phương pháp Gauss **41**
2.2 Các phương pháp phân rã **45**
2.2.1 Phương pháp phân rã LU 46
2.2.2 Phương pháp Choleski 51
2.3 Chuẩn véc-tơ và chuẩn ma trận **54**
2.4 Phương pháp lặp **57**
2.4.1 Phương pháp Jacobi 60
2.4.2 Phương pháp Gauss-Seidel 64
2.5 Áp dụng **67**
2.5.1 Phân tích lực trong giàn tĩnh 67
2.5.2 Dòng điện và điện thế trong mạch điện trở . . . 68
Bài tập chương 2 . . . . **70**

Trong chương này chúng ta nêu lên một số phương pháp dùng để giải hệ phương trình tuyến tính

$$\left\{\begin{array}{ccccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \dots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \dots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \dots & & \dots & & \dots & & \dots & & \dots \\ a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \dots & + & a_{nn}x_n & = & b_n \end{array}\right. \Leftrightarrow AX = B \qquad (2.1)$$

rất thường gặp trong các bài toán khoa học kỹ thuật. Ta chỉ xét hệ gồm n phương trình với n ẩn. Do vậy, ma trận hệ số A là ma trận vuông cấp n, và véc-tơ nghiệm X cũng như véc-tơ tự do B là các véc-tơ cột n chiều thuộc $\mathbb{R}^n$. Ta luôn giả thiết rằng $\det A \neq 0$ và, do đó, hệ có nghiệm duy nhất $X = A^{-1}B$. Tuy nhiên, việc tìm ma trận nghịch đảo A^{-1} đôi khi còn khó khăn gấp nhiều lần so với việc giải trực tiếp hệ phương trình xuất phát. Dưới đây chúng ta sẽ xét một số phương pháp thường dùng để giải hệ phương trình (2.1). Trước tiên, chúng ta xét một số trường hợp đơn giản khi ma trận hệ số A của hệ phương trình (2.1) có dạng đặc biệt.

Trường hợp đơn giản nhất là khi hệ phương trình với ma trận hệ số có dạng đường chéo:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Khi ấy hệ tương đương với n phương trình bậc nhất $a_{kk}x_k = b_k, \forall k = 1, 2, \ldots, n$. Vì $\det A = a_{11}a_{22}\cdots a_{nn} \neq 0$ nên $a_{kk} \neq 0, \forall k$. Và do đó nghiệm của hệ có thể được viết dưới dạng:

$$x_k = \frac{b_k}{a_{kk}}, \quad k = 1, 2, 3, \cdots, n$$

Trường hợp thứ hai khi ma trận hệ số A có dạng tam giác trên:

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

Với giả thiết $\det A \neq 0$, ta có $a_{kk} \neq 0, \forall k = 1, 2, \ldots, n$, và nghiệm của hệ được cho bởi công thức:

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{b_n}{a_{nn}} \\ x_k = \dfrac{1}{a_{kk}}\left(b_k - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}x_j\right), \quad k = n-1, \cdots, 1 \end{cases} \tag{2.2}$$

Cuối cùng, khi ma trận hệ số A có dạng tam giác dưới:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Tương tự $\det A \neq 0 \Rightarrow a_{kk} \neq 0, \forall k = 1, 2, \ldots, n$, và nghiệm của hệ có dạng:

$$\begin{cases} x_1 = \dfrac{b_1}{a_{11}} \\ x_k = \dfrac{1}{a_{kk}}\left(b_k - \sum\limits_{j=1}^{k-1} a_{kj}x_j\right), \quad k = 2, \cdots, n \end{cases} \tag{2.3}$$

§2.1 PHƯƠNG PHÁP GAUSS

Bây giờ chúng ta sẽ trình bày phương pháp Gauss để giải hệ phương trình tổng quát dạng (2.1). Nội dung của phương pháp là sử dụng các phép biến đổi sơ cấp theo hàng để chuyển về một hệ phương trình mới tương đương với hệ phương trình cũ mà ma trận hệ số có dạng cơ bản. Các phép biến đổi sơ cấp thường hay sử dụng là:

- Nhân một hàng cho một số khác không.
- Hoán chuyển hai hàng cho nhau.
- Cộng một hàng cho một hàng khác đã nhân với một số khác không.

Xét hệ phương trình sau:

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

Do định thức của ma trận hệ số A khác không nên một trong các số $a_{11}, a_{21}, \dots, a_{n1}$ phải khác không. Giả sử $a_{11} \neq 0$. Lấy phương trình thứ k với $k = \overline{2;n}$ trừ cho phương trình thứ nhất đã nhân với $\dfrac{a_{k1}}{a_{11}}$, ta được một hệ mới có dạng như sau:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad a_{22}^{(1)}x_2 + \dots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ \qquad \dots \\ \qquad a_{n2}^{(1)}x_2 + \dots + a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)} \end{cases}$$

Trong các số $a_{22}^{(1)}, \dots, a_{n2}^{(1)}$ phải có một số khác không, vì nếu ngược lại thì $\det A = 0$, trái với giả thiết. Giả sử $a_{22}^{(1)} \neq 0$. Còn nếu chỉ có $a_{p2}^{(1)} \neq 0$ và $a_{22}^{(1)} = 0$ thì ta thực hiện phép hoán chuyển hai phương trình thứ 2 và thứ p. Tiếp tục biến đổi cho $n-2$ phương trình cuối. Và cứ tiếp tục cho đến phương trình thứ n, ta được hệ phương trình sau

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad a_{22}^{(1)}x_2 + \dots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\ \qquad \dots \\ \qquad\qquad a_{nn}^{(n-1)}x_n = b_n^{(n-1)} \end{cases}$$

Đây là hệ phương trình có ma trận hệ số có dạng tam giác trên và có thể giải được bằng công thức (2.2).

Ví dụ 2.1: Xét hệ phương trình đại số tuyến tính sau:

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + 2x_3 - x_4 = -8 \\ 2x_1 - 2x_2 + 3x_3 - 3x_4 = -20 \\ x_1 + x_2 + x_3 = -2 \\ x_1 - x_2 + 4x_3 + 3x_4 = 4 \end{cases}$$

Ma trận hệ số mở rộng có dạng

$$A^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 & : & -8 \\ 2 & -2 & 3 & -3 & : & -20 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & : & -2 \\ 1 & -1 & 4 & 3 & : & 4 \end{bmatrix}$$

Ta thực hiện các phép biến đổi sau: $(h_2 = h_2 - 2h_1), (h_3 = h_3 - h_1), (h_4 = h_4 - h_1)$, khi đó ma trận trở thành

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 & : & -8 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & : & -4 \\ 0 & 2 & -1 & 1 & : & 6 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & : & 12 \end{bmatrix}$$

Phần tử $a_{22}^{(1)} = 0$, do đó để tiếp tục, ta thực hiện phép chuyển đổi giữa hàng thứ hai và thứ ba và thu được

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 & : & -8 \\ 0 & 2 & -1 & 1 & : & 6 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & : & -4 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & : & 12 \end{bmatrix}$$

Cuối cùng, lấy hàng thứ tư cộng cho hai lần hàng thứ ba ta được:

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 & : & -8 \\ 0 & 2 & -1 & 1 & : & 6 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & : & -4 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & : & 4 \end{bmatrix}$$

Và sử dụng công thức (2.2) ta có thể dễ dàng tìm được $X = [-7, 3, 2, 2]^T$.

Trong ví dụ 2.1, ở bước thứ hai, do $a_{22}^{(1)} = 0$ nên ta phải hoán chuyển hai hàng thứ hai và thứ ba. Để tránh trường hợp này, ta có thể cải tiến phương pháp Gauss theo hướng như sau. Tại mỗi bước, khi chọn phần tử để biến đổi, ta sẽ chọn phần tử có trị tuyệt đối lớn nhất, sao cho không cùng hàng và cột với những phần tử đã chọn trước. Phần tử như vậy thường được gọi là *phần tử chính* hay *phần tử trội*. Sau đó ta sẽ biến đổi để cho tất cả các phần tử trên cùng cột của phần tử trội bằng không. Qua n bước như vậy ta sẽ tìm được nghiệm dễ dàng. Phương pháp này được gọi là *phương pháp Jordan* hay *phương pháp phần tử trội*. Ta minh hoạ bằng ví dụ sau.

Ví dụ 2.2: Xét hệ phương trình trong ví dụ 2.1 có ma trận hệ số mở rộng

$$A^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 & : & -8 \\ 2 & -2 & 3 & -3 & : & -20 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & : & -2 \\ 1 & -1 & 4 & 3 & : & 4 \end{bmatrix}$$

Đầu tiên ta sẽ chọn phần tử chính là phần tử $a_{43}^{(0)} = 4$ và thực hiện các phép biến đổi $(4h_3 - h_4), (4h_2 - 3h_4), (2h_1 - h_4)$ ta thu được

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & -5 & : & -20 \\ 5 & -5 & 0 & -21 & : & -92 \\ 3 & 5 & 0 & -3 & : & -12 \\ 1 & -1 & 4 & 3 & : & 4 \end{bmatrix}$$

Bước tiếp theo, phần tử chính được chọn không được nằm trên hàng thứ tư và cột thứ ba. Đó là phần tử $a_{24}^{(1)} = -21$. Tiếp tục thực hiện các phép biến đổi $(21h_1 - 5h_2), (7h_3 - h_2), (7h_4 + h_2)$ ta thu được

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} -4 & 4 & 0 & 0 & : & 40 \\ 5 & -5 & 0 & -21 & : & -92 \\ 16 & 40 & 0 & 0 & : & 8 \\ 12 & -12 & 28 & 0 & : & -64 \end{bmatrix}$$

Tiếp theo phần tử chính được chọn không được nằm trên hàng thứ hai, thứ tư và cột thứ ba, thứ tư và do đó phần tử chính sẽ là phần tử $a_{32}^{(2)} = 40$. Thực hiện phép biến đổi $(10h_1 - h_3), (8h_2 +$

$h_3), (10h_4 + 3h_3)$ ta được

$$A^{(3)} = \left[\begin{array}{cccccc} -56 & 0 & 0 & 0 & : & 392 \\ 56 & 0 & 0 & -168 & : & -728 \\ 16 & 40 & 0 & 0 & : & 8 \\ 168 & 0 & 280 & 0 & : & -616 \end{array}\right]$$

Cuối cùng phần tử chính không cùng nằm trên hàng và cột của những phần tử chính đã được chọn trước là phần tử $a_{11}^{(3)} = -56$. Thực hiện các phép biến đổi $(h_2 + h_1), (7h_3 + 2h_1), (h_4 + 3h_1)$ ta có ma trận cuối cùng

$$A^{(4)} = \left[\begin{array}{cccccc} -56 & 0 & 0 & 0 & : & 392 \\ 0 & 0 & 0 & -168 & : & -336 \\ 0 & 280 & 0 & 0 & : & 840 \\ 0 & 0 & 280 & 0 & : & 560 \end{array}\right]$$

và hệ phương trình đầu tương đương với hệ sau

$$-56x_1 = 392,\ 280x_2 = 840,\ 280x_3 = 560,\ -168x_4 = -336$$

Từ đây chúng ta cũng suy ra được $X = [-7, 3, 2, 2]^T$.

Thuật toán của phương pháp Jordan được thể hiện qua chương trình sau

$$X = jordan(A, B)$$

với A là ma trận hệ số, B là véc-tơ tự do. Hàm trả về véc-tơ nghiệm X. Nếu A là ma trận suy biến thì hàm trả về véc-tơ không.

```
def jordan(A, B):
    N = len(A)
    X = np.zeros(N, dtype=float)
    if isSingular(A):
        return X
    b = np.zeros(N, dtype=int)
    for i in range(N):
        b[i] = -1
    im = 0
```

```
    jm = 0
    for k in range(N):
        ma = 0.0
        for i in range(N):
            if b[i] < 0:
                for j in range(N):
                    aa = abs(A[i, j])
                    if ma < aa:
                        ma = aa
                        im = i
                        jm = j
        b[im] = jm
        ma = A[im, jm]
        for j in range(N):
            A[im, j] /= ma
        B[im] /= ma
        for i in range(N):
            if i != im:
                tmp = A[i, jm]
                for j in range(N):
                    A[i, j] -= A[im, j] * tmp
                B[i] -= B[im] * tmp
    for i in range(N):
        X[b[i]] = B[i]
    return X
```

Các phương pháp có sử dụng các phép biến đổi sơ cấp cơ bản có ưu điểm là đơn giản, dễ lập trình. Tuy nhiên, nếu phần tử được chọn để biến đổi gần với không thì phương pháp Gauss cũng như Jordan có thể cho kết quả không chính xác. Hơn nữa, khi thực hiện trên các công cụ tính toán, ta vẫn gặp phải sai số làm tròn, cho nên các phương pháp này vẫn được xem như là các phương pháp gần đúng.

§2.2 CÁC PHƯƠNG PHÁP PHÂN RÃ

Trong phần này ta xét các phương pháp phân rã ma trận A cho trước thành tích các ma trận có dạng đường chéo hoặc tam giác: $A = A_1 \cdot A_2 \ldots A_k$. Khi đó việc giải hệ phương trình (2.1) sẽ tương đương với việc giải k hệ phương trình:

$$AX = B \Leftrightarrow \begin{cases} A_1X^{(1)} & = & B, \\ A_2X^{(2)} & = & X^{(1)}, \\ \dots\dots\dots\dots & \dots & \dots\dots \\ A_{k-1}X^{(k-1)} & = & X^{(k-2)} \\ A_kX & = & X^{(k-1)} \end{cases}$$

2.2.1 PHƯƠNG PHÁP PHÂN RÃ LU

Nội dung của phương pháp phân rã LU là phân tích ma trận hệ số A thành tích của hai ma trận L và U, trong đó L là ma trận tam giác dưới và U là ma trận tam giác trên. Khi đó việc giải hệ phương trình (2.1) sẽ đưa về việc giải hai hệ phương trình $LY = B$ và $UX = Y$ mà ma trận hệ số là các ma trận tam giác và nghiệm thu được từ các công thức (2.2) và (2.3). Ta có định lý sau đây.

Định lý 2.1: *Nếu A là ma trận không suy biến, thì bao giờ cũng tồn tại một ma trận P không suy biến sao cho ma trận PA phân tích được thành tích của ma trận tam giác dưới L và ma trận tam giác trên U, nghĩa là $PA = LU$.*

Có rất nhiều phương pháp phân tích $A = LU$. Trước tiên ta xét trường hợp ma trận L có đường chéo chính bằng 1 và gọi là *phương pháp Doolittle*. Khi đó L và U có dạng:

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad \text{và} \quad U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Các phần tử của hai ma trận L và U được xác định theo công thức:

$$\begin{cases} u_{1j} & = & a_{1j} & (1 \leqslant j \leqslant n) \\ l_{i1} & = & \dfrac{a_{i1}}{u_{11}} & (2 \leqslant i \leqslant n) \\ u_{ij} & = & a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} & (2 \leqslant i \leqslant j \leqslant n) \\ l_{ij} & = & \dfrac{1}{u_{jj}}\left(a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj}\right) & (2 \leqslant j < i \leqslant n) \end{cases} \tag{2.4}$$

Ví dụ 2.3: Xét hệ phương trình

$$\begin{cases} 2x_1 & + & 2x_2 & - & 3x_3 & = & 9 \\ -4x_1 & - & 3x_2 & + & 4x_3 & = & -15 \\ 2x_1 & + & x_2 & + & 2x_3 & = & 3 \end{cases}$$

Ta phân tích ma trận hệ số

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

với $u_{11} = 2; u_{12} = 2; u_{13} = -3;\ l_{21} = -2; l_{31} = 1;\ u_{22} = 1; u_{23} = -2;$ $l_{32} = -1; u_{33} = 3.$

Do đó:

$$LY = B \Longleftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix} Y = \begin{bmatrix} 9 \\ -15 \\ 3 \end{bmatrix} \Longrightarrow Y = \begin{bmatrix} 9 \\ 3 \\ -3 \end{bmatrix}$$

$$UX = Y \Longleftrightarrow \begin{bmatrix} 2 & 2 & -3 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} X = \begin{bmatrix} 9 \\ 3 \\ -3 \end{bmatrix} \Longrightarrow X = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Thuật toán của phương pháp Doolittle thể hiện qua chương trình Python:

$$L, U = doolittle(A)$$

với A là ma trận vuông cấp n, hàm trả về hai ma trận tam giác dưới L và tam giác trên U.

```
def doolittle(A):
    n = len(A)
    L = np.zeros((n, n), dtype=float)
    U = np.zeros((n, n), dtype=float)
    if isSingular(A):
        return L, U
    for i in range(n):
        L[i, i] = 1.0
        U[0, i] = A[0, i]
    for i in range(1, n):
        L[i, 0] = A[i, 0] / U[0, 0]
```

```
for i in range(1, n - 1):
    for j in range(i, n):
        suml = 0.0
        for k in range(0, i):
            suml += L[i, k] * U[k, j]
        U[i, j] = A[i, j] - suml
    for j in range(i + 1, n):
        suml = 0.0
        for k in range(0, i):
            suml += L[j, k] * U[k, i]
        L[j, i] = (A[j, i] - suml) / U[i, i]
suml = 0.0
for k in range(0, n - 1):
    suml += L[n - 1, k] * U[k, n - 1]
U[n - 1, n - 1] = A[n - 1, n - 1] - suml
return L, U
```

Trường hợp thứ hai thường sử dụng khi ma trận U có đường chéo chính bằng 1 và gọi là *phương pháp Crout*. Khi đó L và U có dạng:

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \quad \text{và} \quad U = \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & u_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

Các phần tử của hai ma trận L và U được xác định theo công thức:

$$\begin{cases} l_{i1} = a_{i1} & (1 \leqslant i \leqslant n) \\ u_{1j} = \dfrac{a_{1j}}{l_{11}} & (2 \leqslant j \leqslant n) \\ l_{ij} = a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj} & (2 \leqslant j \leqslant i \leqslant n) \\ u_{ij} = \dfrac{1}{l_{ii}}\left(a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}\right) & (2 \leqslant i < j \leqslant n) \end{cases} \tag{2.5}$$

Ví dụ 2.4: Xét hệ phương trình

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 4 \\ 2x_1 + 5x_2 + 3x_3 = 5 \\ x_1 - x_2 + 4x_3 = 6 \end{cases}$$

Ta phân tích ma trận hệ số

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 2 & 5 & 3 \\ 1 & -1 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} \\ 0 & 1 & u_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

với $l_{11} = 1; l_{21} = 2; l_{31} = 1;\ u_{12} = 2; u_{13} = -2;\ l_{22} = 1; l_{32} = -3;$ $u_{23} = 7; l_{33} = 27.$

Do đó:

$$LY = B \Longleftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & -3 & 27 \end{bmatrix} Y = \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix} \Longrightarrow Y = \begin{bmatrix} 4 \\ -3 \\ -7/27 \end{bmatrix}$$

$$UX = Y \Longleftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & 7 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} X = \begin{bmatrix} 4 \\ -3 \\ -7/27 \end{bmatrix} \Longrightarrow X = \begin{bmatrix} 158/27 \\ -32/27 \\ -7/27 \end{bmatrix}$$

Thuật toán của phương pháp Crout thể hiện qua chương trình Python:

$$L, U = crout(A)$$

với A là ma trận vuông cấp n, hàm trả về hai ma trận tam giác dưới L và tam giác trên U.

```python
def crout(A):
    n = len(A)
    L = np.zeros((n, n), dtype=float)
    U = np.zeros((n, n), dtype=float)
    if isSingular(A):
        return L, U
    for i in range(n):
        U[i, i] = 1.0
        L[i, 0] = A[i, 0]
    for i in range(1, n):
        U[0, i] = A[0, i] / L[0, 0]
    for i in range(1, n - 1):
        for j in range(i, n):
            suml = 0.0
            for k in range(i):
                suml += L[j, k] * U[k, i]
```

```
            L[j, i] = A[j, i] - suml
        for j in range(i + 1, n):
            suml = 0.0
            for k in range(i):
                suml += L[i, k] * U[k, j]
            U[i, j] = (A[i, j] - suml) / L[i, i]
    suml = 0.0
    for k in range(n - 1):
        suml += L[n - 1, k] * U[k, n - 1]
    L[n - 1, n - 1] = A[n - 1, n - 1] - suml
    return L, U
```

Thuật toán Crout cũng áp dụng hiệu quả đối với hệ phương trình có ma trận hệ số dạng ba đường chéo.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix} X = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \dots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{bmatrix}$$

Ta gọi hàm:

$$X = tri\_diag(A, B)$$

với A là ma trận ba đường chéo và B là véc-tơ. Hàm trả về nghiệm X của hệ phương trình.

```
def tri_diag(A, B):
    N = len(A)
    X = np.zeros(N, dtype=float)
    if isSingular(A):
        return X
    L = np.zeros((N, N), dtype=float)
    U = np.zeros((N, N), dtype=float)
    Z = np.zeros(N, dtype=float)
    L[0, 0] = A[0, 0]
    U[0, 1] = A[0, 1] / L[0, 0]
    Z[0] = B[0] / L[0, 0]
    for i in range(1, N-1):
```

```
        L[i,i-1] = A[i,i-1]
        L[i,i] = A[i,i]-L[i,i-1]*U[i-1,i]
        U[i,i+1] = A[i,i+1]/L[i,i]
        Z[i] = (B[i]-L[i,i-1]*Z[i-1])/L[i,i]
    L[N-1,N-2] = A[N-1,N-2]
    L[N-1,N-1] = A[N-1,N-1]-L[N-1,N-2]*U[N-2,N-1]
    Z[N-1] = (B[N-1]-L[N-1,N-2]*Z[N-2])/L[N-1,N-1]
    X[N-1] = Z[N-1]
    for i in range(N-2, -1, -1):
        X[i] = Z[i] - U[i, i+1] * X[i+1]
    return X
```

2.2.2 PHƯƠNG PHÁP CHOLESKI

Đây là trường hợp đặc biệt của phương pháp phân rã LU, và được dùng cho trường hợp ma trận hệ số A đối xứng và xác định dương. Ma trận vuông A được gọi là đối xứng nếu $A^T = A$. Nghĩa là các phần tử của nó đối xứng với nhau qua đường chéo chính, $a_{ij} = a_{ji}, \forall i, j = 1, 2, \ldots, n$. Còn ma trận A là xác định dương nếu $\forall X \in \mathbb{R}^n, X \neq 0 : X^T AX > 0$. Để kiểm tra tính xác định dương của ma trận, ta thường dùng định lí sau.

Định lý 2.2: *Một ma trận là xác định dương khi và chỉ khi tất cả các định thức con chính của nó đều dương.*

Trong đó định thức con chính cấp k : Δ_k, $1 \leqslant k \leqslant n$ của ma trận là định thức con thu được từ k hàng và k cột đầu tiên của ma trận đó. Cụ thể:

$$\Delta_1 = a_{11}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}, \ldots, \quad \Delta_n = \det A$$

Ví dụ 2.5: Xét ma trận $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$ có $\Delta_1 = |1| = 1 > 0$,

$\Delta_2 = \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 1 > 0$ và $\Delta_3 = \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 4 \end{vmatrix} = 2 > 0$. Do đó A là xác định dương.

Ví dụ 2.6: Tìm α để ma trận $A = \begin{bmatrix} \alpha & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$ là xác định dương.

Ta có: $\Delta_1 = \alpha > 0$, $\Delta_2 = \begin{vmatrix} \alpha & 2 \\ 2 & 3 \end{vmatrix} = 3\alpha - 4 > 0 \Rightarrow \alpha > \dfrac{4}{3}$ và

$\Delta_3 = |A| = 12\alpha - 19 > 0 \Rightarrow \alpha > \dfrac{19}{12}$.

Kết hợp các điều kiện ta có $\alpha > \dfrac{19}{12}$.

Ta có định lý Choleski:

Định lý 2.3: *Ma trận A là đối xứng và xác định dương khi và chỉ khi tồn tại một ma trận C tam giác dưới, không suy biến sao cho $A = CC^T$.*

Trong trường hợp này, để giải hệ (2.1) ta cần giải hai hệ $CY = B$ và $C^T X = Y$. Khi đó nếu ma trận C có dạng:

$$C = \begin{bmatrix} c_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{bmatrix}$$

thì

$$\begin{cases} c_{11} = \sqrt{a_{11}}; \quad c_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{c_{11}} & (2 \leqslant i \leqslant n) \\ c_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum\limits_{j=1}^{k-1} c_{kj}^2} & (2 \leqslant k \leqslant n) \\ c_{ik} = \dfrac{1}{c_{kk}} \left(a_{ik} - \sum\limits_{j=1}^{k-1} c_{ij} c_{kj} \right) & (k+1 \leqslant i \leqslant n) \end{cases} \tag{2.6}$$

Ví dụ 2.7: Xét hệ phương trình

$$AX = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = B$$

Vì ma trận $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$ là đối xứng và xác định dương, nên từ công thức (2.6) ta có thể xác định các hệ số $c_{ij}, i > j$ của ma trận tam giác dưới C như sau $c_{11} = 1, c_{21} = 1, c_{31} = -1, c_{22} = 1, c_{32} = 1, c_{33} = \sqrt{2}$ và do đó $A = CC^T$ với $C = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & \sqrt{2} \end{bmatrix}$. Hệ phương trình xuất phát sẽ tương đương với hai hệ $\begin{cases} CY = B \\ C^T X = Y \end{cases}$. Ta được

$$CY = B \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & \sqrt{2} \end{bmatrix} Y = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \Rightarrow Y = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 3/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

$$C^T X = Y \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{bmatrix} X = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 3/\sqrt{2} \end{bmatrix} \Rightarrow X = \begin{bmatrix} 3.0 \\ -0.5 \\ 1.5 \end{bmatrix}.$$

Thuật toán của phương pháp Choleski như sau

$$C = choleski(A)$$

với A là ma trận vuông cấp n; hàm trả về ma trận tam giác dưới C. Nếu A là ma trận không đối xứng hoặc không xác định dương, hàm trả về véc-tơ **0**.

```
def choleski(A):
    n = len(A)
    C = np.zeros((n, n), dtype=float)
    if not isSymmetric(A) or not isPosDef(A):
        return C
    C[0, 0] = math.sqrt(A[0, 0])
    for i in range(1, n):
        C[i, 0] = A[i, 0] / C[0, 0]
    for k in range(1, n):
        sum1 = 0.0
        for j in range(k):
            sum1 += C[k, j] * C[k, j]
        sum1 = A[k, k] - sum1
```

```
        C[k, k] = math.sqrt(sum1)
        for i in range(k, n):
            sum1 = 0.0
            for j in range(k):
                sum1 += C[i, j] * C[k, j]
            C[i, k] = (A[i, k] - sum1) / C[k, k]
    return C
```

Chú ý rằng các phần tử nằm trên đường chéo chính của ma trận C và các định thức con chính của ma trận A có mối quan hệ sau:

$$c_{11} = \sqrt{\Delta_1},\ c_{kk} = \sqrt{\frac{\Delta_k}{\Delta_{k-1}}},\ (k = 2, 3, \ldots, n)$$

§2.3 CHUẨN VÉC-TƠ VÀ CHUẨN MA TRẬN

Xét không gian tuyến tính thực $\mathbb{R}^n$. Chuẩn của véc-tơ $X \in \mathbb{R}^n$ là một số thực, ký hiệu là $\|X\|$, thoả các tính chất sau đây:

1. $\forall X \in \mathbb{R}^n:\ \|X\| \geqslant 0;\quad \|X\| = 0 \Leftrightarrow X = \mathcal{O}$
2. $\forall X \in \mathbb{R}^n, \forall \lambda \in \mathbb{R}:\ \|\lambda X\| = |\lambda| . \|X\|$
3. $\forall X, Y \in \mathbb{R}^n:\ \|X + Y\| \leqslant \|X\| + \|Y\|$. Tính chất này thường được gọi là bất đẳng thức tam giác.

Trong $\mathbb{R}^n$ có thể có rất nhiều chuẩn, tuy nhiên trong giáo trình này chúng ta chỉ xét hai chuẩn thường dùng sau đây: $\forall X = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$

$$\|X\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n| = \sum_{k=1}^{n} |x_k| \tag{2.7}$$

$$\|X\|_\infty = \max(|x_1|, |x_2|, \ldots, |x_n|) = \max_{k=\overline{1,n}} |x_k| \tag{2.8}$$

Ví dụ 2.8:

$$X = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \\ -4 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \|X\|_1 = |1| + |-2| + |3| + |-4| = 10 \\ \|X\|_\infty = \max(|1|, |-2|, |3|, |-4|) = 4 \end{cases}$$

Chuẩn ma trận tương thích với chuẩn véc-tơ được xác định theo công thức:

$$\|A\| = \max_{\|X\|=1} \|AX\| = \max_{\|X\|\neq 0} \frac{\|AX\|}{\|X\|} \tag{2.9}$$

Ví dụ 2.9: Xác định chuẩn của ma trận $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$ tương ứng với chuẩn một của véc-tơ. Với mọi $X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2$, sao cho $\|X\|_1 = |x_1| + |x_2| = 1$, ta có

$$\|AX\|_1 = |x_1 + 2x_2| + |3x_1 + 4x_2| \leqslant 4|x_1| + 6|x_2| = 4 + 2|x_2| \leqslant 6$$

Dấu bằng xảy ra khi $|x_1| = 0$, $|x_2| = 1$. Do đó $\|A\|_1 = 6$.

Từ công thức (2.9) ta dễ dàng suy ra được rằng: $\|AX\| \leqslant \|A\| \|X\|$.

Định lý 2.4: *Chuẩn ma trận theo công thức (2.9) tương thích với chuẩn véc-tơ được xác định như sau:*

$$\|A\|_1 = \max_{1\leqslant j\leqslant n} \left(\sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \right) \tag{2.10}$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \left(\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \right) \tag{2.11}$$

Bây giờ xét dãy các véc-tơ $\{X^{(m)}\}_{m=0}^{\infty}$ với $X^{(m)} \in \mathbb{R}^n$. Ta nói dãy hội tụ về véc-tơ $\overline{X}$ khi $m \to \infty$ nếu và chỉ nếu $\|X^{(m)} - \overline{X}\| \to 0$ khi $m \to \infty$ (hội tụ theo chuẩn). Khi đó ta kí hiệu $\lim\limits_{m\to\infty} X^{(m)} = \overline{X}$. Vậy

$$\lim_{m\to\infty} X^{(m)} = \overline{X} \Leftrightarrow \forall \epsilon > 0,\ \exists M > 0, \forall m > M \Rightarrow \left\| X^{(m)} - \overline{X} \right\| < \epsilon$$

Chuẩn có thể lấy là một chuẩn bất kì trong các công thức (2.7) hoặc (2.8). Ta cũng có thể nói dãy véc-tơ $\{X^{(m)}\}$ hội tụ về $\overline{X}$ theo chuẩn đã cho.

Xét hệ phương trình tuyến tính $AX = B$ ($\det A \neq 0$) có nghiệm $X = A^{-1}B$. Cho B một số gia ΔB, khi đó nghiệm X tương ứng sẽ có số gia là ΔX, và $A\Delta X = \Delta B \Leftrightarrow \Delta X = A^{-1}\Delta B$. Ta có $\|\Delta X\| = \|A^{-1}\Delta B\| \leqslant \|A^{-1}\| \, \|\Delta B\|$ và $\|B\| = \|AX\| \leqslant \|A\| \, \|X\|$.

Từ đây chúng ta dễ dàng suy ra được

$$\frac{\|\Delta X\|}{\|X\|} \leqslant \underbrace{\|A\| . \|A^{-1}\|}_{k(A)} \frac{\|\Delta B\|}{\|B\|}$$

Số

$$k(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \tag{2.12}$$

được gọi là *số điều kiện* của ma trận A.

Trong công thức (2.12) ta có thể thêm vào các chỉ số 1 hoặc ∞ để thể hiện số điều kiện được tính theo chuẩn tương ứng. Cụ thể, $k_1(A)$ là số điều kiện của ma trận A được tính theo chuẩn một, còn $k_\infty(A)$ là số điều kiện của ma trận A được tính theo chuẩn vô cùng.

Ví dụ 2.10: Tìm số điều kiện theo chuẩn một của ma trận $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 3 & 5 & 2 \\ 1 & 3 & 3 \end{bmatrix}$. Khi đó $A^{-1} = \begin{bmatrix} -9 & 3 & 1 \\ 7 & -2 & -1 \\ -4 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ và

$$\|A\|_1 = 10, \ \|A^{-1}\|_1 = 20 \Rightarrow k_1(A) = 200$$

Ta có thể chứng tỏ được rằng: $1 \leqslant k(A) < \infty$.

Số điều kiện của ma trận đặc trưng cho tính ổn định của hệ phương trình đại số tuyến tính. Giá trị của $k(A)$ càng gần với 1 thì hệ càng ổn định. Số điều kiện càng lớn thì hệ càng mất ổn định.

Ví dụ 2.11: Xét hệ phương trình $AX = B$ với $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2.01 \end{bmatrix}$ và $B = \begin{bmatrix} 3 \\ 3.01 \end{bmatrix}$. Dễ thấy hệ có nghiệm là $X = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$. Bây giờ xét hệ

$A\tilde{X} = \tilde{B}$ với $\tilde{B} = \begin{bmatrix} 3 \\ 3.1 \end{bmatrix}$. Nghiệm của hệ bây giờ là $\tilde{X} = \begin{bmatrix} -17 \\ 10 \end{bmatrix}$.
Ta nhận thấy $k_\infty(A) = 1207.01 \gg 1$. Ta có $B \approx \tilde{B}$, nhưng X và $\tilde{X}$ khác nhau rất xa.

Trong gói lệnh **numpy** của ngôn ngữ Python có gói lệnh con **linalg** chứa các hàm tính chuẩn và số điều kiện của ma trận. Cụ thể:

```
In[1]: numpy.linalg.norm(A, k)
```

Tính chuẩn của ma trận A. Tính theo chuẩn vô cùng nếu $k = numpy.inf$ và theo chuẩn một nếu $k = 1$.

```
In[2]: numpy.linalg.cond(A, k)
```

Tính số điều kiện của ma trận A. Tính theo chuẩn vô cùng nếu $k = numpy.inf$ và theo chuẩn một nếu $k = 1$.

Đoạn chương trình sau dùng để tính số điều kiện của ma trận A trong ví dụ 2.10.

```
import numpy as np

A = np.array([[1,2,1],[3,5,2],[1,3,3]],dtype=float)
cond = np.linalg.cond(A, 1)
print(cond)
```

§2.4 PHƯƠNG PHÁP LẶP

Kỹ thuật lặp dùng để giải hệ phương trình đại số tuyến tính (2.1) cũng tương tự như phương pháp lặp đã xét trong chương 1. Muốn thế, chúng ta chuyển hệ (2.1) về dạng tương đương

$$X = TX + C$$

với T là một ma trận vuông cấp n được gọi là ma trận lặp và C là một véc-tơ. Xuất phát từ véc-tơ ban đầu $X^{(0)}$, ta xây dựng một dãy các véc-tơ $\{X^{(m)}\}_{m=0}^{\infty}$ theo công thức lặp

$$X^{(m)} = TX^{(m-1)} + C, \quad m = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.13}$$

Ta có định lý sau đây:

Định lý 2.5: *Nếu $\|T\| < 1$ thì dãy lặp các véc-tơ xác định theo công thức (2.13) sẽ hội tụ về nghiệm $\overline{X}$ của hệ với mọi véc-tơ lặp ban đầu $X^{(0)}$. Khi đó ta có các công thức đánh giá sai số như sau:*

$$\left\|X^{(m)} - \overline{X}\right\| \leqslant \frac{\|T\|^m}{1-\|T\|} \cdot \left\|X^{(1)} - X^{(0)}\right\|$$

$$\left\|X^{(m)} - \overline{X}\right\| \leqslant \frac{\|T\|}{1-\|T\|} \cdot \left\|X^{(m)} - X^{(m-1)}\right\|$$

Ví dụ 2.12: Xét hệ phương trình dạng $AX = B$:

$$\begin{cases} 10x_1 - 2x_2 + x_3 = 3 \\ 2x_1 + 10x_2 + x_3 = 4 \\ x_1 + x_2 + 10x_3 = 5 \end{cases}$$

Ta biến đổi về dạng $X = TX + C$ theo cách sau. Phương trình đầu tiên giữ $10x_1$ ở bên trái, còn lại chuyển hết qua bên phải. Tương tự cho phương trình thứ hai, giữ $10x_2$ và phương trình thứ ba, giữ $10x_3$. Ta được:

$$\begin{cases} 10x_1 = 2x_2 - x_3 + 3 \\ 10x_2 = -2x_1 - x_3 + 4 \\ 10x_3 = -x_1 - x_2 + 5 \end{cases}$$

Chia phương trình thứ nhất cho 10, phương trình thứ hai cho 10 và phương trình thứ ba cho 10, ta đi đến hệ

$$\begin{cases} x_1 = 0.2x_2 - 0.1x_3 + 0.3 \\ x_2 = -0.2x_1 - 0.1x_3 + 0.4 \\ x_3 = -0.1x_1 - 0.1x_2 + 0.5 \end{cases}$$

có dạng $X = TX + C$ với

$$T = \begin{bmatrix} 0 & 0.2 & -0.1 \\ -0.2 & 0 & -0.1 \\ -0.1 & -0.1 & 0 \end{bmatrix} \quad X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad C = \begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.4 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

Chọn $X^{(0)} = (0,0,0)^T$, ta cần tìm nghiệm gần đúng $X^{(3)}$ và đánh giá sai số của nó theo công thức hậu nghiệm theo chuẩn vô cùng. Theo công thức (2.13) ta có:

$$X^{(1)} = TX^{(0)} + C = C = \begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.4 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} X^{(2)} &= TX^{(1)} + C = \begin{bmatrix} 0 & 0.2 & -0.1 \\ -0.2 & 0 & -0.1 \\ -0.1 & -0.1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.4 \\ 0.5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.4 \\ 0.5 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0.33 \\ 0.29 \\ 0.43 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X^{(3)} &= TX^{(2)} + C = \begin{bmatrix} 0 & 0.2 & -0.1 \\ -0.2 & 0 & -0.1 \\ -0.1 & -0.1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.33 \\ 0.29 \\ 0.43 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.4 \\ 0.5 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0.315 \\ 0.291 \\ 0.438 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Ta có:

$$\|T\|_\infty = 0.3, \qquad \left\|X^{(3)} - X^{(2)}\right\|_\infty = 0.015$$

nên theo công thức hậu nghiệm

$$\Delta_{X^{(3)}} = \frac{0.3}{1-0.3} \times 0.015 \approx 0.00643$$

Bây giờ chúng ta sẽ xét một dạng ma trận hệ số của hệ phương trình $AX = B$ mà có thể chuyển dễ dàng về dạng $X = TX + C$.

Ma trận A được gọi là *ma trận đường chéo trội nghiêm ngặt* nếu nó thoả mãn điều kiện sau đây:

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| < |a_{ii}| \tag{2.14}$$

Chúng ta dễ dàng kiểm tra rằng nếu A là ma trận đường chéo trội nghiêm ngặt thì $\det A \neq 0$ và $a_{ii} \neq 0, \forall i = 1, 2, \ldots, n$.

Xét hệ phương trình (2.1) với A là ma trận đường chéo trội nghiêm ngặt. Ta phân tích ma trận A theo dạng

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} - \\ &- \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -a_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \cdots & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & -a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} = \\ &= D - L - U \end{aligned}$$

Chú ý rằng do $a_{ii} \neq 0, \forall i = 1, 2, \ldots, n$ nên $\det D \neq 0$. Và như vậy tồn tại ma trận nghịch đảo:

$$D^{-1} = \begin{bmatrix} \dfrac{1}{a_{11}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{a_{22}} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \dfrac{1}{a_{nn}} \end{bmatrix}$$

Khi đó hệ

$$AX = B \Longleftrightarrow (D - L - U)X = B \tag{2.15}$$

Ta xét một vài phương pháp để chuyển hệ phương trình (2.1) về dạng $X = TX + C$.

2.4.1 PHƯƠNG PHÁP JACOBI

Từ hệ (2.15) ta có $DX = (L + U)X + B$. Do tồn tại D^{-1} nên

$$X = D^{-1}(L + U)X + D^{-1}B$$

Ký hiệu $T_j = D^{-1}(L + U)$ và $C_j = D^{-1}B$. Khi đó công thức lặp theo (2.13) sẽ có dạng

$$X^{(m)} = T_j X^{(m-1)} + C_j, \quad m = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.16}$$

Phương pháp lặp dựa trên công thức lặp (2.16) được gọi là *phương pháp Jacobi*. Công thức theo toạ độ của (2.16) như sau:

$$x_i^{(m)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(m-1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(m-1)}\right) \qquad \textbf{(2.17)}$$

với $i = 1, 2, \ldots, n$, $m = 1, 2, 3, \ldots$. Ta có

$$T_j = D^{-1}(L+U) = \begin{bmatrix} 0 & -\dfrac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\dfrac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\dfrac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \cdots & -\dfrac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -\dfrac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\dfrac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

nên

$$\|T_j\|_\infty = \max_{i=\overline{1,n}}\left(\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}\left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right|\right) = \max_{i=\overline{1,n}}\left(\frac{1}{|a_{ii}|}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}|\right) < 1$$

do A là ma trận đường chéo trội nghiêm ngặt. Vậy $\|T_j\|_\infty < 1$, nghĩa là phương pháp Jacobi luôn hội tụ với mọi véc-tơ lặp ban đầu $X^{(0)}$.

Ví dụ 2.13: Xét hệ phương trình

$$\begin{cases} 10x_1 + x_2 - x_3 = 7 \\ x_1 + 10x_2 + x_3 = 8 \\ -x_1 + x_2 + 10x_3 = 9 \end{cases}$$

Với véc-tơ lặp ban đầu $X^{(0)} = (0, 0, 0)^T$, hãy tính véc-tơ $X^{(3)}$ và đánh giá sai số của nó theo công thức tiên nghiệm. Ta có

$$T_j = \begin{bmatrix} 0.0 & -0.1 & 0.1 \\ -0.1 & 0.0 & -0.1 \\ 0.1 & -0.1 & 0.0 \end{bmatrix} \quad \text{và} \quad C_j = \begin{bmatrix} 0.7 \\ 0.8 \\ 0.9 \end{bmatrix}$$

Do đó:

$$X^{(1)} = T_jX^{(0)} + C_j = \begin{bmatrix} 0.7 \\ 0.8 \\ 0.9 \end{bmatrix}; X^{(2)} = T_jX^{(1)} + C_j = \begin{bmatrix} 0.71 \\ 0.64 \\ 0.89 \end{bmatrix};$$

$$X^{(3)} = T_j X^{(2)} + C_j = \begin{bmatrix} 0.725 \\ 0.640 \\ 0.907 \end{bmatrix}.$$ Ta có $\|T_j\|_\infty = 0.2$. Vì vậy

$$\left\|X^{(3)} - \overline{X}\right\|_\infty \leqslant \frac{(0.2)^3}{1-0.2}\left\|X^{(1)} - X^{(0)}\right\|_\infty = 0.009$$

Ví dụ 2.14: Hệ phương trình $AX = B$ cho bởi

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 + 2x_3 = 6 \\ -x_1 + 11x_2 - x_3 + 3x_4 = 25 \\ 2x_1 - x_2 + 10x_3 - x_4 = -11 \\ 3x_2 - x_3 + 8x_4 = 15 \end{cases}$$

có nghiệm duy nhất $\overline{x} = [1, 2, -1, 1]^T$. Để chuyển từ hệ $AX = B$ về dạng $X = T_j X + C_j$, ta biến đổi như sau

$$\begin{cases} x_1 = 0.100x_2 - 0.200x_3 + 0.600 \\ x_2 = 0.091x_1 + 0.091x_3 - 0.273x_4 + 2.273 \\ x_3 = -0.200x_1 + 0.100x_2 + 0.100x_4 - 1.100 \\ x_4 = -0.375x_2 + 0.125x_3 + 1.875 \end{cases}$$

Khi đó ma trận T_j và véc-tơ C_j có dạng:

$$T_j = \begin{bmatrix} 0 & 0.100 & -0.200 & 0 \\ 0.091 & 0 & 0.091 & -0.273 \\ -0.200 & 0.100 & 0 & 0.100 \\ 0 & -0.375 & 0.125 & 0 \end{bmatrix}, C_j = \begin{bmatrix} 0.600 \\ 2.273 \\ -1.100 \\ 1.875 \end{bmatrix}$$

Chọn chuẩn vô cùng và ta có $\|T_j\|_\infty = \frac{1}{2} < 1$. Do đó phương pháp lặp hội tụ. Chọn $x^{(0)} = [0, 0, 0, 0]^T$. Bảng sau đây cho chúng ta kết quả tính toán sau 10 lần lặp.

m	1	2	3	4	5
$x_1^{(m)}$	0.6000	1.0473	0.9326	1.0152	0.9890
$x_2^{(m)}$	2.2727	1.7159	2.0533	1.9537	2.0114
$x_3^{(m)}$	−1.1000	−0.8052	−1.0493	−0.9681	−1.0103
$x_4^{(m)}$	1.8750	0.8852	1.1309	0.9739	1.0214

m	6	7	8	9	10
$x_1^{(m)}$	1.0032	0.9981	1.0006	0.9997	1.0001
$x_2^{(m)}$	1.9922	2.0023	1.9987	2.0004	1.9998
$x_3^{(m)}$	−0.9945	−1.0020	−0.9990	−1.0004	−0.9998
$x_4^{(m)}$	0.9944	1.0036	0.9989	1.0006	0.9998

Quá trình lặp dừng lại dựa theo đánh giá:

$$\left\|x^{(10)} - \overline{x}\right\|_\infty \leqslant \frac{1/2}{1-1/2}\left\|x^{(10)} - x^{(9)}\right\|_\infty = 8.0 \times 10^{-4} < 10^{-3}$$

Trong khi sai số thực sự là $\|x^{(10)} - \overline{x}\|_\infty = 0.0002$.

Thuật toán Jacobi được thể hiện bằng cách gọi hàm:

$$X, tol = jacobi(A, B, X0, N = 25, post = True, k = 0, eps = 10 * *(-4))$$

với A là ma trận hệ số, B là véc-tơ tự do, $X0$ là véc-tơ lặp ban đầu, N là số lần lặp tối đa (mặc định là 25), nếu $post = True$ thì sai số tính theo công thức hậu nghiệm, ngược lại tính theo công thức tiên nghiệm, $k = 0$ - tính theo chuẩn vô cùng, $k = 1$ - tính theo chuẩn một và eps là sai số. Hàm trả về dãy véc-tơ nghiệm xấp xỉ trong X và dãy sai số tương ứng trong tol.

```
def jacobi(A, B, X0,
        N=25, post=True, knor=0, eps=10**(-4)):
    n = len(A)
    X = np.zeros((N, n), dtype=float)
    X[0] = X0.copy()
    tol = np.ones(N, dtype=float)
    Tj = jacobi_iterative_matrix(A)
    chtj = norm(Tj, knor)
    for k in range(1, N):
        for i in range(n):
            tmp = 0.0
            for j in range(n):
                if j != i:
                    tmp += A[i, j] * X[k - 1, j]
```

```
            X[k, i] = (B[i] - tmp) / A[i, i]
        if post:
            Y = X[k] - X[k - 1]
            ch = la.norm(Y,np.inf if knor==0 else 1)
            tol[k] = ch * chtj / (1 - chtj)
        else:
            Y = X[1] - X[0]
            ch = la.norm(Y,np.inf if knor==0 else 1)
            tol[k] = ch * chtj**k / (1 - chtj)
        if tol[k] < eps:
            break
    return X, tol
```

2.4.2 PHƯƠNG PHÁP GAUSS-SEIDEL

Trong công thức (2.17), để tính các toạ độ của véc-tơ lặp $X^{(m)}$, chúng ta chỉ sử dụng các toạ độ của véc-tơ $X^{(m-1)}$. Tuy nhiên, với $i > 1$, $x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, \dots, x_{i-1}^{(m)}$ đã được tính và xấp xỉ nghiệm chính xác $\overline{x}_1, \overline{x}_2, \dots, \overline{x}_{i-1}$ tốt hơn $x_1^{(m-1)}, x_2^{(m-1)}, \dots, x_{i-1}^{(m-1)}$. Do đó, khi tính $x_i^{(m)}$ chúng ta nên sử dụng các giá trị vừa tính xong $x_1^{(m)}, x_2^{(m)}, \dots, x_{i-1}^{(m)}$. Ta thu được

$$x_i^{(m)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(m)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(m-1)}\right) \tag{2.18}$$

với $i = 1, 2, \dots, n$, $m = 1, 2, 3, \dots$. Công thức (2.18) thường được gọi là công thức lặp *Gauss-Seidel*. Bây giờ ta sẽ viết dạng ma trận của phương pháp Gauss-Seidel.

Từ hệ phương trình (2.15) ta được

$$(D - L)X = UX + B$$

Ma trận $D - L$ cũng có ma trận nghịch đảo và do đó

$$X = (D - L)^{-1}UX + (D - L)^{-1}B$$

Đặt $T_g = (D - L)^{-1}U$ và $C_g = (D - L)^{-1}B$. Khi đó công thức lặp có dạng

$$X^{(m)} = T_g X^{(m-1)} + X_g, \qquad m = 1, 2, 3, \dots$$

Ví dụ 2.15: Xét hệ phương trình

$$\begin{cases} 12x_1 + x_2 - 2x_3 = 7.5 \\ 3x_1 + 14x_2 - x_3 = 8.7 \\ -2x_1 + 2x_2 + 15x_3 = 9.2 \end{cases}$$

Với véc-tơ lặp ban đầu $X^{(0)} = (0,0,0)^T$, hãy tính véc-tơ $X^{(3)}$ và đánh giá sai số của nó theo công thức hậu nghiệm. Ta có

$$T_g = \begin{bmatrix} 0.0 & -1/12 & 1/6 \\ 0.0 & 1/56 & 1/28 \\ 0.0 & -17/1260 & 11/630 \end{bmatrix} \quad \text{và} \quad C_g = \begin{bmatrix} 5/8 \\ 39/80 \\ 379/600 \end{bmatrix}$$

Do đó:

$$X^{(1)} = T_g X^{(0)} + C_g = \begin{bmatrix} 0.625 \\ 0.4875 \\ 0.631666667 \end{bmatrix}$$

$$X^{(2)} = T_g X^{(1)} + C_g = \begin{bmatrix} 0.689652778 \\ 0.518764881 \\ 0.636118386 \end{bmatrix}$$

$$X^{(3)} = T_g X^{(2)} + C_g = \begin{bmatrix} 0.687789324 \\ 0.519482172 \\ 0.635774287 \end{bmatrix}$$

Ta có $\|T_g\|_\infty = 0.25$. Vì vậy

$$\left\|X^{(3)} - \overline{X}\right\|_\infty \leqslant \frac{0.25}{1-0.25}\left\|X^{(3)} - X^{(2)}\right\|_\infty \approx 0.000622$$

Ví dụ 2.16: Xét hệ phương trình trong ví dụ 2.12

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 + 2x_3 = 6 \\ -x_1 + 11x_2 - x_3 + 3x_4 = 25 \\ 2x_1 - x_2 + 10x_3 - x_4 = -11 \\ 3x_2 - x_3 + 8x_4 = 15 \end{cases}$$

Công thức lặp theo phương pháp Gauss-Seidel có dạng

$$\begin{cases} x_1^{(m)} &= & 0.100x_2^{(m-1)} - 0.200x_3^{(m-1)} + 0.600 \\ x_2^{(m)} &= & 0.091x_1^{(m)} + 0.091x_3^{(m-1)} - 0.273x_4^{(m-1)} + 2.273 \\ x_3^{(m)} &= & -0.200x_1^{(m)} + 0.100x_2^{(m)} + 0.100x_4^{(m-1)} - 1.100 \\ x_4^{(m)} &= & -0.375x_2^{(m)} + 0.125x_3^{(m)} + 1.875 \end{cases}$$

Chọn $x_0 = [0,0,0,0]^T$. Bảng sau đây cho chúng ta kết quả tính toán sau 5 lần lặp.

m	1	2	3	4	5
$x_1^{(m)}$	0.6000	1.0300	1.0065	1.0009	1.0001
$x_2^{(m)}$	2.3272	2.0370	2.0036	2.0003	2.0000
$x_3^{(m)}$	−0.9873	−1.0140	−1.0025	−1.0003	−1.0000
$x_4^{(m)}$	0.8789	0.9844	0.9983	0.9999	1.0000

Ta thấy đến lần lặp thứ năm, nghiệm thu được bằng phương pháp Gauss-Seidel tốt hơn nhiều so với phương pháp Jacobi.

Thuật toán Gauss-Seidel được thể hiện bằng cách gọi hàm:

$X, tol = gauss\_seidel(A, B, X0, N = 15, post = True, k = 0, eps = 10{*}{*}(-5))$

với A là ma trận hệ số, B là véc-tơ tự do, $X0$ là véc-tơ lặp ban đầu, N là số lần lặp tối đa (mặc định là 15), nếu $post = True$ thì sai số tính theo công thức hậu nghiệm, ngược lại tính theo công thức tiên nghiệm, $k = 0$ - tính theo chuẩn vô cùng, $k = 1$ - tính theo chuẩn một và eps là sai số. Hàm trả về dãy véc-tơ nghiệm xấp xỉ trong X và dãy sai số tương ứng trong tol.

```
def gauss_seidel(A, B, X0,
        N=15, post=True, knor=0, eps=10**(-5)):
    n = len(A)
    X = np.zeros((N, n), dtype=float)
    X[0] = X0.copy()
    tol = np.zeros(N, dtype=float)
    Tg = gauss_seidel_iterative_matrix(A)
    chtg = norm(Tg, knor)
```

```
    for k in range(1, N):
        for i in range(n):
            tmp = 0.0
            for j in range(n):
                if j < i:
                    tmp += A[i, j] * X[k, j]
                elif j > i:
                    tmp += A[i, j] * X[k - 1, j]
            X[k, i] = (B[i] - tmp) / A[i, i]
        if post:
            Y = X[k] - X[k - 1]
            ch = la.norm(Y,np.inf if knor==0 else 1)
            tol[k] = ch * chtg / (1 - chtg)
        else:
            Y = X[1] - X[0]
            ch = la.norm(Y,np.inf if knor==0 else 1)
            tol[k] = ch * chtg**k / (1 - chtg)
        if tol[k] < eps:
            break
    return X, tol
```

§2.5 ÁP DỤNG

2.5.1 PHÂN TÍCH LỰC TRONG GIÀN TĨNH

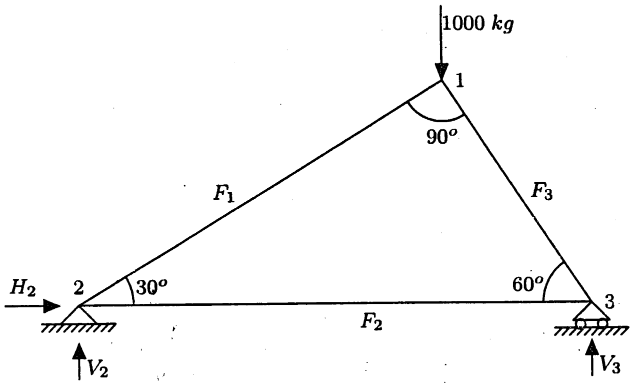
Vấn đề quan trọng trong bài toán kết cấu là việc xác định lực và phản lực trong giàn tĩnh. Hình vẽ sau là một ví dụ.

Theo quy tắc, tổng lực tác dụng tại mỗi điểm nút (1,2,3) theo các phương thẳng đứng hoặc nằm ngang đều bằng không. Ta có:

Tại nút 1: $\begin{cases} -F_1 \cos 30^o + F_3 \cos 60^o + F_{1h} = 0 \\ -F_1 \sin 30^o - F_3 \sin 60^o + F_{1v} = 0 \end{cases}$

Tại nút 2: $\begin{cases} F_2 + F_1 \cos 30^o + F_{2h} + H_2 = 0 \\ F_1 \sin 30^o + F_{2v} + V_2 = 0 \end{cases}$

Tại nút 3: $\begin{cases} -F_2 - F_3 \cos 60^o + F_{3h} = 0 \\ F_3 \sin 60^o + F_{3v} + V_3 = 0 \end{cases}$



Ở đây, F_{ih} là lực ngoài theo phương nằm ngang tác dụng lên nút thứ i (hướng dương từ trái sang phải) và F_{iv} là lực ngoài theo phương thẳng đứng tác dụng lên nút thứ i (hướng dương từ dưới lên trên). Vì vậy, trong bài toán này, $F_{1v} = -1000$ còn những lực ngoài khác đều bằng không. Hệ phương trình được viết lại dưới dạng

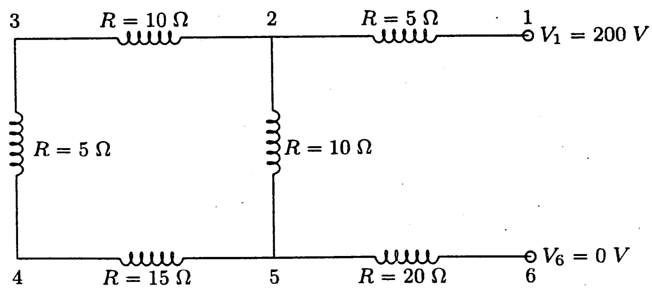
$$\begin{bmatrix} 0.866 & 0 & 0.5 & 0 & 0 & 0 \\ 0.5 & 0 & 0.866 & 0 & 0 & 0 \\ -0.866 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -0.5 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0.5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0.866 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ H_2 \\ V_2 \\ V_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1000 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Giải hệ phương trình trên ta đi đến kết quả:

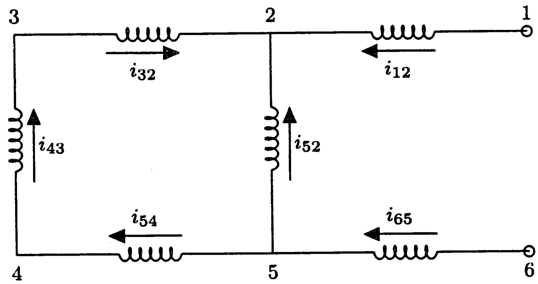
$$F_1 = -500,\ F_2 = 433,\ F_3 = -866,\ H_2 = 0,\ V_2 = 250,\ V_3 = 750.$$

2.5.2 DÒNG ĐIỆN VÀ ĐIỆN THẾ TRONG MẠCH ĐIỆN TRỞ

Xét mạch điện như hình vẽ sau:



Dòng điện trong mạch này là chưa biết kể cả chiều và cường độ. Ta giả thiết chiều và cường độ của dòng điện trong từng đoạn theo hình vẽ sau. Nếu kết quả tính toán là số âm thì dòng điện có chiều ngược lại.



Từ định luật Kirchhoff về dòng điện (KCL) ta có các phương trình tương ứng với các nút 2,3,4,5 như sau:

$$\begin{cases} i_{12} + i_{32} + i_{52} = 0 \\ i_{65} - i_{52} - i_{54} = 0 \\ i_{43} - i_{32} = 0 \\ i_{54} - i_{43} = 0 \end{cases}$$

Áp dụng định luật Kirchhoff về điện áp (KVL) ta có thêm hai phương trình nữa

$$\begin{cases} i_{54}R_{54} + i_{43}R_{43} + i_{32}R_{32} - i_{52}R_{52} = 0 \\ i_{65}R_{65} + i_{52}R_{52} - i_{12}R_{12} + 200 = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 15i_{54} + 5i_{43} + 10i_{32} - 10i_{52} = 0 \\ 20i_{65} + 10i_{52} - 5i_{12} + 200 = 0 \end{cases}$$

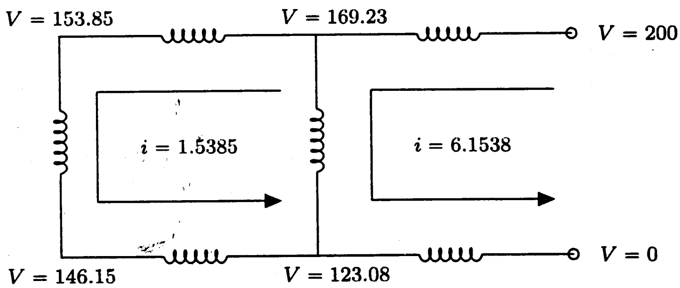
Ta thu được hệ phương trình

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & -10 & 10 & 0 & 15 & 5 \\ -5 & 10 & 0 & 20 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i_{12} \\ i_{52} \\ i_{32} \\ i_{65} \\ i_{54} \\ i_{43} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -200 \end{bmatrix}$$

Giải hệ phương trình trên, ta đi đến kết quả sau:

$$\begin{aligned} i_{12} &= 6.1538, & i_{52} &= -4.6154, & i_{32} &= -1.5385 \\ i_{65} &= -6.1538, & i_{54} &= -1.5385, & i_{43} &= -1.5385 \end{aligned}$$

Vì vậy, với sự chú ý về dấu của kết quả như nhận xét ở trên, cường độ dòng điện và điện thế tại các điểm nút được thể hiện trong hình vẽ sau.



BÀI TẬP

Câu 1. Sử dụng phương pháp phần tử trội giải các hệ phương trình sau:

(a) $$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 3 \\ 2x_1 + 5x_2 + 3x_3 = 5 \\ x_1 + 4x_2 + 6x_3 = 6 \end{cases}$$

(b) $$\begin{cases} 2.7x_1 - 3.3x_2 + 4.9x_3 = 3.8 \\ 2.5x_1 + 5.1x_2 - 1.3x_3 = 5.4 \\ 1.1x_1 + 3.4x_2 - 4.6x_3 = 6.3 \end{cases}$$

(c) $$\begin{cases} 3x_1 + 2x_2 + 5x_3 + x_4 = 1 \\ 2x_1 + 6x_2 + 3x_3 + 2x_4 = 2 \\ x_1 + 4x_2 + x_3 + 3x_4 = 3 \\ 5x_1 + 2x_2 + 2x_3 + x_4 = 4 \end{cases}$$

Câu 2. Cho hàm $f(x) = \begin{cases} ax + b, & x < 1 \\ cx + d, & x \geqslant 1 \end{cases}$. Hãy xác định các hệ số a, b, c và d biết $f(x)$ thoả các điều kiện:

- $f(x)$ liên tục trong $\mathbb{R}$,
- $f(0) = f(2) = 1$,

- $a + b = 4$.

Câu 3. Tìm phân rã Doolittle và Crout của các ma trận sau:

(a) $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 4 \end{bmatrix}$ (b) $A = \begin{bmatrix} 4 & 3 & 2 \\ 2 & 3 & 1 \\ 1 & 4 & 3 \end{bmatrix}$

(c) $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$ (d) $A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \\ 2 & 1 & 3 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 3 \end{bmatrix}$

Câu 4. Tìm các giá trị của m để cho các ma trận sau là xác định dương.

(a) $A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 1 & m & 1 \\ -1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$ (b) $A = \begin{bmatrix} 3 & m & 2 \\ m & 5 & 1 \\ 2 & 1 & 8 \end{bmatrix}$

(c) $A = \begin{bmatrix} 3 & 4 & m \\ 4 & 6 & 3 \\ m & 3 & 7 \end{bmatrix}$ (d) $A = \begin{bmatrix} 2 & m & 3 \\ 3 & 3 & 2 \\ m & 2 & 6 \end{bmatrix}$

Câu 5. Kiểm tra tính đối xứng và xác định dương của ma trận A và tìm ma trận C trong phân rã Choleski.

(a) $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 3 \\ 1 & 3 & 6 \end{bmatrix}$ (b) $A = \begin{bmatrix} 4 & -3 & 0 \\ -3 & 4 & -2 \\ 0 & -2 & 4 \end{bmatrix}$

(c) $A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$ (d) $A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 4 & 3 & 2 \\ 1 & 3 & 5 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 7 \end{bmatrix}$

Câu 6. Tính số điều kiện theo chuẩn 1 và chuẩn ∞ của các ma trận sau:

(a) $A = \begin{bmatrix} 1 & 5 & 7 \\ 3 & 3 & 5 \\ 2 & 1 & 8 \end{bmatrix}$ (b) $A = \begin{bmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 3 & -5 & 4 \\ 4 & -1 & 3 \end{bmatrix}$

(c) $A = \begin{bmatrix} 2 & -2 & 1 & 4 \\ 3 & -4 & 2 & 5 \\ 4 & -6 & 1 & 3 \\ 5 & -8 & 2 & 2 \end{bmatrix}$ (d) $A = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & 1/4 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 \\ 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 \end{bmatrix}$

Câu 7. Tính số điều kiện theo chuẩn ∞ của ma trận $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & \alpha \end{bmatrix}$ với $\alpha \in \mathbb{R}$.

Câu 8. Sử dụng phương pháp Jacobi với $X^{(0)} = \mathcal{O}$ tìm véc-tơ lặp $X^{(5)}$ và tính sai số của nó theo công thức đánh giá sai số hậu nghiệm.

(a) $\begin{cases} 5x_1 - 2x_2 = 2.55 \\ 2x_1 + 4x_2 = 3.16 \end{cases}$

(b) $\begin{cases} 12.35x_1 + 4.14x_2 = 11.87 \\ 5.93x_1 + 13.72x_2 = 17.64 \end{cases}$

(c) $\begin{cases} 8x_1 + 2x_2 - x_3 = 4 \\ x_1 + 9x_2 - 2x_3 = 8 \\ 2x_1 + 2x_2 + 11x_3 = 9 \end{cases}$

(d) $\begin{cases} 3.47x_1 + 0.55x_2 + 0.21x_3 = 1.25 \\ 0.33x_1 + 4.12x_2 + 0.18x_3 = 2.45 \\ 0.45x_1 + 0.16x_2 + 3.98x_3 = 2.06 \end{cases}$

(e) $\begin{cases} 15x_1 - 2x_2 + 3x_3 - x_4 = 18 \\ 2x_1 + 16x_2 - 3x_3 + 2x_4 = 20 \\ -x_1 + 4x_2 + 17x_3 + 3x_4 = 16 \\ 3x_1 - 2x_2 + x_3 + 18x_4 = 24 \end{cases}$

Câu 9. Lặp lại bài tập 8, sử dụng phương pháp Gauss-Seidel.

Câu 10. Cho hệ phương trình $Ax = b$ với $A = (a_{ij})_{i,j=1}^{n}$, $n = 10$ và

$$a_{ij} = \begin{cases} 4, & \text{if } i = j \\ -1, & \text{if } |i-j| = 1 \\ 1, & \text{if } |i-j| = 2 \\ 0, & \text{elsewhere} \end{cases}, \qquad B = \begin{bmatrix} 10 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

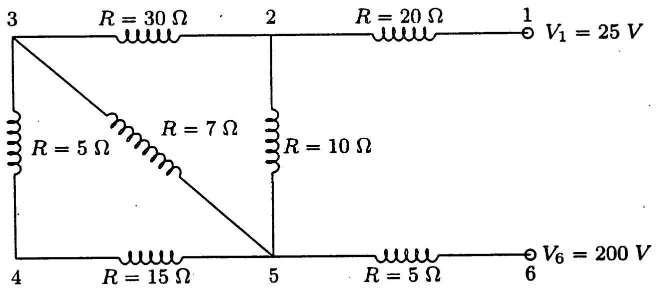
Sử dụng phương pháp Gauss-Seidel với $x^0 = (0, 0, \ldots, 0)^T$ tìm véc-tơ nghiệm với sai số nhỏ hơn 10^{-5}. Sử dụng công thức đánh giá sai số hậu nghiệm và chuẩn vô cùng.

Câu 11. Một nhà máy cần các vật liệu kim loại, nhựa và cao su để sản xuất xe. Bảng sau đây cho chúng ta số lượng vật liệu (tính theo kg/xe) cần cho mỗi loại xe.

Xe	Kim loại	Nhựa	Cao su
1	1500	25	100
2	1700	33	120
3	1900	42	160

Mỗi ngày số lượng vật liệu cung cấp cho nhà máy là 106 tấn kim loại, 2.17 tấn nhựa và 8.2 tấn cao su. Tìm số lượng xe được sản xuất mỗi ngày.

Câu 12. Tìm cường độ dòng điện và phân bố điện thế trong mạch điện như hình vẽ sau:



NỘI SUY VÀ XẤP XỈ HÀM

Mục lục

3.1 Đa thức nội suy Lagrange **76**
3.2 Đa thức nội suy Newton **82**
3.3 Đa thức nội suy Hermite **86**
3.4 Spline bậc ba **89**
3.4.1 Spline bậc ba tự nhiên 91
3.4.2 Spline bậc ba ràng buộc 93
3.5 Đường cong tham số **96**
3.6 Bài toán xấp xỉ hàm thực nghiệm **100**
3.7 Áp dụng **103**
Bài tập chương 3 . . . . **105**

Trong chương này chúng ta sẽ xét hàm $y = f(x)$ cho dưới dạng bảng số

x	x_0	x_1	x_2	$\cdots$	x_n
y	y_0	y_1	y_2	$\cdots$	y_n

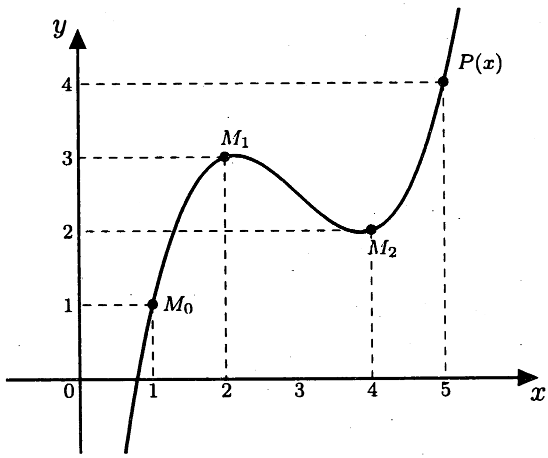
(3.1)

trong đó n là số nguyên dương. Các giá trị $x_k, k = 0, 1, \ldots, n$ được gọi là các *điểm nút (mốc)* và được sắp theo thứ tự tăng dần theo chỉ số k, còn các giá trị $y_k = f(x_k), k = 0, 1, \ldots, n$ là giá trị cho trước của hàm tương ứng tại x_k.

Bài toán đặt ra là cần xây dựng một đa thức $P(x)$ thoả điều kiện $P(x_k) = y_k, k = 0, 1, \ldots, n$ và được gọi là *đa thức nội suy* của hàm $f(x)$. Chúng ta thường sử dụng đa thức bởi vì có thể dễ dàng tính giá trị của đa thức, dễ dàng tính đạo hàm, tích phân của đa thức. Hơn nữa, mọi hàm liên tục trong khoảng đóng, bị chặn đều được xấp xỉ tốt bởi đa thức. Nghĩa là nếu $f(x)$ liên tục trong đoạn $[a, b]$, thì với mọi $\epsilon > 0$, luôn có một đa thức $P(x)$ sao cho

$$|f(x) - P(x)| < \epsilon$$

Về mặt hình học, trong mặt phẳng xOy cho một tập các điểm $\{M_k(x_k, y_k)\}_{k=0}^{n}$, cần xây dựng một đường cong đa thức đi qua các điểm đã cho (Hình 3.1). Nói chung có rất nhiều đa thức như vậy. Tuy nhiên, có thể chứng minh rằng nếu bậc của đa thức $P(x)$ là nhỏ hơn hay bằng n thì sự tồn tại của đa thức nội suy là duy nhất.



Hình 3.1: *Xấp xỉ bằng đường cong đa thức*

Chương trình sau dùng để xác định các hệ số của đa thức $P_n(x)$ nội suy bảng số (3.1) bằng cách giải hệ phương trình tuyến tính

$$\begin{cases} p_0 + p_1 x_k + \cdots + p_{n-1} x_k^{n-1} + p_n x_k^n = y_k, \\ k = 0, 1, \ldots, n \end{cases}$$

Ta gọi hàm

$$p = interp(x, y)$$

với x và y là hai dãy số. Hàm trả về đa thức

$$P_n(x) = p[0] + p[1]x + \cdots + p[n-1]x^{n-1} + p[n]x^n$$

dưới dạng mảng $p[]$.

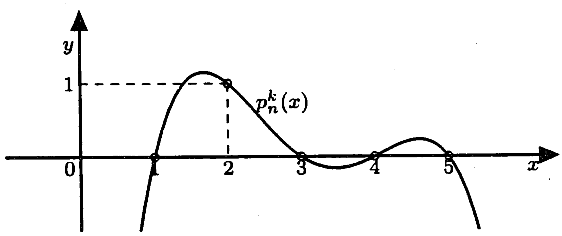
```
def interp(xx, yy):
    n = len(xx)
    A = np.zeros((n, n), dtype=float)
    B = np.zeros(n, dtype=float)
    for i in range(n):
```

```
        B[i] = yy[i]
        for j in range(n):
            A[i, j] = xx[i] ** j
    pp = jordan(A, B)
    return pp
```

§3.1 ĐA THỨC NỘI SUY LAGRANGE

Xét bảng số (3.1) của hàm $f(x)$ với $n \geqslant 1$. Chúng ta sẽ tìm đa thức nội suy $L_n(x)$ của hàm $f(x)$ trên $[x_0, x_n]$ có bậc nhỏ hơn hay bằng n và thoả $L_n(x_k) = y_k$, $k = 0, 1, \ldots, n$. Trước tiên, ta xây dựng các đa thức phụ (cơ sở) $p_n^{(k)}(x)$, $k = 0, 1, \ldots, n$, tương ứng với điểm nút x_k, có bậc bằng n và thoả điều kiện (Hình 3.2)

$$p_n^{(k)}(x_j) = \begin{cases} 1, & j = k \\ 0, & j \neq k \end{cases}$$



Hình 3.2: *Đa thức phụ* $p_n^k(x)$

Do các đa thức $p_n^{(k)}(x)$ có n nghiệm $x_0, \ldots, x_{k-1}, x_{k+1}, \ldots, x_n$ và có bậc nhỏ hơn hay bằng n nên ta có thể viết chúng dưới dạng:

$$p_n^{(k)}(x) = C_k(x - x_0)\ldots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\ldots(x - x_n)$$

với C_k là hằng số. Từ điều kiện $p_n^{(k)}(x_k) = 1$, ta thu được:

$$C_k = \frac{1}{(x_k - x_0)\ldots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\ldots(x_k - x_n)}$$

Khi đó ta có:

$$p_n^{(k)}(x) = \frac{(x - x_0)\ldots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\ldots(x - x_n)}{(x_k - x_0)\ldots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\ldots(x_k - x_n)}, \quad k = 0, 1, \ldots, n$$

Ta gọi đa thức sau đây là đa thức nội suy Lagrange:

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} p_n^{(k)}(x) y_k \tag{3.2}$$

Dễ dàng kiểm tra rằng đa thức xây dựng theo công thức (3.2) thoả tất cả các yêu cầu đề ra là $\deg L_n(x) \leqslant n$ và $L_n(x_k) = y_k, k = 0, 1, \ldots, n$.

Ví dụ 3.1: Xây dựng đa thức Lagrange nội suy bảng số:

x	0	1	3
y	1	−1	2

. Trước tiên ta tìm các đa thức phụ (chú ý rằng $n = 2$).

$$p_2^{(0)}(x) = \frac{(x-1)(x-3)}{(0-1)(0-3)} = \frac{1}{3}(x^2 - 4x + 3)$$
$$p_2^{(1)}(x) = \frac{(x-0)(x-3)}{(1-0)(1-3)} = -\frac{1}{2}(x^2 - 3x)$$
$$p_2^{(2)}(x) = \frac{(x-0)(x-1)}{(3-0)(3-1)} = \frac{1}{6}(x^2 - x)$$

Do đó

$$L_2(x) = \frac{1}{3}(x^2 - 4x + 3) + \frac{1}{2}(x^2 - 3x) + \frac{1}{3}(x^2 - x) = \frac{7}{6}x^2 - \frac{19}{6}x + 1$$

là đa thức Lagrange cần tìm. Bây giờ để xấp xỉ giá trị của hàm tại một điểm nào đó trong đoạn $[0, 3]$, ví dụ tại $x = 2$, chúng ta có thể sử dụng đa thức Lagrange:

$$y(2) \approx L_2(2) = \frac{7}{6}2^2 - \frac{19}{6}2 + 1 = -\frac{2}{3}$$

Ta xét một cách viết khác của đa thức Lagrange. Đặt

$$\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n) \tag{3.3}$$

Khi ấy các đa thức phụ $p_n^{(k)}(x)$ có dạng

$$p_n^{(k)}(x) = \frac{\omega(x)}{\omega'(x_k)(x - x_k)}$$

với $\omega'(x_k) = (x_k - x_0)\ldots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\ldots(x_k - x_n)$.

Đa thức Lagrange trở thành

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{\omega(x)}{\omega'(x_k)(x - x_k)} y_k = \omega(x) \sum_{k=0}^{n} \frac{y_k}{D_k} \tag{3.4}$$

với $D_k = \omega'(x_k)(x - x_k),\ k = 0, 1, \dots, n$.

Chúng ta có thể sử dụng công thức (3.4) để xây dựng đa thức Lagrange bằng cách lập bảng như sau.

x	x_0	x_1	$\dots$	x_n	
x_0	$x - x_0$	$x_0 - x_1$	$\dots$	$x_0 - x_n$	D_0
x_1	$x_1 - x_0$	$x - x_1$	$\dots$	$x_1 - x_n$	D_1
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$
x_n	$x_n - x_0$	$x_n - x_1$	$\dots$	$x - x_n$	D_n
					$\omega(x)$

Ta có thể xem bảng số trên như một ma trận vuông cấp $n+1$ với các hàng và cột được đánh số bởi $x_0, x_1, \dots, x_n$. Tại các vị trí trên đường chéo chính ứng với phần tử x_i ta điền biểu thức $x - x_i$. Còn tại các vị trí ở hàng x_i, cột x_j ta điền giá trị $x_i - x_j$. Khi đó tích các phần tử nằm trên cùng một hàng là D_k. Còn tích các phần tử nằm trên đường chéo chính là $\omega(x)$.

Ví dụ 3.2: Cho bảng số $\begin{array}{c|cccc} x & 0 & 1 & 3 & 4 \\ \hline y & 1 & 1 & 2 & -1 \end{array}$. Hãy xây dựng đa thức Lagrange nội suy bảng số trên. Ta thành lập bảng sau:

x	0	1	3	4	
0	$x - 0$	-1	-3	-4	$D_0 = -12x$
1	1	$x - 1$	-2	-3	$D_1 = 6(x-1)$
3	3	2	$x - 3$	-1	$D_2 = -6(x-3)$
4	4	3	1	$x - 4$	$D_3 = 12(x-4)$
					$\omega(x) = x(x-1)(x-3)(x-4)$

Do đó

$$\begin{aligned}
L_3(x) &= \omega(x)\left(\frac{y_0}{D_0} + \frac{y_1}{D_1} + \frac{y_2}{D_2} + \frac{y_3}{D_3}\right) \\
&= \omega(x)\left[\frac{1}{-12x} + \frac{1}{6(x-1)} + \frac{2}{-6(x-3)} + \frac{-1}{12(x-4)}\right] \\
&= -\frac{1}{12}(x-1)(x-3)(x-4) + \frac{1}{6}x(x-3)(x-4) - \\
&- \frac{1}{3}x(x-1)(x-4) - \frac{1}{12}x(x-1)(x-3) \\
&= -\frac{1}{3}x^3 + \frac{3}{2}x^2 - \frac{7}{6}x + 1 = \frac{1}{6}(-2x^3 + 9x^2 - 7x + 6)
\end{aligned}$$

Ví dụ 3.3: Cho bảng số

x	1.0	1.25	1.5	1.75	2.0
y	0.693	1.267	2.062	3.098	4.394

của hàm $y = x^2 \ln(x+1)$ trong $[1, 2]$. Sử dụng đa thức Lagrange, tính gần đúng giá trị của hàm tại $x = 1.32$ và so sánh với giá trị chính xác $y(1.32) = 1.466346664 \approx 1.466$. Ta thành lập bảng sau:

$x = 1.32$	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00	
1.00	0.32	−0.25	−0.50	−0.75	−1.00	$D_0 = 0.03$
1.25	0.25	0.07	−0.25	−0.50	−0.75	$D_1 = -0.001640625$
1.50	0.50	0.25	−0.18	−0.25	−0.50	$D_2 = -0.0028125$
1.75	0.75	0.50	0.25	−0.43	−0.25	$D_3 = 0.010078125$
2.00	1.00	0.75	0.50	0.25	−0.68	$D_4 = -0.06375$
						$\omega = -0.0011789568$

Do đó

$$\begin{aligned} y(1.32) &\approx L_4(1.32) = \omega\left(\frac{y_0}{D_0} + \frac{y_1}{D_1} + \frac{y_2}{D_2} + \frac{y_3}{D_3} + \frac{y_4}{D_4}\right) \\ &= 1.466444547 \approx 1.466 \end{aligned}$$

Ta thấy nếu lấy ba chữ số sau dấu phẩy thập phân, thì kết quả tính theo đa thức Lagrange hoàn toàn trùng với giá trị chính xác.

Với thuật toán Lagrange như trên ta có chương trình

$$y0 = lagrange(x, y, x0)$$

dùng để xấp xỉ giá trị gần đúng của hàm theo công thức (3.4).

```
def lagrange(x, y, x0):
    n = len(x)
    xy = np.zeros((n, n), dtype=float)
    D = np.zeros(n, dtype=float)
    for i in range(n):
        for j in range(n):
            if i == j:
```

```
                xy[i, j] = x0 - x[i]
            else:
                xy[i, j] = x[i] - x[j]
    for i in range(n):
        D[i] = 1.0
        for j in range(n):
            D[i] *= xy[i, j]
    omega = 1.0
    for i in range(n):
        omega *= xy[i, i]
    val = 0.0
    for i in range(n):
        val += y[i] / D[i]
    return omega * val
```

Ngoài ra ta cũng có thể sử dụng thuật toán Neville, trình bày trong giáo trình [1] chẳng hạn

$$y0 = neville(x, y, x0)$$

```
def neville(x, y, x0):
    n = len(x)
    Q = np.zeros((n, n), dtype=float)
    for i in range(n):
        Q[i,0] = y[i]
    for i in range(1, n):
        for j in range(1,i+1):
            Q[i,j] = ((x0-x[i-j])*Q[i,j-1]-(x0-x[i])*
            Q[i-1,j-1])/(x[i]-x[i-j])
    return Q[n - 1, n - 1]
```

Bây giờ ta xét trường hợp các điểm nút cách đều với bước $h = x_{k+1} - x_k$, $k = 0, 1, \ldots, n-1$. Nghĩa là $x_k = x_0 + kh$. Đặt $q = \dfrac{x - x_0}{h}$, ta thu được

$$\begin{aligned} x - x_k &= (q-k)h,\ x_i - x_j = (i-j)h \\ \omega(x) &= q(q-1)\ldots(q-n)h^{n+1} \Rightarrow \omega'(x_k) = (-1)^{n-k}k!(n-k)!h^n \end{aligned}$$

Khi đó công thức Lagrange có dạng

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^{n-k} q(q-1)\ldots(q-n)}{k!(n-k)!(q-k)} y_k \tag{3.5}$$

Cuối cùng, ta nêu công thức đánh giá sai số của đa thức nội suy Lagrange. Giả sử hàm $f(x)$ có đạo hàm đến cấp $n+1$ liên tục trên đoạn $[x_0, x_n]$, được cho dưới dạng bảng số (3.1) với $y_k = f(x_k), k = 0, 1, \ldots, n$. Lấy một điểm $x^* \in [x_0, x_n]$ sao cho $x^* \neq x_k, k = 0, 1, \ldots, n$. Ta sẽ tìm giá trị λ thoả

$$f(x^*) = L_n(x^*) + \lambda\omega(x^*) \tag{3.6}$$

Xét hàm phụ

$$F(x) = f(x) - L_n(x) - \lambda\omega(x)$$

Vì $L_n(x), \omega(x)$ là các đa thức và $f(x)$ có đạo hàm đến cấp $n+1$ liên tục nên $F(x)$ cũng có đạo hàm liên tục đến cấp $n+1$. Ta nhận thấy $F(x) = 0$ tại $n+2$ điểm $x^*, x_0, x_1, \ldots, x_n$ trong đoạn $[x_0, x_n]$. Do đó nếu áp dụng định lý Rolle $n+1$ lần trên đoạn $[x_0, x_n]$ ta sẽ có một điểm $\xi \in [x_0, x_n]$ sao cho $F^{(n+1)}(\xi) = 0$. Nghĩa là

$$F^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - \lambda(n+1)! = 0$$

và như vậy ta được

$$\lambda = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

Thay giá trị λ vừa tìm được vào trong công thức (3.6) ta được

$$f(x^*) = L_n(x^*) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x^*) \tag{3.7}$$

với mọi $x^* \in [x_0, x_n]$ và $x^* \neq x_k, k = 0, 1, \ldots, n$. Tuy nhiên, nếu $x^* = x_k$, $k = 0, 1, \ldots, n$ thì công thức (3.7) vẫn đúng, do đó công thức (3.7) là đúng với mọi $x^* \in [x_0, x_n]$. Trong công thức (3.7), thay x^* bằng x và đặt

$$M_{n+1} = \max_{x \in [x_0, x_n]} \left| f^{(n+1)}(x) \right|$$

Khi đó sai số giữa hàm $f(x)$ và đa thức Lagrange nội suy bảng (3.1) được đánh giá theo công thức sau

$$\forall x \in [x_0, x_n], \quad |f(x) - L_n(x)| \leqslant \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\omega(x)| \tag{3.8}$$

Ví dụ 3.4: Xét hàm $f(x) = 2^x$ trong đoạn $[0, 1]$. Để tính gần đúng giá trị của hàm tại $x = 0.45$, ta sử dụng đa thức Lagrange với các điểm nút nội suy $x_0 = 0, x_1 = 0.25, x_2 = 0.5, x_3 = 0.75, x_4 = 1$. Khi đó sai số mắc phải được xác định như sau. Ta có $n = 4$, $f^{(5)}(x) = (\ln 2)^5 2^x$ cho nên $M_5 = \max\limits_{x\in[0,1]} |f^{(5)}(x)| = 2(\ln 2)^5$. Như vậy

$$|2^{0.45} - L_4(0.45)| \leqslant \frac{2(\ln 2)^5}{5!}(0.45)(0.20)(0.05)(0.30)(0.55) \approx 0.2 \times 10^{-5}$$

§3.2 ĐA THỨC NỘI SUY NEWTON

Xét bảng số (3.1) của hàm số $f(x)$ trên đoạn $[x_0, x_n]$. Ta gọi

$$f[x_k] = y_k$$

là *tỷ sai phân cấp không* của hàm f tại x_k, $k = 0, 1, \ldots, n$.

Trên đoạn $[x_k, x_{k+1}]$ ta xét đại lượng

$$f[x_k, x_{k+1}] = \frac{y_{k+1} - y_k}{x_{k+1} - x_k}$$

và được gọi là *tỷ sai phân cấp một* của hàm trên đoạn $[x_k, x_{k+1}]$.

Bằng quy nạp, ta có thể định nghĩa *tỷ sai phân cấp p* của hàm trên đoạn $[x_k, x_{k+p}]$ như sau

$$f[x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+p}] = \frac{f[x_{k+1}, x_{k+2}, \ldots, x_{k+p}] - f[x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+p-1}]}{x_{k+p} - x_k}$$

Chú ý rằng tỷ sai phân là hàm số đối xứng của các đối số, nghĩa là $f[x_k, x_{k+1}] = f[x_{k+1}, x_k]$. Hơn nữa, tỷ sai phân cấp n của đa thức bậc n là hằng số và tỷ sai phân cấp lớn hơn n của đa thức cấp n bằng không. Thông thường, để tính tỷ sai phân của hàm số ta thành lập bảng được gọi là bảng tỷ sai phân. Để minh họa ta xét ví dụ sau.

Ví dụ 3.5: Lập bảng tỷ sai phân của hàm cho bởi:

x	1.0	1.3	1.6	1.9
y	0.76	0.62	0.45	0.28

Ta được

x_k	$f(x_k)$	$f[x_k, x_{k+1}]$	$f[x_k, x_{k+1}, x_{k+2}]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$
1.0	0.76			
		−0.47		
1.3	0.62		−0.17	
		−0.57		0.19
1.6	0.45		−0.00	
		−0.57		
1.9	0.28			

Ví dụ, tỷ sai phân cấp hai của hàm trên đoạn $[1.0, 1.6]$ là

$$f[1.0, 1.3, 1.6] = -0.17$$

Bây giờ ta sẽ xây dựng đa thức $N_n(x)$ bậc không cao hơn n thoả $N_n(x_k) = y_k$, $k = 0, 1, \ldots, n$. Theo định nghĩa của tỷ sai phân cấp một của hàm $f(x)$: $f[x, x_0] = \dfrac{f(x) - y_0}{x - x_0} \Longrightarrow f(x) = y_0 + (x - x_0)f[x, x_0]$. Lại dùng định nghĩa của tỷ sai phân cấp hai của hàm $f(x)$:

$$f[x, x_0, x_1] = \frac{f[x, x_0] - f[x_0, x_1]}{x - x_1}$$

ta được

$$f(x) = y_0 + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x, x_0, x_1](x - x_0)(x - x_1).$$

Tiếp tục quá trình trên đến bước thứ n ta thu được

$$\begin{aligned} f(x) &= y_0 + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \cdots + \\ &+ f[x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1}) + \\ &+ f[x, x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n) \end{aligned}$$

Đặt

$$\begin{aligned} N_n^{(1)}(x) &= y_0 + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \\ &+ \cdots + f[x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1}) \end{aligned} \tag{3.9}$$

và

$$R_n(x) = f[x, x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)$$

ta được

$$f(x) = N_n^{(1)}(x) + R_n(x)$$

Công thức (3.9) được gọi là *công thức Newton tiến* xuất phát từ điểm nút x_0 của hàm số $f(x)$ và $R_n(x)$ là sai số của đa thức nội suy Newton. Bằng cách làm tương tự, ta có thể xây dựng *công thức Newton lùi* xuất phát từ điểm nút x_n của hàm số $f(x)$ như sau

$$\begin{aligned} N_n^{(2)}(x) &= y_n + f[x_{n-1}, x_n](x - x_n) + \\ &+ f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n](x - x_{n-1})(x - x_n) + \\ &+ \cdots + f[x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n) \end{aligned} \tag{3.10}$$

Do tính duy nhất của đa thức nội suy, ta có với cùng một bảng số thì $L_n(x) = N_n^{(1)}(x) = N_n^{(2)}(x)$. Vì vậy ta có thể sử dụng công thức (3.8) để đánh giá sai số của các công thức nội suy Newton.

Ví dụ 3.6: Cho bảng số

x	0.0	0.3	0.7	1.0
y	2.0000	2.2599	2.5238	2.7183

. Dùng công thức Newton tiến tính gần đúng giá trị của hàm tại $x =$ 0.12.

Trước tiên ta lập bảng tỷ sai phân

x_k	$f(x_k)$	$f[x_k, x_{k+1}]$	$f[x_k, \ldots, x_{k+2}]$	$f[x_k, \ldots, x_{k+3}]$
0.0	<u>2.0000</u>			
		<u>0.8663</u>		
0.3	2.2599		−<u>0.2950</u>	
		0.6598		<u>0.2786</u>
0.7	2.5238		−0.0164	
		0.6483		
1.0	2.7183			

Như vậy giá trị gần đúng của hàm tại $x = 0.12$ được tính

$$\begin{aligned} y(0.12) &\approx N_3^{(1)}(0.12) = \\ &= 2.0000 + 0.8663(0.12) + 0.2950(0.12)(0.18) + \\ &+ 0.2786(0.12)(0.18)(0.58) \\ &\approx 2.1138 \end{aligned}$$

Ta có các thuật toán nội suy Newton tiến và lùi như sau.

```
def div_diff_tab(x, y):
    n = len(x)
    Q = np.zeros((n, n), dtype=float)
    for i in range(n):
        Q[i, 0] = y[i]
    for j in range(1, n):
        for i in range(j, n):
            Q[i,j]=(Q[i,j-1]-Q[i-1,j-1])/(x[i]-x[i-j])
    return Q

def newton_forward(x, y, x0):
    n = len(x)
    Q = div_diff_tab(x, y)
    y0 = 0.0
    for i in range(n):
        y1 = 1.0
        for j in range(i):
            y1 *= (x0 - x[j])
        y0 += Q[i, i] * y1
    return y0

def newton_backward(x, y, x0):
    n = len(x)
    Q = div_diff_tab(x, y)
    y0 = 0.0
    for i in range(n):
        y1 = 1.0
        for j in range(i):
            y1 *= (x0 - x[n-j-1])
        y0 += Q[n-1, i] * y1
    return y0
```

Tương tự như trường hợp của công thức nội suy Lagrange, chúng ta xét trường hợp các điểm nút cách đều với bước h. Muốn thế ta đưa vào khái niệm sau. Đại lượng $\Delta y_k = y_{k+1} - y_k$ được gọi là sai phân hữu hạn cấp 1 của hàm tại điểm x_k. Tương tự ta có thể định nghĩa sai phân hữu hạn cấp p của hàm tại điểm x_k như sau $\Delta^p y_k = \Delta(\Delta^{p-1} y_k)$.

Ta có thể dễ dàng chứng minh bằng quy nạp công thức sau, thể hiện mối quan hệ giữa khái niệm tỷ sai phân và sai phân hữu hạn:

$$f[x_k, x_{k+1}, \ldots, x_{k+p}] = \frac{\Delta^p y_k}{p!h^p}$$

Khi đó các công thức (3.9) và (3.11) sẽ có dạng

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_n^{(1)}(x) &= y_0 + \frac{\Delta y_0}{1!}q + \frac{\Delta^2 y_0}{2!}q(q-1) + \cdots + \\ &+ \frac{\Delta^n y_0}{n!}q(q-1)\ldots(q-n+1), \qquad q = \frac{x-x_0}{h} \end{aligned} \tag{3.11}$$

và

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_n^{(2)}(x) &= y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{1!}p + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!}p(p+1) + \cdots + \\ &+ \frac{\Delta^n y_0}{n!}p(p+1)\ldots(p+n-1), \qquad p = \frac{x-x_n}{h} \end{aligned} \tag{3.12}$$

Ví dụ 3.7: Sử dụng bảng giá trị của hàm sin lượng giác với bước $h = 5^o$, tính gần đúng giá trị của $\sin 32^o$. Ta có bảng sai phân

x_k	$f(x_k)$	Δ	Δ^2	Δ^3
30^o	0.5000	0.0736	−0.0044	−0.0005
35^o	0.5736	0.0692	−0.0049	
40^o	0.6428	0.0643		
45^o	0.7071			

và $q = \dfrac{32-30}{5} = 0.4$. Khi đó theo công thức (3.11) ta được

$$\begin{aligned} \sin 32^o &\approx 0.5 + 0.0736(0.4) - 0.0044(0.4)(-0.6) - \\ &- 0.0005(0.4)(-0.6)(-1.6) \\ &= 0.530304 \end{aligned}$$

§3.3 ĐA THỨC NỘI SUY HERMITE

Cho bảng số (3.1) của hàm khả vi $f(x)$ trên $[x_0, x_n]$. Đa thức nội suy Hermite, ký hiệu $H_{2n+1}(x)$, là đa thức thoả mãn các điều kiện:

(i) $\deg H_{2n+1}(x) \leqslant 2n+1$

(ii) $H_{2n+1}(x_k) = f(x_k),\ k = 0, 1, \ldots, n$

(iii) $H'_{2n+1}(x_k) = f'(x_k),\ k = 0, 1, \ldots, n$

Có thể kiểm tra rằng đa thức sau đây thoả các điều kiện trên:

$$\begin{aligned} H_{2n+1}(x) &= \sum_{k=0}^{n} \left\{ f(x_k)\left[1 - \frac{\omega''(x_k)}{\omega'(x_k)}(x - x_k)\right] + f'(x_k)(x - x_k) \right\} \times \\ &\times \left\{ \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} \right\}^2 \end{aligned} \tag{3.13}$$

với đa thức $\omega(x)$ được xác định theo công thức (3.3).

Ví dụ 3.8: Xây dựng đa thức nội suy Hermite trong đoạn $[0, 1]$ thoả các điều kiện: $f(0) = 0,\ f(1) = 1,\ f'(0) = 0,\ f'(1) = 0$.

Ta có bảng số:

x	0	1
y	0	1
y'	0	0

. Nên

$$n = 1,\ \omega(x) = x(x-1) = x^2 - x \Rightarrow \omega'(x) = 2x - 1,\ \omega''(x) = 2$$

Vậy

$$H_3(x) = [1 - 2(x-1)]\left[\frac{x^2 - x}{x - 1}\right]^2 = -2x^3 + 3x^2$$

Chúng ta cũng có thể xây dựng đa thức nội suy Hermite theo phương pháp xây dựng đa thức nội suy Newton bằng cách lập bảng tỷ sai phân. Cụ thể như sau. Ta định nghĩa một dãy mới $z_0, z_1, \ldots, z_{2n+1}$ thoả $z_{2k} = z_{2k+1} = x_k$ với $k = 0, 1, \ldots, n$. Để tính tỷ sai phân cấp một, ta chia làm hai trường hợp. Đối với đoạn $[z_{2k+1}, z_{2k+2}]$ thì

$$f[z_{2k+1}, z_{2k+2}] = \frac{f[z_{2k+2}] - f[z_{2k+1}]}{z_{2k+2} - z_{2k+1}}$$

Còn đối với đoạn $[z_{2k}, z_{2k+1}]$, vì $z_{2k} = z_{2k+1} = x_k$ với mọi k nên ta thay thế

$$f[z_{2k}, z_{2k+1}] = f'(x_k),\ k = 0, 1, \ldots, n$$

Sau đó các phần tử khác của bảng tỷ sai phân được tiếp tục tính như trong phương pháp Newton. Khi đó đa thức nội suy Hermite có dạng:

$$H_{2n+1}(x) = f[z_0] + \sum_{k=1}^{2n+1} f[z_0, \ldots, z_k](x - z_0)(x - z_1)\ldots(x - z_{k-1}) \tag{3.14}$$

Ví dụ 3.9: Xây dựng đa thức Hermite nội suy bảng số:

x	0	1	2
y	1	2	4
y'	0	1	0

Ta lập bảng tỷ sai phân

$$
\begin{array}{ccccccc}
\hline
0 & 1 & & & & & \\
 & & 0 & & & & \\
0 & 1 & & 1 & & & \\
 & & 1 & & -1 & & \\
1 & 2 & & 0 & & 3/4 & \\
 & & 1 & & 1/2 & & -5/4 \\
1 & 2 & & 1 & & -7/4 & \\
 & & 2 & & -3 & & \\
2 & 4 & & -2 & & & \\
 & & 0 & & & & \\
2 & 4 & & & & & \\
\hline
\end{array}
$$

Vậy đa thức Hermite có dạng

$$
\begin{aligned}
H_5(x) &= 1 + 0(x-0) + 1(x-0)^2 - 1(x-0)^2(x-1) + \\
&+ \frac{3}{4}(x-0)^2(x-1)^2 - \frac{5}{4}(x-0)^2(x-1)^2(x-2) = \\
&= 1 + \frac{21}{4}x^2 - \frac{35}{4}x^3 + \frac{23}{4}x^4 - \frac{5}{4}x^5
\end{aligned}
$$

Thuật toán Hermite thể hiện qua chương trình sau

$$P, y0 = hermite(x, y, y1, x0)$$

với x là dãy các đối số, y và $y1$ là dãy các giá trị của hàm và đạo hàm, $x0$ là giá trị của đối số mà tại đó cần tính giá trị của hàm. Hàm trả về mảng đa thức P và giá trị xấp xỉ $y0$ của hàm. Chú ý rằng P là đa thức như trong công thức (3.14). Nghĩa là

$$
\begin{aligned}
H(x) &= p_0 + p_1(x-x_0) + p_2(x-x_0)^2 + p_3(x-x_0)^2(x-x_1) + \ldots \\
&+ p_{2n-1}(x-x_0)^2(x-x_1)^2 \ldots (x-x_{n-1})^2(x-x_n)
\end{aligned}
$$

```
def hermite(x, y, y1, x0=None):
    n = len(x)
    z = np.zeros(2 * n, dtype=float)
    Q = np.zeros((2 * n, 2 * n), dtype=float)
    for i in range(n):
        z[2 * i] = x[i]
        z[2 * i + 1] = x[i]
        Q[2 * i, 0] = y[i]
        Q[2 * i + 1, 0] = y[i]
        Q[2 * i + 1, 1] = y1[i]
        if i != 0:
            Q[2*i,1] = (Q[2*i,0] - Q[2*i-1,0])
                / (z[2*i] - z[2*i-1])
    for j in range(2, 2 * n):
        for i in range(j, 2 * n):
            Q[i,j] = (Q[i,j-1] - Q[i-1,j-1])
                / (z[i] - z[i-j])
    P = np.zeros(2 * n, dtype=float)
    for i in range(2 * n):
        P[i] = Q[i, i]
    if x0 == None:
        y0 = None
    else:
        y0 = 0.0
        for i in range(2 * n):
            y00 = 1.0
            for j in range(i):
                y00 *= (x0 - z[j])
            y0 += P[i] * y00
    return P, y0
```

§3.4 SPLINE BẬC BA

Việc xây dựng một đa thức đi qua các điểm nội suy cho trước trong trường hợp n lớn là rất khó khăn và khó ứng dụng. Một trong những cách khắc phục là trên từng đoạn liên tiếp của các cặp điểm nút nội suy ta nối chúng lại bởi các đường cong đơn giản như đoạn thẳng chẳng hạn. Tuy nhiên, khi đó tại các điểm nút hàm sẽ mất tính khả

vi. Do đó, người ta cố gắng xây dựng một đường cong bằng cách nối các đoạn cong nhỏ lại với nhau sao cho vẫn bảo toàn tính khả vi của hàm. Đường cong như vậy được gọi là đường *spline* (đường ghép trơn). Các hàm trên các đoạn nhỏ thông thường là các đa thức và bậc cao nhất của các đa thức đó là bậc của spline. Trong phần này chúng ta sẽ chỉ xét công thức nội suy spline bậc ba.

Cho hàm $f(x)$ xác định trên đoạn $[a, b]$ và một phép phân hoạch của nó: $a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$. Đặt $y_k = f(x_k)$, $k = 0, 1, \ldots, n$. Một spline bậc ba nội suy hàm $f(x)$ trên $[a, b]$ là hàm $S(x)$ thoả các điều kiện sau:

(i) $S(x)$ có đạo hàm đến cấp hai liên tục trên đoạn $[a, b]$.

(ii) Trên $[x_k, x_{k+1}]$, $k = 0, 1, \ldots, n-1$, $S(x) = S_k(x)$ là một đa thức bậc ba.

(iii) $S(x_k) = f(x_k) = y_k$, $\forall k = 0, 1, \ldots, n$.

Dựa trên định nghĩa này, ta đi tìm công thức xác định spline bậc ba. Xét đoạn $[x_k, x_{k+1}]$ với $k = 0, 1, \ldots, n-1$. Đặt $h_k = x_{k+1} - x_k$. Vì $S_k(x)$ là đa thức bậc ba, nên ta viết nó dưới dạng:

$$S_k(x) = a_k + b_k(x - x_k) + c_k(x - x_k)^2 + d_k(x - x_k)^3 \tag{3.15}$$

Từ điều kiện (3.4), ta thấy ngay: $a_k = S(x_k) = S_k(x_k) = y_k$ và

$$a_k + b_k h_k + c_k h_k^2 + d_k h_k^3 = S(x_{k+1}) = S_k(x_{k+1}) = y_{k+1}$$

Từ đây ta được

$$\begin{cases} b_k = \dfrac{y_{k+1} - y_k}{h_k} - c_k h_k - d_k h_k^2, \ \forall k = 0, 1, \ldots, n-1 \\ b_{k-1} = \dfrac{y_k - y_{k-1}}{h_{k-1}} - c_{k-1} h_{k-1} - d_{k-1} h_{k-1}^2, \ \forall k = 1, \ldots, n \end{cases} \tag{3.16}$$

trong đó phương trình thứ hai thu được từ phương trình thứ nhất bằng cách giảm chỉ số xuống một đơn vị.

Xét tại điểm x_k với $k = 1, 2, \ldots, n-1$. Dc tính khả vi của hàm đến cấp hai theo tại x_k ta có $S'_{k-1}(x_k) = S'_k(x_k)$ và $S''_{k-1}(x_k) = S''_k(x_k)$. Từ điều kiện $S''_{k-1}(x_k) = S''_k(x_k)$ ta thu được:

$$\begin{cases} d_k = \dfrac{c_{k+1} - c_k}{3h_k}, \\ d_{k-1} = \dfrac{c_k - c_{k-1}}{3h_{k-1}} \end{cases} \forall k = 1, 2, \ldots, n-1 \tag{3.17}$$

Thay (3.17) vào (3.16) ta được

$$\begin{cases} b_k = \dfrac{y_{k+1} - y_k}{h_k} - \dfrac{h_k}{3}(c_{k+1} + 2c_k), \\ b_{k-1} = \dfrac{y_k - y_{k-1}}{h_{k-1}} - \dfrac{h_{k-1}}{3}(c_k + 2c_{k-1}) \end{cases} \forall k = 1, 2, \ldots, n-1 \tag{3.18}$$

Từ điều kiện $S'_{k-1}(x_k) = S'_k(x_k)$ ta có

$$b_k = b_{k-1} + 2c_{k-1}h_{k-1} + 3d_{k-1}h_{k-1}^2$$

Thay các đại lượng đã biết trong (3.17) và (3.18) vào biểu thức trên ta được hệ phương trình dùng để xác định các hệ số c_k:

$$\begin{cases} h_{k-1}c_{k-1} + 2(h_{k-1} + h_k)c_k + h_k c_{k+1} = 3\dfrac{y_{k+1} - y_k}{h_k} - 3\dfrac{y_k - y_{k-1}}{h_{k-1}}, \\ \forall k = 1, 2, \ldots, n-1 \end{cases} \tag{3.19}$$

Hệ phương trình (3.19) dùng để xác định các hệ số c_k với $k = 0, 1, \ldots, n$. Khi đó từ các công thức (3.18), (3.17) và $a_k = y_k$ ta có thể xác định tất cả các hệ số của đa thức $S_k(x)$. Nói chung, hệ phương trình (3.19) có vô số nghiệm. Vì vậy, để có tính duy nhất, ta phải bổ sung thêm một số điều kiện, và thông thường các điều kiện đó là các điều kiện biên.

3.4.1 SPLINE BẬC BA TỰ NHIÊN

Điều kiện để xác định một spline bậc ba tự nhiên là: $S''(a) = S''(b) = 0$. Từ đây ta thu được $c_0 = c_n = 0$. Khi đó hệ phương trình (3.19) chỉ còn lại $n-1$ phương trình với $n-1$ ẩn là $c_1, c_2, \ldots, c_{n-1}$. Thuật toán xác định spline bậc ba tự nhiên bắt đầu bằng việc giải hệ $AC = B$ với A là ma trận có dạng

$$A = \begin{bmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 & \ldots & 0 \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & \ldots & 0 \\ 0 & h_2 & 2(h_2 + h_3) & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) \end{bmatrix}$$

và

$$B = \begin{bmatrix} 3\dfrac{y_2 - y_1}{h_1} - 3\dfrac{y_1 - y_0}{h_0} \\ 3\dfrac{y_3 - y_2}{h_2} - 3\dfrac{y_2 - y_1}{h_1} \\ \dots\dots\dots \\ 3\dfrac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} - 3\dfrac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-2}} \end{bmatrix}$$

còn $C = (c_1, c_2, \dots, c_{n-1})^T$ là véc-tơ nghiệm. Sau khi tìm được tất cả các giá trị của $c_0, c_1, c_2, \dots, c_{n-1}, c_n$, các hệ số khác của $S_k(x)$ được xác định bởi:

$$\begin{cases} a_k = y_k, \\ b_k = \dfrac{y_{k+1} - y_k}{h_k} - \dfrac{h_k}{3}(c_{k+1} + 2c_k), \quad \forall k = 0, 1, 2, \dots, n-1 \\ d_k = \dfrac{c_{k+1} - c_k}{3h_k} \end{cases} \tag{3.20}$$

Ví dụ 3.10: Xây dựng spline bậc ba tự nhiên nội suy bảng số:

x	0	2	5
y	1	1	4

. Ta có $n = 2$, $h_0 = 2$, $h_1 = 3$. Do là spline tự nhiên nên $c_0 = c_2 = 0$. Hệ số c_1 còn lại được xác định từ phương trình

$$2(h_0 + h_1)c_1 = 3\frac{y_2 - y_1}{h_1} - 3\frac{y_1 - y_0}{h_0} \Rightarrow c_1 = \frac{3}{10}$$

Khi đó từ (3.20) ta được:

Với $k = 0: \ a_0 = 1, \ b_0 = -\dfrac{1}{5}, \ d_0 = \dfrac{1}{20}$

Với $k = 1: \ a_1 = 1, \ b_1 = \dfrac{2}{5}, \ d_1 = -\dfrac{1}{30}$

Vậy spline cần tìm có dạng

$$S(x) = \begin{cases} 1 - \dfrac{1}{5}x + \dfrac{1}{20}x^3, & x \in [0, 2] \\ 1 + \dfrac{2}{5}(x-2) + \dfrac{3}{10}(x-2)^2 - \dfrac{1}{30}(x-2)^3, & x \in [2, 5] \end{cases}$$

Ví dụ 3.11: Xây dựng spline bậc ba tự nhiên nội suy bảng số của hàm $y = e^x$:

x	0	1	2	3
y	1	e	e^2	e^3

.

Ta có $n = 3,\ h_0 = h_1 = h_2 = 1,\ c_0 = c_3 = 0$. Các hệ số c_1 và c_2 được xác định từ hệ phương trình:

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3(\mathrm{e}-1)^2 \\ 3\,\mathrm{e}(\mathrm{e}-1)^2 \end{bmatrix}$$

$$\Longrightarrow c_1 = \frac{(\mathrm{e}-1)^2}{5}(4-\mathrm{e}) \approx 0.757,\ c_2 = \frac{(\mathrm{e}-1)^2}{5}(4\,\mathrm{e}-1) \approx 5.830$$

Do đó: $a_0 = 1,\ b_0 = 1.466,\ d_0 = 0.252;\ a_1 = 2.718,\ b_1 = 2.223,\ d_1 = 1.691;\ a_2 = 7.389,\ b_2 = 8.810,\ d_2 = -1.943$. Và spline cần tìm có dạng:

$$S(x) = \begin{cases} 1 + 1.466x + 0.252x^3, & x \in [0,1] \\ 2.718 + 2.223(x-1) + 0.757(x-1)^2 + 1.691(x-1)^3, & x \in [1,2] \\ 7.389 + 8.810(x-2) + 5.830(x-2)^2 - 1.943(x-2)^3, & x \in [2,3] \end{cases}$$

3.4.2 SPLINE BẬC BA RÀNG BUỘC

Điều kiện để xác định spline bậc ba ràng buộc là: $S'(a) = \alpha,\ S'(b) = \beta$. Từ đây ta có thêm hai phương trình:

$$\begin{cases} 2h_0c_0 + h_0c_1 = 3\dfrac{y_1 - y_0}{h_0} - 3\alpha \\ h_{n-1}c_{n-1} + 2h_{n-1}c_n = 3\beta - 3\dfrac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} \end{cases}$$

bổ sung vào hệ (3.19) và ta thu được hệ phương trình đại số tuyến tính $AC = B$ gồm $n+1$ phương trình ứng với $n+1$ ẩn là $c_0, c_1, \ldots, c_n$.

Ma trận A và véc-tơ B có dạng:

$$A = \begin{bmatrix} 2h_0 & h_0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ h_0 & 2(h_0+h_1) & h_1 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & h_1 & 2(h_1+h_2) & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & h_{n-1} & 2h_{n-1} \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} 3\dfrac{y_1 - y_0}{h_0} - 3\alpha \\ 3\dfrac{y_2 - y_1}{h_1} - 3\dfrac{y_1 - y_0}{h_0} \\ \dots\dots\dots \\ 3\dfrac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} - 3\dfrac{y_{n-1} - y_{n-2}}{h_{n-2}} \\ 3\beta - 3\dfrac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} \end{bmatrix}$$

Sau khi tìm được các hệ số c_k, các hệ số a_k,b_k và d_k cũng xác định theo công thức (3.20) tương tự như trường hợp của spline bậc ba tự nhiên.

Ví dụ 3.12: Xây dựng spline bậc ba ràng buộc nội suy bảng số: $\begin{array}{c|cc} x & 0 & 1 \\ \hline y & 1 & 1 \end{array}$, thoả điều kiện $y'(0) = 1$, $y'(1) = 1$. Ta có $n = 1, h_0 = 1$. Từ đây ta được $c_0 = -3, c_1 = 3$. Do đó $a_0 = 1$, $b_0 = 1, d_0 = 2$. Spline cần tìm có dạng: $S(x) = 1 + x - 3x^2 + 2x^3$ với $x \in [0, 1]$.

Ví dụ 3.13: Xây dựng spline bậc ba ràng buộc nội suy bảng số: $\begin{array}{c|ccc} x & 0 & 1 & 2 \\ \hline y & 1 & 2 & 1 \end{array}$ thoả điều kiện $y'(0) = 0$, $y'(2) = 0$. Ta có $n = 2$, $h_0 = h_1 = 1$, $\alpha = \beta = 0$, do đó hệ phương trình xác định c_0, c_1, c_2 có dạng:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -6 \\ 3 \end{bmatrix} \Longrightarrow c_0 = 3,\ c_1 = -3,\ c_2 = 3$$

Vậy: $a_0 = 1$, $b_0 = 0$, $d_0 = -2$; $a_1 = 2$, $b_1 = 0$, $d_1 = 2$ và spline cần tìm có dạng

$$S(x) = \begin{cases} 1 + 3x^2 - 2x^3, & 0 \leqslant x \leqslant 1 \\ 2 - 3(x-1)^2 + 2(x-1)^3, & 1 \leqslant x \leqslant 2 \end{cases}$$

Thuật toán tìm spline bậc ba thể hiện qua chương trình sau.

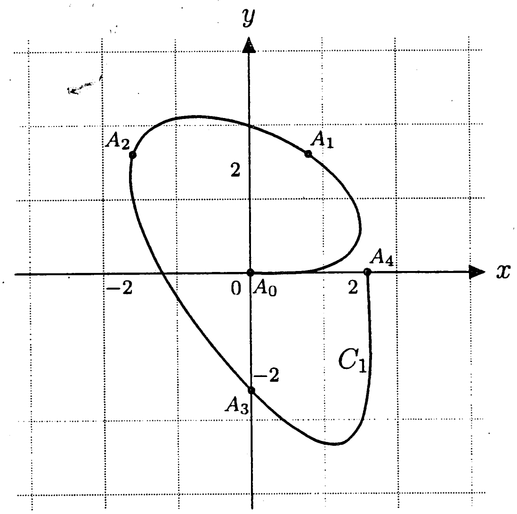
$$S = spline(x, y, al = None, be = None)$$

Hàm nhận các đối số là hai mảng x, y. Nếu không có các giá trị $al = y'(x_0)$, $be = y'(x_n)$ thì tìm spline tự nhiên. Ngược lại là tìm spline ràng buộc. Hàm trả về mảng các đa thức bậc ba theo công thức (3.15).

```
def spline(x, y, al=None, be=None):
    n = len(x)
    h = np.zeros(n - 1, dtype=float)
    for i in range(n - 1):
        h[i] = x[i + 1] - x[i]
    A = np.zeros((n, n), dtype=float)
    B = np.zeros(n, dtype=float)
    if al is None and be is None: # Natural Spline
        A[0, 0] = 1.0
    else:  # Claimed Spline
        A[0, 0] = 2 * h[0]; A[0, 1] = h[0]
        B[0] = 3 * (y[1] - y[0]) / h[0] - 3 * al
    for i in range(1, n - 1):
        A[i, i] = 2 * (h[i - 1] + h[i])
        A[i, i - 1] = h[i - 1]
        A[i, i + 1] = h[i]
        B[i]=(3 * (y[i+1] - y[i]) / h[i]
            - 3 * (y[i] - y[i-1]) / h[i-1])
    if al is None and be is None: # Natural Spline
        A[n - 1, n - 1] = 1.0
    else: # Claimed Cubic Spline
        A[n - 1, n - 1] = 2 * h[n - 2]
        A[n - 1, n - 2] = h[n - 2]
        B[n - 1] = (3*be-3*(y[n-1]-y[n-2])/h[n-2])
    c = tri_diag(A, B)
    a = np.zeros(n - 1, dtype=float)
    b = np.zeros(n - 1, dtype=float)
    d = np.zeros(n - 1, dtype=float)
    for k in range(n - 1):
        a[k]=y[k]
        b[k]=(y[k+1] - y[k]) / h[k]
            - (h[k] / 3) * (c[k+1] + 2*c[k])
        d[k]=(c[k + 1] - c[k]) / 3.0 / h[k]
    S = np.zeros((n - 1, 4), dtype=float)
    for k in range(n - 1):
        S[k] = np.array((a[k], b[k], c[k], d[k]),
            dtype=float)
    return S
```

§3.5 ĐƯỜNG CONG THAM SỐ

Đường cong C_1, đi qua các điểm $A_0(0,0)$, $A_1(1,2)$, $A_2(-2,2)$, $A_3(0,-2)$ và $A_4(2,0)$, trong Hình 3.3 bên dưới, không thể là đồ thị của một hàm một biến nào đó, mà chỉ có thể biểu diễn dưới dạng tham số. Do đó, trong phần này ta chỉ xấp xỉ đường cong cho dưới dạng tham số: $x = x(t)$, $y = y(t)$ với t là tham số nhận giá trị trong đoạn $[0,1]$.



Hình 3.3: *Đường cong tham số*

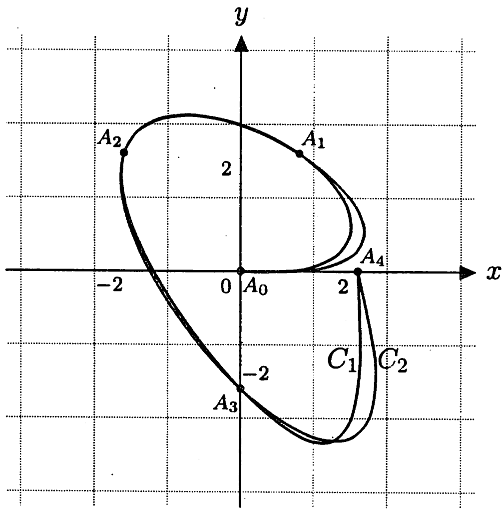
Xét một phân hoạch của đoạn $[0,1]$: $0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_n = 1$. Đặt $x_k = x(t_k)$, $y_k = y(t_k)$ với $k = 0,1,\ldots,n$. Ta xây dựng hai đa thức xấp xỉ $P_n^{(x)}(t)$ và $P_n^{(y)}(t)$ thoả các điều kiện $P_n^{(x)}(t_k) = x_k$, $P_n^{(y)}(t_k) = y_k$ với $k = 0,1,\ldots,n$. Lấy ví dụ như đường cong trong hình vẽ trên được cho bởi bảng sau

t_k	0	0.25	0.5	0.75	1
x_k	0	1	−2	0	2
y_k	0	2	2	−2	0

Nếu dùng đa thức nội suy Lagrange để xấp xỉ $x(t)$ và $y(t)$ ta thu được

$$\begin{aligned} x(t) &\approx L_4^{(x)}(t) = -\frac{448}{3}t^4 + 320t^3 - \frac{620}{3}t^2 + 38t \\ y(t) &\approx L_4^{(y)}(t) = 128t^4 - \frac{640}{3}t^3 + 88t^2 - \frac{8}{3}t \end{aligned}$$

Kết quả như trong Hình 3.4. Ta thấy đường cong C_2 xấp xỉ khá tốt đường cong ban đầu C_1. Để cho kết quả chính xác hơn, ta phải chia $[0, 1]$ thành nhiều điểm hơn và khi đó khối lượng tính toán sẽ nhiều hơn.



Hình 3.4: *Xấp xỉ đường cong tham số*

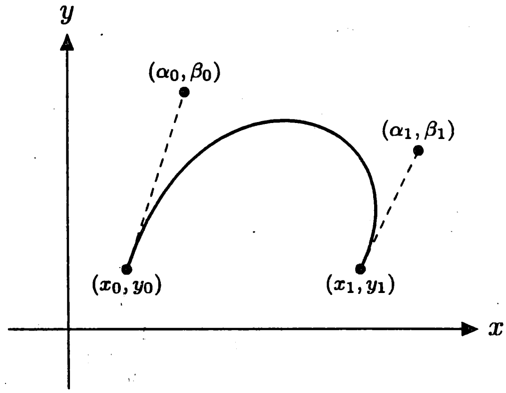
Một hướng khác để giải quyết bài toán xấp xỉ đường cong tham số là sử dụng các đa thức nội suy Hermite hoặc spline bậc ba. Do nhu cầu của ứng dụng, nhất là trong ngành đồ hoạ máy tính, cần xây dựng các đường cong trơn sao cho nó có thể thay đổi dễ dàng và nhanh chóng. Và người ta chọn đa thức Hermite bậc ba cho mục đích này. Đường cong như vậy được gọi là đường cong Bezier.

Ta biết rằng đa thức Hermite bậc ba được hoàn toàn xác định nếu biết hai điểm nút và đạo hàm của nó tại hai điểm nút đó. Giả sử đường cong Bezier được xác định bởi

$$\begin{cases} x(t) = at^3 + bt^2 + ct + d \\ y(t) = pt^3 + qt^2 + rt + s \end{cases} \quad t \in [0, 1] \tag{3.21}$$

với hai điểm nút (x_0, y_0) ứng với $t = 0$, (x_1, y_1) ứng với $t = 1$ và hai điểm kiểm soát (α_0, β_0), (α_1, β_1) (Hình 3.5).

Tám hệ số của $x(t)$ và $y(t)$ trong (3.21) được xác định theo các điều kiện: $(x(0), y(0)) = (x_0, y_0)$, $(x(1), y(1)) = (x_1, y_1)$ và các đạo hàm tại hai



Hình 3.5: Đường cong Bezier

điểm nút $\left.\frac{dy}{dx}\right|_{t=0} = \frac{y'(0)}{x'(0)}, \left.\frac{dy}{dx}\right|_{t=1} = \frac{y'(1)}{x'(1)}$. Như vậy ta có sáu điều kiện để đi tìm tám ẩn. Có nhiều cách để thêm hai điều kiện. Ta chọn bổ sung theo hướng sau: đường cong Bezier đi ngang qua trung điểm của hai điểm kiểm soát tại thời điểm $t = \frac{1}{2}$, nghĩa là

$$x\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\alpha_0 + \alpha_1}{2}, \quad y\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\beta_0 + \beta_1}{2}$$

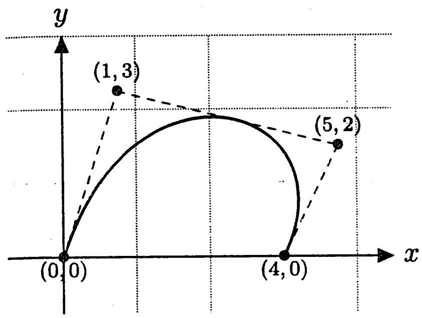
Bằng một vài phép toán đơn giản, ta thu được $d = x_0$, $s = y_0$ và các hệ số còn lại là nghiệm của hệ phương trình $AX = B$ với

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & \beta_0 - y_0 & 0 & 0 & x_0 - \alpha_0 \\ 3(\beta_1 - y_1) & 2(\beta_1 - y_1) & \beta_1 - y_1 & 3(x_1 - \alpha_1) & 2(x_1 - \alpha_1) & x_1 - \alpha_1 \end{bmatrix}$$

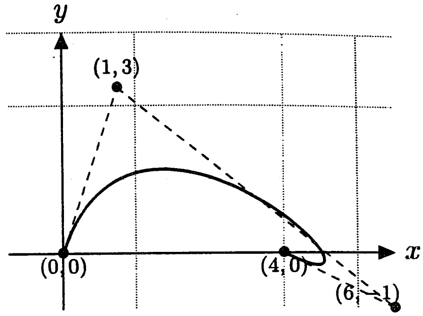
và

$$X = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ p \\ q \\ r \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} x_1 - x_0 \\ 4(\alpha_0 + \alpha_1) - 8x_0 \\ y_1 - y_0 \\ 4(\beta_0 + \beta_1) - 8y_0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

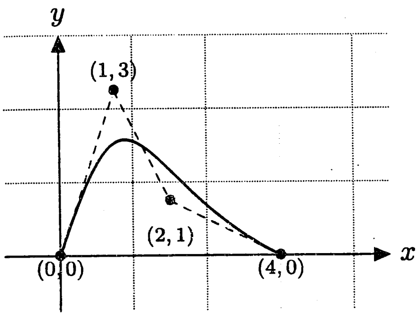
Sau đây là một số trường hợp của đường cong Bezier khi thay đổi điểm kiểm soát thứ hai.



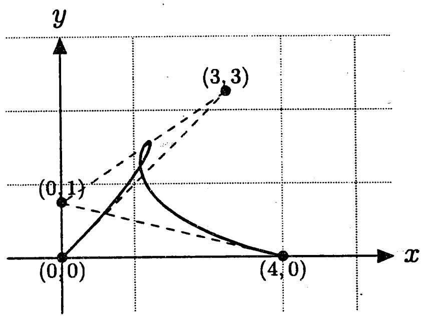
$$\begin{cases} x(t) = -8t^3 + 8t^2 + 4t \\ y(t) = 4t^3 - 16t^2 + 12t \end{cases}$$



$$\begin{cases} x(t) = -12t^3 + 12t^2 + 4t \\ y(t) = 16t^3 - 28t^2 + 12t \end{cases}$$



$$\begin{cases} x(t) = 4t^3 - 4t^2 + 4t \\ y(t) = 8t^3 - 20t^2 + 12t \end{cases}$$



$$\begin{cases} x(t) = 20t^3 - 28t^2 + 12t \\ y(t) = 8t^3 - 20t^2 + 12t \end{cases}$$

Thuật toán xây dựng đường cong tham số Bezier được thể hiện qua chương trình sau.

$$X, Y = bezier(x, y)$$

trong đó hai điểm nút có toạ độ $(x[0], y[0])$ (ứng với $t = 0$) và $(x[3], y[3])$ (ứng với $t = 1$). Hai điểm kiểm soát là $(\alpha_0, \beta_0) = (x[1], y[1])$ và $(\alpha_1, \beta_1) = (x[2], y[2])$ (Hình 3.5). Hàm trả về hai đa thức bậc ba phụ thuộc vào tham số t theo công thức (3.21).

```
def bezier(X, Y):
    A = np.array([
        [1.0, 1.0, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0],
        [0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 1.0, 1.0],
        [1.0, 2.0, 4.0, 0.0, 0.0, 0.0],
        [0.0, 0.0, 0.0, 1.0, 2.0, 4.0],
```

```
        [3.0 * (Y[2] - Y[3]), 2.0 * (Y[2] - Y[3]),
        Y[2] - Y[3], 3 * (X[3] - X[2]),
        2 * (X[3] - X[2]), X[3] - X[2]],
        [0.0, 0.0, Y[1] - Y[0], 0.0, 0.0,
        -(X[1] - X[0])]], dtype=float)
    B = np.array([X[3] - X[0], Y[3] - Y[0],
        4 * (X[1] + X[2]) - 8 * X[0],
        4 * (Y[1] + Y[2]) - 8 * Y[0], 0.0, 0.0],
        dtype=float)
    Z = jordan(A, B)
    XX = np.array([Z[0], Z[1], Z[2], X[0]],
        dtype=float)
    YY = np.array([Z[3], Z[4], Z[5], Y[0]],
        dtype=float)
    return XX, YY
```

§3.6 BÀI TOÁN XẤP XỈ HÀM THỰC NGHIỆM

Trong mặt phẳng xOy cho tập các điểm $\{M_k(x_k, y_k)\}_{k=1}^n$, trong đó có ít nhất hai điểm nút x_i và x_j khác nhau với $i \neq j$ và n là rất lớn. Khi đó, việc xây dựng một đường cong đi qua tất cả những điểm đã cho không có ý nghĩa thực tế. Thay vào đó chúng ta sẽ tìm một hàm $f(x)$ đơn giản sao cho nó thể hiện tốt nhất dáng điệu của tập điểm $\{M_k(x_k, y_k)\}_{k=1}^n$ và không nhất thiết đi ngang qua các điểm đó. Có nhiều phương pháp để giải quyết vấn đề trên, và một trong những phương pháp như vậy là phương pháp bình phương bé nhất. Nội dung của phương pháp là tìm cực tiểu của phiếm hàm:

$$g(f) = \sum_{k=1}^{n} [f(x_k) - y_k]^2 \longrightarrow \min \tag{3.22}$$

Dạng của hàm cần xác định $f(x)$ phụ thuộc vào nhiều yếu tố. Tuy nhiên, các dạng đơn giản nhất thường gặp trong thực tế là: $f(x) = A + Bx$, $f(x) = A + Bx + Cx^2$, $f(x) = A\cos x + B\sin x$, $f(x) = A\mathrm{e}^{Bx}$, $f(x) = Ax^B$, ... Nghĩa là để xác định $f(x)$ ta cần xác định các hệ số $A, B, C, \dots$ từ điều kiện (3.22). Để minh họa cho phương pháp, ta xét trường hợp thường gặp sau đây với $f(x) = Ap(x) + Bq(x)$. Khi đó phương trình (3.22) có dạng:

$$g(A,B) = \sum_{k=1}^{n}(Ap_k + Bq_k - y_k)^2 \longrightarrow \min$$

với $p_k = p(x_k)$, $q_k = q(x_k)$.

Bài toán quy về việc tìm cực tiểu của hàm hai biến $g(A,B)$. Toạ độ điểm dừng của hàm được xác định từ hệ phương trình

$$\begin{cases} \dfrac{\partial g}{\partial A} = 2\sum\limits_{k=1}^{n}(Ap_k + Bq_k - y_k)p_k = 0 \\ \dfrac{\partial g}{\partial B} = 2\sum\limits_{k=1}^{n}(Ap_k + Bq_k - y_k)q_k = 0 \end{cases}$$

Sau khi đơn giản, ta thu được hệ phương trình với hai ẩn A và B.

$$\begin{cases} \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_k^2\right)A + \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_kq_k\right)B = \sum\limits_{k=1}^{n} p_ky_k \\ \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_kq_k\right)A + \left(\sum\limits_{k=1}^{n} q_k^2\right)B = \sum\limits_{k=1}^{n} q_ky_k \end{cases} \quad (3.23)$$

Theo giả thiết của bài toán và bất đẳng thức Cauchy, ta có định thức của ma trận hệ số luôn khác không, nên hệ phương trình (3.23) lúc nào cũng nghiệm duy nhất A và B. Đó là các hệ số cần tìm.

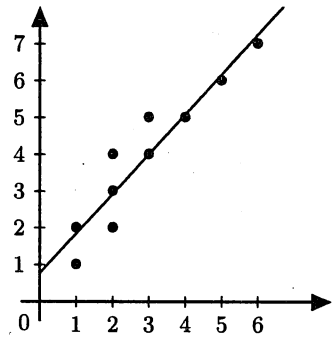
Ví dụ 3.14: Tìm hàm $f(x) = A + Bx$ xấp xỉ tốt nhất bảng số:

x	1	1	2	2	2	3	3	4	5	6
y	1	2	2	3	4	4	5	5	6	7

Ta có $n = 10$, $p(x) = 1$, $q(x) = x$. Để thiết lập hệ phương trình (3.23), ta có các tổng sau: $\sum\limits_{k=1}^{n} x_k = 29$, $\sum\limits_{k=1}^{n} y_k = 39$, $\sum\limits_{k=1}^{n} x_k^2 = 109$ và $\sum\limits_{k=1}^{n} x_ky_k = 140$. Khi ấy hệ phương trình xác định A và B có dạng:

$$\begin{cases} 10A + 29B = 39 \\ 29A + 109B = 140 \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} A = 0.7671 \\ B = 1.0803 \end{cases}$$

Do đó đường thẳng cần tìm là: $f(x) = 0.7671 + 1.0803x$.



Tổng quát, nếu $f(x) = \sum_{k=1}^{m} A_k p_k(x)$, thì ta có hệ phương trình dùng để xác định các hệ số $A_1, A_2, \ldots, A_m$ như sau:

$$\begin{cases} \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_{1k}^2\right) A_1 + \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_{1k}p_{2k}\right) A_2 + \cdots + \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_{1k}p_{mk}\right) A_m = \sum\limits_{k=1}^{n} y_k p_{1k} \\ \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_{2k}p_{1k}\right) A_1 + \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_{2k}^2\right) A_2 + \cdots + \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_{2k}p_{mk}\right) A_m = \sum\limits_{k=1}^{n} y_k p_{2k} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_{mk}p_{1k}\right) A_1 + \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_{mk}p_{2k}\right) A_2 + \cdots + \left(\sum\limits_{k=1}^{n} p_{mk}^2\right) A_m = \sum\limits_{k=1}^{n} y_k p_{mk} \end{cases}$$

với $p_{ik} = p_i(x_k)$ là giá trị của hàm $p_i(x)$, $i = 1, 2, \ldots, m$ tại điểm x_k, $k = 1, 2, \ldots, n$.

Trường hợp riêng khi $f(x) = P_m(x) = \sum_{k=0}^{m} A_k x^k$ là đa thức bậc m, ta có hệ phương trình dùng để xác định các hệ số $A_0, A_1, \ldots, A_m$ như sau:

$$\begin{cases} (n+1)A_0 + \left(\sum\limits_{k=0}^{n} x_k\right) A_1 + \cdots + \left(\sum\limits_{k=0}^{n} x_k^m\right) A_m = \sum\limits_{k=0}^{n} y_k \\ \left(\sum\limits_{k=0}^{n} x_k\right) A_0 + \left(\sum\limits_{k=0}^{n} x_k^2\right) A_1 + \cdots + \left(\sum\limits_{k=0}^{n} x_k^{m+1}\right) A_m = \sum\limits_{k=0}^{n} x_k y_k \\ \qquad \cdots \qquad\qquad \cdots \qquad\qquad \cdots\cdots \qquad \cdots \\ \left(\sum\limits_{k=0}^{n} x_k^m\right) A_0 + \left(\sum\limits_{k=0}^{n} x_k^{m+1}\right) A_1 + \cdots + \left(\sum\limits_{k=0}^{n} x_k^{2m}\right) A_m = \sum\limits_{k=0}^{n} x_k^m y_k \end{cases}$$

§3.7 ÁP DỤNG

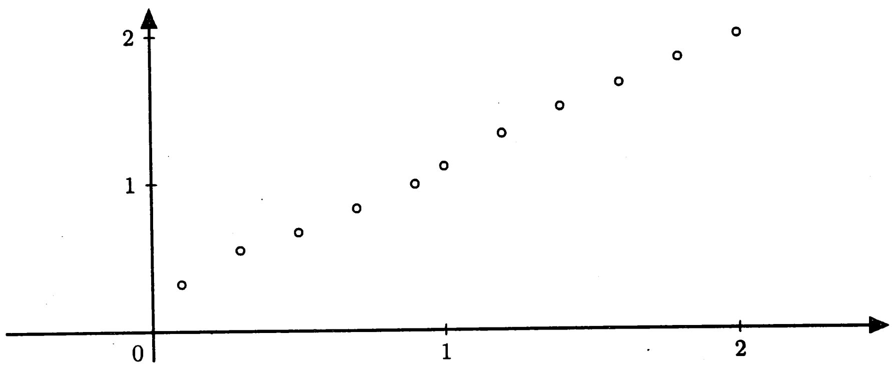
Cho bảng số của hàm $y = f(x)$:

x	0.1	0.3	0.5	0.7	0.9	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8	2.0
y	0.32	0.55	0.67	0.83	0.99	1.11	1.33	1.51	1.67	1.84	2.0

Cần xấp xỉ giá trị của hàm tại $x = 1.65$.

Trong thực tế áp dụng, có nhiều phương pháp để tiếp cận lời giải của bài toán trên. Mỗi phương pháp có thể cho ra các kết quả khác nhau. Việc chọn phương pháp nào thường phụ thuộc vào ý nghĩa thực tế của từng bài toán. Ta sẽ trình bày các hướng tiếp cận có thể của bài toán này.

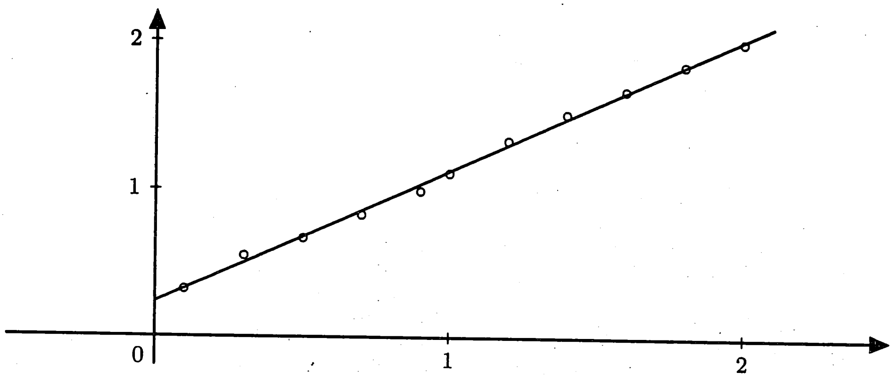
Trước tiên ta minh hoạ bảng số đã cho theo hình sau:



Nhìn vào hình vẽ, ta nhận thấy các điểm phân bố gần như theo đường thẳng. Do đó việc đầu tiên chúng ta nghĩ đến là xây dựng một đường thẳng xấp xỉ tốt nhất bảng số đã cho. Giải hệ phương trình (3.23) với $p(x) = 1$ và $q(x) = x$ ta thu được $A = 0.2352731591$ và $B = 0.8897387173$. Đường thẳng cần tìm có dạng:

$$y = 0.2352731591 + 0.8897387173x$$

và được thể hiện trong hình vẽ sau:



Khi đó $y(1.65) \approx 1.703342043$.

Một cách tiếp cận khác là xây dựng các đa thức nội suy cho bảng số trên. Trước tiên nếu sử dụng tất cả 11 điểm nút trong bảng thì đa thức nội suy Lagrange có dạng:

$$\begin{aligned} L_{10}(x) &= -37.826953458836x^{10} + 406.104879116853x^9 - \\ &- 1890.670567994497x^8 + 5001.295681173440x^7 - \\ &- 8271.461646619223x^6 + 8864.404532324123x^5 - \\ &- 6168.453718523431x^4 + 2713.162982264740x^3 - \\ &- 707.007321607653x^2 + 95.943591030754x - 4.381457706273 \end{aligned}$$

Khi đó $y(1.65) \approx L_{10}(1.65) = 1.697072638397$.

Ta thấy đa thức có bậc khá lớn và các hệ số có giá trị cũng khá lớn, nên khi tính giá trị xấp xỉ sai số có khả năng cũng lớn. Trong thực tế, người ta thường chọn 4 điểm nút để xây dựng đa thức Lagrange bậc ba. Vì $1.65 \in (1.6, 1.8)$ ta sẽ chọn 4 điểm nút cuối cùng và đa thức nội suy Lagrange có dạng

$$L_3(x) = -\frac{5}{12}x^3 + \frac{17}{8}x^2 - \frac{331}{120}x + \frac{47}{20}$$

Trong trường hợp này, ta có $y(1.65) \approx L_3(1.65) = 1.71234375$.

Một hướng khác để xấp xỉ giá trị của hàm là sử dụng spline bậc ba. Sử dụng hàm spline bậc ba tự nhiên để xấp xỉ giá trị của hàm tại $x = 1.65$, ta có kết quả $y(1.65) \approx 1.711860650359$.

BÀI TẬP

Câu 1. Xây dựng đa thức nội suy Lagrange đối với các bảng số sau:

(a)

x	2	3	5
y	3	1	4

(b)

x	0.3	0.5	0.8
y	1.25	1.47	1.88

(c)

x	0	1	3	4
y	3	2	1	5

(d)

x	1.2	1.4	1.6	1.8
y	2.2	3.1	3.8	4.5

Câu 2. Sử dụng đa thức nội suy Lagrange hãy xấp xỉ giá trị của hàm $f(x)$ tại x^* với các điểm nút đã cho. Lấy 4 chữ số lẻ sau dấu phẩy thập phân. So sánh với giá trị chính xác.

(a) $f(x) = \cos x,\ x_0 = 0.2,\ x_1 = 0.5,\ x_2 = 0.7,\ x_3 = 1.0,\ x^* = 0.62$

(b) $f(x) = \mathrm{e}^{-x}\sin x,\ x_0 = 1.2,\ x_1 = 1.4,\ x_2 = 1.6,\ x_3 = 1.8,\ x^* = 1.5$

(c) $f(x) = \ln(1+x),\ x_0 = 7,\ x_1 = 8,\ x_2 = 9,\ x_3 = 10,\ x^* = 8.25$

Câu 3. Cho bảng tỷ sai phân:

$$\begin{array}{c|c|c|c}
x_0 = 1 & f(x_0) = ? & & \\
 & & f[x_0, x_1] = ? & \\
x_1 = 3 & f(x_1) = ? & & f[x_0, x_1, x_2] = 1 \\
 & & f[x_1, x_2] = 2 & \\
x_2 = 4 & f(x_2) = 6 & &
\end{array}$$

Hãy tìm các giá trị còn thiếu trong bảng.

Câu 4. Làm các bài trong câu 1 sử dụng đa thức nội suy Newton tiến.

Câu 5. Sử dụng đa thức nội suy Newton tiến để xây dựng các đa thức nội suy bậc 1, 2 và 3 đối với bảng số liệu sau. Sử dụng các đa thức đó để xấp xỉ giá trị của hàm tại x^*.

(a) $f(0) = 1,\ f(0.25) = 1.6487,\ f(0.5) = 2.7183,\ f(0.75) = 4.4817,\ x^* = 0.43.$

(b) $f(0.1) = -0.2900,\ f(0.2) = -0.5608,\ f(0.3) = -0.8140,\ f(0.4) = -1.0526,\ x^* = 0.18.$

Câu 6. Xây dựng đa thức nội suy Hermite đối với các bảng số sau:

(a)

x	$f(x)$	$f'(x)$
1	2	1
2	3	0

(b)

x	$f(x)$	$f'(x)$
2	1.3863	1.6931
3	3.2958	2.0986

(c)

x	$f(x)$	$f'(x)$
0	1	0
1	3	0
3	2	1

(d)

x	$f(x)$	$f'(x)$
0.0	0	1
0.5	0.7904	2.2373
1.0	2.2874	3.7560

Câu 7. Cho hàm số $f(x) = \dfrac{x}{x^2+1}$.

(a) Hãy xấp xỉ $f(1.05)$ bởi đa thức nội suy Hermite bậc ba, sử dụng các điểm nút $x_0 = 1$ và $x_1 = 1.1$. So sánh với giá trị chính xác.

(b) Lập lại câu (a) với đa thức nội suy Hermite bậc năm, sử dụng các điểm nút $x_0 = 1$, $x_1 = 1.1$ và $x_2 = 1.2$.

Câu 8. Xây dựng spline bậc ba tự nhiên nội suy các bảng số:

(a)

x	0	2	3
y	2	1	1

(b)

x	1	2	3	4
y	2	2	1	4

Câu 9. Cho spline bậc ba tự nhiên:

$$S(x) = \begin{cases} 3 - 2x + x^3, & \text{nếu } 0 \leqslant x \leqslant 1 \\ a + b(x-1) + c(x-1)^2 + d(x-1)^3, & \text{nếu } 1 \leqslant x \leqslant 3 \end{cases}$$

Hãy xác định a, b, c, d.

Câu 10. Cho spline bậc ba tự nhiên:

$$S(x) = \begin{cases} 1 + b_0(x-1) + d_0(x-1)^3, & \text{nếu } 1 \leqslant x \leqslant 2 \\ 3 + b_1(x-2) + 4(x-2)^2 + d_1(x-2)^3, & \text{nếu } 2 \leqslant x \leqslant 3 \end{cases}$$

Hãy xác định b_0, d_0, b_1, d_1.

Câu 11. Xây dựng spline bậc ba $S(x)$ nội suy các bảng số và thoả các điều kiện đã cho.

(a)

x	2	3	4
y	1	4	2

$S'(2) = 0$, $S'(4) = 1$

(b)

x	0	1	2	3
y	1	−1	2	0

$S'(0) = 1$, $S'(3) = 0$

Câu 12. Cho spline bậc ba:

$$S(x) = \begin{cases} 1 + x + x^2 + x^3, & \text{nếu } 0 \leqslant x \leqslant 2 \\ a + b(x-2) + c(x-2)^2 + d(x-2)^3, & \text{nếu } 2 \leqslant x \leqslant 3 \end{cases}$$

Hãy xác định a, b, c, d biết rằng $S'(3) = 1$.

Câu 13. Cho spline bậc ba:

$$S(x) = \begin{cases} 2 + b_0(x-1) - 3(x-1)^2 + d_0(x-1)^3, & \text{nếu } 1 \leqslant x \leqslant 2 \\ 4 + b_1(x-2) + 2(x-2)^2 + d_1(x-2)^3, & \text{nếu } 2 \leqslant x \leqslant 3 \end{cases}$$

Hãy xác định b_0, d_0, b_1, d_1 biết rằng $S'(1) = S'(3)$.

Câu 14. Cho bảng số:

x	1	2	3	4	5	6	7
y	1.02	3.96	8.55	16.01	25.30	35.87	48.58

Tìm hàm $f(x) = A + Bx + Cx^2$ xấp xỉ tốt nhất bảng số trên.

Câu 15. Cho bảng số:

x	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8	2.0
y	2.27	2.37	2.45	2.52	2.60	2.62

Tìm hàm $f(x) = A\sqrt{x} + B\cos x$ xấp xỉ tốt nhất bảng số trên.

Câu 16. Tìm đa thức bậc hai xấp xỉ tốt nhất hàm $y = e^x$ trong đoạn $[0, 1]$ với bước $h = 0.2$. Lập lại bài toán với bước $h = 0.1$.

ĐẠO HÀM VÀ TÍCH PHÂN

Mục lục

4.1 Tính gần đúng đạo hàm **108**
4.2 Công thức Newton-Cotes **111**
4.2.1 Công thức hình thang 112
4.2.2 Công thức Simpson 114
4.3 Công thức cầu phương Gauss **117**
4.4 Tích phân suy rộng **121**
4.5 Áp dụng **124**
4.5.1 Xác định nhiệt lượng của vật liệu 124
4.5.2 Xác định cường độ dòng điện 125
Bài tập chương 4 . . . . **126**

§4.1 TÍNH GẦN ĐÚNG ĐẠO HÀM

Trong phần này ta đưa ra các công thức xấp xỉ các đạo hàm cấp một và cấp hai của hàm $y = f(x)$ dựa vào các giá trị rời rạc y_k của hàm tại các điểm nút x_k. Trước tiên, dựa vào định nghĩa của đạo hàm hàm số $f(x)$ tại điểm x_0, khi Δx đủ nhỏ ta thu được

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} \approx \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

Nếu $\Delta x = h > 0$, ta có: $f'(x_0) \approx \dfrac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$

Nếu $\Delta x = -h < 0$, ta có: $f'(x_0) \approx \dfrac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$

Đây là các công thức xấp xỉ thô của đạo hàm cấp một và thường được áp dụng cho các điểm biên. Đối với các điểm bên trong, phương pháp chung là xây dựng đa thức nội suy Lagrange $L(x)$ xấp xỉ hàm $f(x)$ và sau đó $f'(x) \approx L'(x)$ và $f''(x) \approx L''(x)$.

Xét trường hợp đơn giản với bảng số có ba điểm nút cách đều:

x	$x_0 - h$	x_0	$x_0 + h$
y	$f(x_0 - h)$	$f(x_0)$	$f(x_0 + h)$

Đây là trường hợp thường dùng để xấp xỉ các đạo hàm. Đa thức Lagrange có dạng:

$$\begin{aligned} L(x) &= \frac{(x - x_0 + h)(x - x_0)}{2h^2} f(x_0 + h) - \frac{(x - x_0 + h)(x - x_0 - h)}{h^2} f(x_0) + \\ &+ \frac{(x - x_0)(x - x_0 - h)}{2h^2} f(x_0 - h) \end{aligned}$$

Khi đó

$$\begin{aligned} L'(x) &= \frac{x - x_0 + h}{2h^2}(f(x_0 + h) - 2f(x_0) + \frac{x - x_0}{2h^2}(f(x_0 + h) + f(x_0 - h)) + \\ &+ \frac{x - x_0 - h}{2h^2}(f(x_0 + h) - 2f(x_0)), \end{aligned} \tag{4.1}$$

$$L''(x) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}. \tag{4.2}$$

Từ (4.1) ta được

$$\begin{cases} f'(x_0 - h) & \approx & L'(x_0 - h) & = & \dfrac{-3f(x_0 - h) + 4f(x_0) - f(x_0 + h)}{2h} \\ f'(x_0) & \approx & L'(x_0) & = & \dfrac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \\ f'(x_0 + h) & \approx & L'(x_0 + h) & = & \dfrac{f(x_0 - h) - 4f(x_0) + 3f(x_0 + h)}{2h} \end{cases}$$

Công thức thứ nhất và thứ ba được gọi là các công thức sai phân tiến và lùi, còn công thức thứ hai được gọi là công thức sai phân hướng tâm. Đối với đạo hàm cấp hai, ta dùng công thức (4.2) để xấp xỉ tại điểm x_0 và cũng gọi là công thức sai phân hướng tâm.

Ví dụ 4.1: Sử dụng công thức sai phân hướng tâm tính đạo hàm cấp một và cấp hai của hàm $f(x) = x\,\mathrm{e}^{-x^2}$ tại $x_0 = 1$ với những giá trị khác nhau của h cho ta bảng sau:

h	$f'(1)$	$f''(1)$
0.200	−0.343802	−0.740291
0.150	−0.354226	−0.738399
0.100	−0.361776	−0.736962
0.050	−0.366348	−0.736064
0.010	−0.367818	−0.735771
0.005	−0.367864	−0.735761
0.001	−0.367878	−0.735759

Giá trị chính xác viết đến sáu chữ số sau dấu phẩy thập phân là $f'(1) = -0.367879$ và $f''(1) = -0.735758$.

Trường hợp bảng số có năm điểm nút cách đều, bằng cách làm tương tự, ta thu được công thức xấp xỉ đạo hàm cấp một như sau:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{12h}$$

Trường hợp cần tính đạo hàm tại một điểm bất kỳ của bảng số, ta bắt buộc phải xây dựng đa thức nội suy, lấy đạo hàm và tính giá trị xấp xỉ. Ta xét ví dụ sau.

Ví dụ 4.2: Cho bảng số: $\begin{array}{c|cccc} x & 1.0 & 1.3 & 1.7 & 2.0 \\ \hline y & 2.26 & 2.87 & 3.15 & 3.52 \end{array}$. Sử dụng đa thức nội suy Lagrange hãy xấp xỉ $y'(1.42)$.

Đa thức Lagrange xấp xỉ bảng số trên có dạng:

$$L_3(x) = \frac{8}{3}x^3 - \frac{88}{7}x^2 + \frac{21323}{1050}x - \frac{57}{7}$$

Khi đó:

$$L_3'(x) = 8x^2 - \frac{176}{7}x + \frac{21323}{1050}$$

Do đó $y'(1.42) \approx L_3'(1.42) = 0.7359619048.$

§4.2 CÔNG THỨC NEWTON-COTES

Mục đích của phần này là tính gần đúng tích phân xác định

$$I = \int_a^b f(x)\,dx, \tag{4.3}$$

với $f(x)$ là hàm xác định và khả tích trên $[a, b]$. Ý tưởng xuất phát từ việc xấp xỉ hàm $f(x)$ trên đoạn $[a, b]$ bởi đa thức nội suy Lagrange $L_n(x)$ và

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx I^* = \int_a^b L_n(x)\,dx. \tag{4.4}$$

Xét một phép phân hoạch đều của đoạn $[a, b]$: $h = \dfrac{b-a}{n}$, $x_0 = a$, $x_k = x_0 + kh$, $k = 0, 1, \ldots, n$. Ta xây dựng đa thức nội suy Lagrange $L_n(x)$ xấp xỉ hàm $f(x)$ trên đoạn $[a, b]$ xác định theo công thức (3.5) trong chương 3, trong đó $y_k = f(x_k), k = 0, 1, \ldots, n$.

Thay biểu thức (3.5) vào công thức xấp xỉ (4.4) và sử dụng phép đổi biến $q = \dfrac{x - x_0}{h}$, ta thu được

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx I^* = (b-a)\sum_{k=0}^{n} H_k y_k, \tag{4.5}$$

ở đây

$$H_k = \frac{(-1)^{n-k}}{nk!(n-k)!}\int_0^n \frac{q(q-1)\ldots(q-n)}{q-k}dq,\ k = 0, 1, \ldots, n \tag{4.6}$$

Công thức (4.5) được gọi là công thức Newton-Cotes và các hệ số (4.6) được gọi là các hệ số Cotes. Hệ số Cotes có các tính chất sau đây.

$$\sum_{k=0}^{n} H_k = H_0 + H_1 + \cdots + H_n = 1 \tag{4.7a}$$

$$H_k = H_{n-k}, \quad k = 0, 1, \ldots, n \tag{4.7b}$$

Đối với công thức đánh giá sai số của công thức Newton-Cotes, ta có định lý sau.

Định lý 4.1: *Sai số của công thức Newton-Cotes cho bởi:*

$$|I - I^*| \leqslant \frac{M_{n+1}h^{n+2}}{(n+1)!} \int_0^n |q(q-1)\dots(q-n)|\, dq, \quad n \text{ lẻ.} \tag{4.8a}$$

$$|I - I^*| \leqslant \frac{M_{n+2}h^{n+3}}{(n+2)!} \int_0^n |q^2(q-1)\dots(q-n)|\, dq, \quad n \text{ chẵn.} \tag{4.8b}$$

với $M_m = \max\limits_{x\in[a,b]} \left|f^{(m)}(x)\right|$.

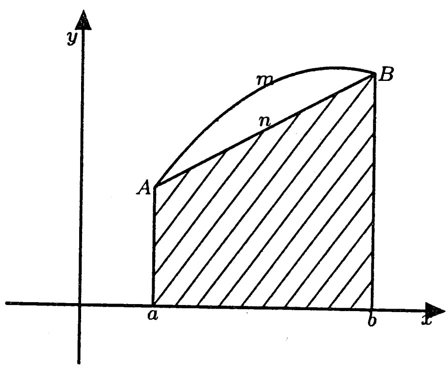
Bây giờ ta sẽ xét một vài trường hợp thường dùng của công thức Newton-Cotes.

4.2.1 CÔNG THỨC HÌNH THANG

Trong công thức (4.5), cho $n = 1$ ta được $x_0 = a$, $x_1 = b$, $h = b - a$, $y_0 = f(a)$, $y_1 = f(b)$. Từ các tính chất (4.7) của hệ số Cotes: $H_0 + H_1 = 1$ và $H_0 = H_1$, ta thu được: $H_0 = H_1 = \frac{1}{2}$. Khi đó công thức (4.5) có dạng

$$I \approx I^* = h\frac{y_0 + y_1}{2} \tag{4.9}$$

và được gọi là công thức hình thang.



Hình 4.1: *Công thức hình thang*

Ý nghĩa hình học của công thức (4.9) thể hiện trong Hình 4.1: tích phân (4.3) biểu diễn diện tích của hình thang cong ($aAmBb$) tạo bởi đường cong $f(x)$ và các đường thẳng $x = a$, $x = b$ và $y = 0$. Theo (4.9), diện tích này được xấp xỉ bởi diện tích hình thang vuông $(aAnBb)$ (phần gạch chéo).

Trong công thức đánh giá sai số (4.8a) của công thức Newton-Cotes, cho $n = 1$ ta thu được

$$|I - I^*| \leqslant \frac{M_2h^3}{2!}\int_0^1 |q(q-1)|\,dq = \frac{M_2h^3}{2}\int_0^1 q(1-q)dq = \frac{M_2h^3}{12} \qquad (4.10)$$

Trong thực tế, công thức (4.9) ít được sử dụng trực tiếp vì sai số lớn. Thông thường ta chia nhỏ đoạn $[a, b]$ và áp dụng công thức hình thang trên từng đoạn nhỏ. Cụ thể, chia đoạn [a, b] thành n đoạn bằng nhau với bước chia $h = \dfrac{b-a}{n}$; các điểm chia $x_0 = a$, $x_k = x_0 + kh$, $y_k = f(x_k)$, $k = 0, 1, \ldots, n$ và sử dụng công thức (4.9) cho từng đoạn nhỏ, ta thu được:

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx \\ &\approx h\frac{y_0+y_1}{2} + h\frac{y_1+y_2}{2} + \cdots + h\frac{y_{n-1}+y_n}{2} \end{aligned}$$

Cuối cùng ta có:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx I^* = h\left(\frac{y_0}{2} + y_1 + y_2 + \cdots + y_{n-1} + \frac{y_n}{2}\right) \qquad (4.11)$$

Công thức (4.11) được gọi là công thức *hình thang mở rộng*. Từ công thức (4.10) ta thu được công thức đánh giá sai số của công thức (4.11).

$$|I - I^*| \leqslant (b-a)\frac{h^2M_2}{12}, \quad M_2 = \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| \qquad (4.12)$$

Ví dụ 4.3: Xét tích phân $I = \displaystyle\int_0^1 \frac{dx}{1+x}$. Cần chia đoạn $[0, 1]$ tối thiểu thành bao nhiêu đoạn, để khi tính theo công thức (4.11), ta có sai số nhỏ hơn 10^{-4}? Với số đoạn chia vừa tìm được, hãy xấp xỉ I.

Ta có $a = 0$, $b = 1$, $f(x) = \dfrac{1}{1+x}$. Gọi n là số đoạn chia, ta được $h = 1/n$. Số đoạn chia n được tìm từ bất đẳng thức: $(b-a)\dfrac{h^2 M_2}{12} < 10^{-4}$, với $M_2 = \max\limits_{x\in[0,1]} |f''(x)| = \max\limits_{x\in[0,1]} \left|\dfrac{2}{(1+x)^3}\right| = 2$. Từ đây ta được: $n^2 > \dfrac{10^4}{6} \Longrightarrow n > 40.82$. Vậy số đoạn chia là $n = 41$.

Khi đó ta có: $h = \dfrac{1}{41}$ và các điểm chia $x_k = \dfrac{k}{41}$. Khi đó $y_k = f(x_k) = \dfrac{41}{41+k}$. Và

$$I \approx I^* = \frac{1}{41}\left(\frac{1}{2} + \frac{41}{42} + \cdots + \frac{41}{81} + \frac{1}{4}\right) = 0.\underline{6931}8436$$

Ta có thể so sánh với giá trị chính xác $I = \ln 2 = 0.\underline{6931}4718$.

Thuật toán hình thang được thực hiện bằng cách gọi hàm

$$I = trapez(f, a, b, N)$$

với f là hàm dưới dấu tích phân, a, b là các cận và N là số đoạn chia. Hàm trả về giá trị gần đúng của tích phân.

```
def trapez(f, a, b, N):
    y = np.zeros((N + 1), dtype=float)
    h = float((b - a) / N)
    for k in range(N + 1):
        y[k] = f(a + k * h)
    res = 0.5 * (y[0] + y[N])
    for i in range(1, N):
        res += y[i]
    res *= h
    return res
```

4.2.2 Công thức Simpson

Trong công thức (4.5), cho $n = 2$ ta thu được

$$x_0 = a,\ x_1 = \frac{a+b}{2},\ x_2 = b,\ h = \frac{b-a}{2},\ y_0 = f(a),\ y_1 = f(\frac{a+b}{2}),\ y_2 = f(b)$$

$$H_0 = \frac{1}{4}\int_0^2 (q-1)(q-2)dq = \frac{1}{4}\left(\frac{8}{3} - 6 + 4\right) = \frac{1}{6},$$

$$H_1 = -\frac{1}{2}\int_0^2 q(q-2)dq = \frac{2}{3}, \quad H_2 = \frac{1}{4}\int_0^2 q(q-1)dq = \frac{1}{6}$$

Khi đó công thức (4.5) có dạng

$$I \approx I^* = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) \tag{4.13}$$

và công thức đánh giá sai số

$$|I - I^*| \leqslant \frac{h^5 M_4}{90}, \quad M_4 = \max_{x\in[a,b]} \left|f^{(4)}(x)\right|$$

Tương tự như trong trường hợp công thức hình thang, ta chia đoạn $[a, b]$ thành $n = 2m$ đoạn nhỏ bằng nhau với bước chia $h = \dfrac{b-a}{2m}$ và sử dụng công thức (4.13) cho từng cặp đoạn nhỏ liền nhau, ta thu được công thức sau:

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b f(x)dx \approx I^* = \frac{h}{3}[y_0 + y_{2m} \\ &+ 4(y_1 + y_3 + \cdots + y_{2m-1}) + 2(y_2 + y_4 + \cdots + y_{2m-2})] \end{aligned} \tag{4.14}$$

Công thức (4.14) được gọi là công thức *Simpson mở rộng*, và sai số của nó được đánh giá bởi

$$|I - I^*| \leqslant (b-a)\frac{h^4 M_4}{180}, \quad M_4 = \max_{x\in[a,b]} \left|f^{(4)}(x)\right| \tag{4.15}$$

Ví dụ 4.4: Xét tích phân $I = \displaystyle\int_0^1 \frac{dx}{1+x}$. Để so sánh ta cũng xét phương pháp Simpson với $n = 10$. Khi đó ta có

$$\begin{aligned} I \approx I^* &= \frac{1}{30}\left\{1 + \frac{1}{2} + 4\left(\frac{10}{11} + \cdots + \frac{10}{19}\right) + 2\left(\frac{10}{12} + \cdots + \frac{10}{18}\right)\right\} = \\ &= 0.69315023 \end{aligned}$$

So với giá trị chính xác $I = \ln 2$ ta có sai số khoảng 0.305×10^{-5}.

Thuật toán Simpson được thực hiện bằng cách gọi hàm

$$I = simpson(f, a, b, N)$$

với f là hàm dưới dấu tích phân, a, b là các cận và N là số đoạn chia. Hàm trả về giá trị gần đúng của tích phân.

```
def simpson(f, a, b, N):
    res = 0.0
    if N % 2 != 0:
        return False
    m = int(N / 2)
    y = np.zeros((N + 1), dtype=float)
    h = float((b - a) / N)
    for k in range(N + 1):
        y[k] = f(a + k * h)
    for i in range(m):
        res += y[2*i] + 4 * y[2*i+1] + y[2*i+2]
    res *= (h / 3.0)
    return res
```

Tuy nhiên, trong thực tế tính toán, để xấp xỉ tích phân (4.3) với sai số ε cho trước, ta thường dùng phương pháp chia đôi như sau. Chia đoạn $[a, b]$ thành hai đoạn và áp dụng công thức Simpson để tính I_2. Tiếp tục chia đôi hai đoạn đó thành bốn đoạn và dùng công thức Simpson để có $I_{2^2} = I_4$. Tiếp tục quá trình chia đôi như vậy đến k lần ta thu được I_{2^k}. Quá trình kết thúc khi $|I_{2^k} - I_{2^{k-1}}| < \varepsilon$.

```
def int_simp(f, a, b, eps):
    N = 2
    I1 = simpson(f, a, b, N)
    err = 1.0
    while err > eps:
        I0 = I1
        N *= 2
        I1 = simpson(f, a, b, N)
        err = abs(I1 - I0)
    return I1
```

§4.3 CÔNG THỨC CẦU PHƯƠNG GAUSS

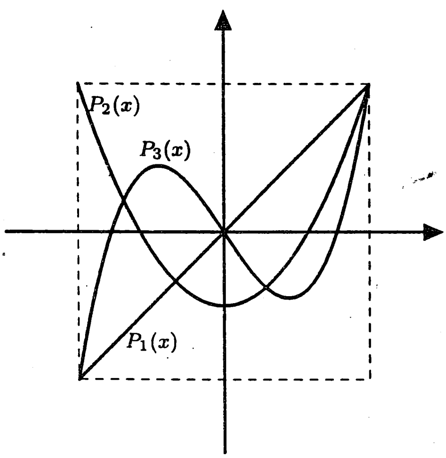
Ý tưởng của công thức cầu phương Gauss là xấp xỉ tích phân (4.3) bởi một tổng hữu hạn.

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} B_k f(x_k) \tag{4.16}$$

trong đó $2n$ hệ số $B_1, B_2, \ldots, B_n, x_1, x_2, \ldots, x_n$ được xác định theo điều kiện: *công thức* (4.16) *trở thành công thức đúng với mọi đa thức có bậc nhỏ hơn* $2n$. Khi đó cho $f(x) = x^m, m = 0, 1, \ldots, 2n-1$ và thay dấu $\approx$ bởi dấu $=$ trong công thức (4.16), ta sẽ thu được $2n$ phương trình để giải cho $2n$ ẩn $B_1, B_2, \ldots, B_n, x_1, x_2, \ldots, x_n$.

Tuy nhiên chúng ta có thể giảm số ẩn và số phương trình bằng cách xác định trước các điểm nút $x_1, x_2, \ldots, x_n$ và xét tích phân (4.3) trong đoạn $[-1, 1]$ nhờ vào đa thức Legendre. Đa thức Legendre $P_n(x)$ xác định theo công thức truy hồi sau

$$\begin{cases} P_{n+1}(x) = \dfrac{2n+1}{n+1} x P_n(x) - \dfrac{n}{n+1} P_{n-1}(x), \quad n \geqslant 1 \\ P_0(x) = 1, \; P_1(x) = x \end{cases}$$



Hình 4.2: *Các đa thức Legendre*

Một vài đa thức Legendre đầu tiên có dạng

$$P_0(x) = 1; \; P_1(x) = x; \; P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}; \; P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x; \ldots$$

và đồ thị của chúng thể hiện trong Hình 4.2.

Tính chất quan trọng của đa thức Legendre $P_n(x)$ là nó có n nghiệm thực phân biệt nằm trong đoạn $[-1, 1]$ và đối xứng qua gốc tọa độ. Khi đó nếu xét

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)dx \approx I^* = \sum_{k=1}^{n} B_k f(x_k) \tag{4.17}$$

và chọn $x_1, x_2, \ldots, x_n$ theo thứ tự là nghiệm của đa thức Legendre $P_n(x)$ thì các hệ số $B_1, B_2, \ldots, B_n$ sẽ là nghiệm của hệ phương trình đại số tuyến tính sau

$$\begin{cases} B_1 + B_2 + \ldots + B_n = 2 \\ x_1B_1 + x_2B_2 + \ldots + x_nB_n = 0 \\ x_1^2B_1 + x_2^2B_2 + \ldots + x_n^2B_n = \dfrac{2}{3} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ x_1^{n-1}B_1 + x_2^{n-1}B_2 + \ldots + x_n^{n-1}B_n = \dfrac{1-(-1)^n}{n} \end{cases}$$

Định thức của ma trận hệ số của hệ phương trình trên là định thức Vandermonde và do $x_1, x_2, \ldots, x_n$ là n nghiệm phân biệt của đa thức Legendre nên định thức khác không. Như vậy tồn tại duy nhất các hệ số $B_1, B_2, \ldots, B_n$.

Trường hợp $n = 2$ từ công thức (4.17) ta có công thức Gauss bậc hai:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

Còn trong trường hợp $n = 3$ từ công thức (4.17) ta có công thức Gauss bậc ba:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{0.6}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{0.6}\right)$$

Trong trường hợp cần tính tích phân tổng quát $\int_a^b f(x)dx$ chúng ta đưa về tích phân trên đoạn $[-1, 1]$ bằng phép đổi biến:

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$$

Khi đó

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 f\left(\frac{(b-a)t+(b+a)}{2}\right)\frac{b-a}{2}dt$$

Bảng sau đây liệt kê các giá trị của $x_1, x_2, \ldots, x_n$ và $B_1, B_2, \ldots, B_n$ theo từng trường hợp của n:

n	x_k	B_k
4	−0.861136311594054	0.347854845137453
	−0.339981043584857	0.652145154862548
	0.339981043584857	0.652145154862548
	0.861136311594054	0.347854845137453
5	−0.906179845938664	0.236926885056189
	−0.538469310105682	0.478628670499367
	0	0.568888888888889
	0.538469310105682	0.478628670499367
	0.906179845938664	0.236926885056189
6	−0.932469514203150	0.171324492379173
	−0.661209386466266	0.360761573048133
	−0.238619186083197	0.467913934572695
	0.238619186083197	0.467913934572695
	0.661209386466266	0.360761573048133
	0.932469514203150	0.171324492379173
7	−0.949107912342760	0.129484966168868
	−0.741531185599394	0.279705391489281
	−0.405845151377397	0.381830050505112
	0	0.417959183673478
	0.405845151377397	0.381830050505112
	0.741531185599394	0.279705391489281
	0.949107912342760	0.129484966168868

Người ta chứng minh được rằng sai số của công thức Gauss (4.17) được tính theo công thức sau

$$|I - I^*| \leqslant \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{[(2n)!]^3(2n+1)}M_{2n} \quad \text{với} \quad M_{2n} = \max_{x\in[-1,1]}\left|f^{(2n)}(x)\right|.$$

Ví dụ 4.5: Tính gần đúng tích phân $I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x}$ bằng công thức

Gauss bậc hai và bậc ba.

Trước tiên ta thực hiện phép đổi biến $x = \frac{t}{2} + \frac{1}{2}$, khi đó

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x} = \int_{-1}^1 \frac{dt}{3+t}$$

Công thức Gauss bậc hai cho kết quả:

$$I \approx \frac{1}{3 - 1/\sqrt{3}} + \frac{1}{3 + 1/\sqrt{3}} \approx 0.692308$$

Còn kết quả của công thức Gauss bậc ba là:

$$I \approx \frac{5}{9} \cdot \frac{1}{3 - \sqrt{0.6}} + \frac{8}{9} \cdot \frac{1}{3} + \frac{5}{9} \cdot \frac{1}{3 + \sqrt{0.6}} \approx 0.693122$$

Giá trị chính xác của tích phân là $I = \ln 2 = 0.693147$.

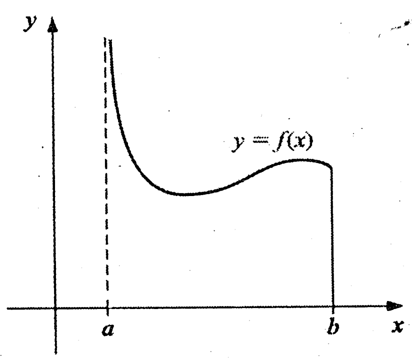
Thuật toán của công thức Gauss như sau.

```
def int_gauss(f, n, a=-1, b=1):
    x = np.array([
        [-math.sqrt(0.6), 0, math.sqrt(0.6),
        0, 0, 0, 0],
        [-0.861136311594054, -0.339981043584857,
        0.339981043584857, 0.861136311594054,
        0, 0, 0],
        [-0.906179845938664, -0.538469310105682, 0,
        0.538469310105682, 0.906179845938664, 0, 0],
        [-0.932469514203150, -0.661209386466266,
        -0.238619186083197, 0.238619186083197,
        0.661209386466266, 0.932469514203150, 0],
        [-0.949107912342760, -0.741531185599394,
        -0.405845151377397, 0, 0.405845151377397,
        0.741531185599394, 0.949107912342760]])
    B = np.array([
        [5.0 / 9.0, 8.0 / 9.0, 5.0 / 9.0,
        0, 0, 0, 0],
        [0.347854845137453, 0.652145154862548,
```

```
        0.652145154862548, 0.347854845137453,
        0, 0, 0],
        [0.236926885056189, 0.478628670499367,
        0.568888888888889, 0.478628670499367,
        0.236926885056189, 0, 0],
        [0.171324492379173, 0.360761573048133,
        0.467913934572695, 0.467913934572695,
        0.360761573048133, 0.171324492379173, 0],
        [0.129484966168868, 0.279705391489281,
        0.381830050505112, 0.417959183673478,
        0.381830050505112, 0.279705391489281,
        0.129484966168868]])
    res = 0.0
    for i in range(n):
        res += B[n-3,i]*
            f(0.5*(b-a)*x[n-3,i]+0.5*(b+a))
    res *= 0.5 * (b - a)
    return res
```

§4.4 TÍCH PHÂN SUY RỘNG

Trong phần này ta xét tích phân (4.3) với a, b hữu hạn và hàm $f(x)$ không bị chặn tại $x = a$ ($\lim\limits_{x \to a^+} f(x) = \infty$). Đây là tích phân suy rộng loại II và $x = a$ là điểm kỳ dị của tích phân (hình 4.3).



Hình 4.3: *Tích phân suy rộng với điểm kỳ dị tại* $x = a$

Trước tiên cần nhắc lại rằng tích phân

$$\int_a^b \frac{g(x)}{(x-a)^p}\,dx,$$

với $g(x)$ là hàm liên tục trên đoạn $[a,b]$, sẽ hội tụ nếu $p<1$. Thêm vào đó, nếu $g(x)\in C^{m+1}[a,b]$, thì ta có khai triển Taylor:

$$\begin{aligned} g(x) &= g(a)+\frac{g'(a)}{1!}(x-a)+\frac{g''(a)}{2!}(x-a)^2+\cdots+\frac{g^{(m)}(a)}{m!}(x-a)^m \\ &+ R_m(x)=\sum_{k=0}^{m}\frac{g^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k+R_m(x)=P_m(x)+R_m(x) \end{aligned}$$

Khi đó

$$\int_a^b \frac{g(x)}{(x-a)^p}\,dx=\int_a^b \frac{P_m(x)}{(x-a)^p}\,dx+\int_a^b \frac{R_m(x)}{(x-a)^p}\,dx \qquad (4.18)$$

Do $P_m(x)$ là một đa thức nên ta có thể tính được tích phân

$$\begin{aligned} \int_a^b \frac{P_m(x)}{(x-a)^p}\,dx &= \int_a^b\left[\sum_{k=0}^{m}\frac{g^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^{k-p}\right]dx=\sum_{k=0}^{m}\frac{g^{(k)}(a)}{k!}\int_a^b (x-a)^{k-p}dx \\ &= \sum_{k=0}^{m}\frac{g^{(k)}(a)}{k!}\frac{(x-a)^{k-p+1}}{k-p+1}\bigg|_{x=a}^{x=b}=\sum_{k=0}^{m}\frac{g^{(k)}(a)}{k!}\frac{(b-a)^{k-p+1}}{k-p+1} \end{aligned}$$

Còn tích phân thứ hai trong (4.18) được xấp xỉ bởi công thức Simpson mở rộng đối với hàm $G(x)$ trên $[a,b]$:

$$G(x)=\begin{cases}\dfrac{R_m(x)}{(x-a)^p}, & a<x\leqslant b\\ 0, & x=a\end{cases}=\begin{cases}\dfrac{g(x)-P_m(x)}{(x-a)^p}, & a<x\leqslant b\\ 0, & x=a\end{cases}$$

Ví dụ 4.6: Xét tích phân

$$\int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx$$

Khai triển MacLaurin bậc bốn của hàm $\cos x$ tại $x=0$ là

$$\cos x=1-\frac{x^2}{2}+\frac{x^4}{24}+R_4(x)=P_4(x)+R_4(x)$$

Khi đó

$$\int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx = \int_0^1 \frac{P_4(x)}{\sqrt{x}}\,dx + \int_0^1 \frac{\cos x - P_4(x)}{\sqrt{x}}\,dx$$

Tích phân thư nhất

$$I_1 = \int_0^1 \left(x^{-1/2} - \frac{x^{3/2}}{2} + \frac{x^{7/2}}{24}\right) dx = 2 - \frac{1}{5} + \frac{1}{108} = 1.809259259$$

Tích phân thứ hai được xấp xỉ bằng công thức Simpson mở rộng với sai số nhỏ hơn 10^{-8} và cho kết quả $I_2 = -0.000210784$. Vậy

$$I = \int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx \approx I_1 + I_2 = 1.809048475$$

Ví dụ 4.7: Xét tích phân

$$\int_0^1 \frac{dx}{(1+x)\sqrt{x}} = \frac{\pi}{2} = \underline{1.570796327}$$

Nếu sử dụng khai triển MacLaurin bậc ba tại $x = 0$

$$\frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 - x^3 + R_3(x) = P_3(x) + R_3(x)$$

thì

$$I_1 = \int_0^1 \frac{P_3(x)}{\sqrt{x}}\,dx = 2\left(1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7}\right) = 1.447619048$$

và

$$I_2 = \int_0^1 \frac{\frac{1}{1+x} - P_3(x)}{\sqrt{x}}\,dx$$

được xấp xỉ bằng công thức Simpson mở rộng với sai số nhỏ hơn 10^{-8} cho kết quả $I_2 = 0.123177280$. Vậy $I = \underline{1.570796328}$.

Còn nếu sử dụng khai triển MacLaurin đến bậc bốn tại $x = 0$

$$\frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 - x^3 + x^4 + R_4(x) = P_4(x) + R_4(x)$$

thì

$$I_1 = \int_0^1 \frac{P_4(x)}{\sqrt{x}}\, dx = 2\left(1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \frac{1}{9}\right) = 1.669841270$$

và

$$I_2 = \int_0^1 \frac{\frac{1}{1+x} - P_4(x)}{\sqrt{x}}\, dx$$

được xấp xỉ bằng công thức Simpson mở rộng với sai số nhỏ hơn 10^{-8} cho kết quả $I_2 = -0.099044943$. Vậy $I = \underline{1.570796327}$. Cả hai trường hợp đều cho kết quả trùng với giá trị chính xác.

Trường hợp điểm kỳ dị là điểm $x = b$, ta thực hiện việc đổi biến $t = -x$. Còn nếu là tích phân suy rộng loại I:

$$I = \int_a^{+\infty} f(x)\, dx, \quad (a > 0)$$

ta thực hiện phép đổi biến $t = \dfrac{1}{x}$.

§4.5 ÁP DỤNG

4.5.1 XÁC ĐỊNH NHIỆT LƯỢNG CỦA VẬT LIỆU

Một trong các bài toán thường gặp là xác định nhiệt lượng cần thiết khi tăng nhiệt độ của vật liệu. Giả sử c là nhiệt lượng cần để tăng một đơn vị nhiệt độ của vật liệu. Khi c là hằng số thì tổng nhiệt lượng ΔH (cal) được tính theo công thức:

$$\Delta H = m \cdot c \cdot \Delta T$$

với đơn vị của c là $\dfrac{cal}{g \cdot {}^o C}$, của m là g và của ΔT là ${}^oC$. Ví dụ, nhiệt lượng cần để tăng $20g$ nước từ 5^oC lên 10^oC là

$$\Delta H = (20)(1)(10 - 5) = 100\ cal$$

Tuy nhiên khi nhiệt độ biến động lớn, thì c không là hằng số mà thường là hàm của nhiệt độ T. Cụ thể, trong một số trường hợp, nhiệt lượng phụ thuộc vào nhiệt độ theo công thức:

$$c(T) = 0.132 + 1.56 \times 10^{-4}T + 2.64 \times 10^{-7}T^2$$

Khi đó, nhiệt lượng cần thiết để m (g) vật liệu tăng nhiệt độ từ T_1^oC đến T_2^oC là:

$$\Delta H = m\int_{T_1}^{T_2} c(T)\, dT = m\int_{T_1}^{T_2} (0.132 + 1.56 \times 10^{-4}T + 2.64 \times 10^{-7}T^2)\, dT$$

Khi $m = 1000\ g$, $T_1 = -100^oC$ và $T_2 = 200^oC$, do $c(T)$ là đa thức bậc hai, nên sử dụng công thức hình thang ta tính được giá trị chính xác $\Delta H = 42,732\ (cal)$. Bảng sau đây cho chúng ta các giá trị gần đúng của công thức hình thang tương ứng với số đoạn chia n khác nhau.

n	ΔH_n	$\varepsilon_n = \lvert\Delta H_n - \Delta H\rvert$
2	$43,029.000$	297
4	$42,806.250$	74.25
8	$42,750.563$	18.563
16	$42,736.641$	4.641
32	$42,733.160$	1.160
64	$42,732.290$	0.290
128	$42,732.073$	0.073
256	$42,732.018$	0.018
512	$42,732.005$	0.005

4.5.2 XÁC ĐỊNH CƯỜNG ĐỘ DÒNG ĐIỆN

Giá trị trung bình của dòng điện xoay chiều trong một khoảng chu kỳ có thể bằng không. Ví dụ, nếu cường độ dòng điện cho bởi $i(t) = \sin\frac{2\pi t}{T}$ với T là chu kỳ, thì giá trị trung bình là

$$i = \frac{1}{T-0}\int_0^T \sin\frac{2\pi t}{T} dt = \frac{-\cos 2\pi + \cos 0}{T} = 0$$

Mặc dù vậy dòng điện vẫn tạo nên công và nhiệt lượng. Vì vậy người ta thường sử dụng Trị số hiệu dụng để đặc trưng cho dòng điiện và được định nghĩa như sau:

$$I = \sqrt{\frac{1}{T}\int_0^T i^2(t)\, dt}$$

với $i(t)$ cường độ dòng điện tức thời. Ta xét trường hợp cụ thể sau.

Cho $i(t) = \begin{cases} 10\,\mathrm{e}^{-t/T}\sin(2\pi t/T), & 0 \leqslant t \leqslant T/2 \\ 0, & T/2 \leqslant t \leqslant T \end{cases}$. Sử dụng các công thức hình thang và Simpson để xấp xỉ I với $T = 1s$ và những giá trị khác nhau của n. Ta có kết quả

n	Hình thang	Simpson
2	15.1632665	20.2176887
4	15.4014291	15.4808166
8	15.4119584	15.4154681
16	15.4125682	15.4127714
32	15.4126056	15.4126180
64	15.4126079	15.4126080

BÀI TẬP

Câu 1. Sử dụng các công thức sai phân hướng tâm, tính gần đúng đạo hàm cấp một và cấp hai của các hàm sau đây tại điểm x_0 với bước h lần lượt là 0.1, 0.05, 0.01, 0.005 và 0.001.

(a) $f(x) = x^2\cos(5x),\ x_0 = 1.2$

(b) $f(x) = \sin(x^2) + \cos(x^2),\ x_0 = 0.5$

(c) $f(x) = x^3 - \mathrm{e}^{-x^2},\ x_0 = 1$

(d) $f(x) = \ln x - \dfrac{2}{x^3},\ x_0 = 3$

Câu 2. Cho hàm số $f(x)$ dưới dạng bảng

x	1.2	1.4	1.6	1.8
y	1.25	2.33	1.82	2.86

Sử dụng đa thức nội suy Newton, hãy xấp xỉ $f'(1.3)$.

Câu 3. Sử dụng công thức hình thang mở rộng với n đã cho xấp xỉ các tích phân sau:

(a) $I = \displaystyle\int_0^1 \frac{x}{1+x^3}dx, \quad n = 10$

(b) $I = \displaystyle\int_{1.3}^{2.5} \mathrm{e}^{2x}\cos 3x dx, \quad n = 6$

(c) $I = \displaystyle\int_1^2 x\ln x dx, \quad n = 8$

(d) $I = \displaystyle\int_{0.5}^1 x\tan x dx, \quad n = 10$

Câu 4. Làm lại câu 3 bằng công thức Simpson.

Câu 5. Xấp xỉ tích phân $\int\limits_0^1 e^{-x^2}\,dx$ với bước $h = 0.05$.

(a) Sử dụng công thức hình thang.

(b) Sử dụng công thức Simpson.

Câu 6. Xác định giá trị của n cần thiết để xấp xỉ tích phân $I = \int\limits_1^2 \ln x dx$ với sai số nhỏ hơn 10^{-5}.

(a) Sử dụng công thức hình thang.

(b) Sử dụng công thức Simpson.

Câu 7. Cho hàm số $f(x)$ dưới dạng bảng:

x	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0
y	1.72	1.81	1.87	1.94	2.02	2.13	2.23	2.29	2.33	2.39	3.02

Sử dụng các công thức hình thang và Simpson xấp xỉ các tích phân:

$$I_1 = \int\limits_1^2 f(x)dx \quad \text{và} \quad I_2 = \int\limits_1^2 x f^2(x)dx$$

Câu 8. Tính gần đúng các tích phân trong câu 3 bằng công thức Gauss bậc ba.

Câu 9. Tính gần đúng các tích phân suy rộng sau đây, sử dụng khai triển Taylor đến cấp 4.

(a) $I = \int_1^2 \frac{e^x}{\sqrt[3]{(x-1)^2}}\,dx$ (b) $I = \int_0^1 \frac{\sin x}{\sqrt{x}}\,dx$

(c) $I = \int_0^\infty \frac{dx}{1+x^3}$ (d) $I = \int_1^\infty \frac{dx}{x\sqrt{1+x^5+x^{10}}}$

Câu 10. Vận tốc rơi tự do của vật thể có khối lượng m được cho bởi công thức

$$v(t) = \sqrt{\frac{gm}{c}}\tanh\left(\sqrt{\frac{gc}{m}}\,t\right)$$

Biết $g = 9.81m/s$, $m = 68.1kg$ và $c = 0.25kg/m$, hãy xấp xỉ quảng đường đi được của vật thể sau $10s$ kể từ thời điểm ban đầu với bước $h = 1s$ và $h = 0.5s$:

(a) Sử dụng công thức hình thang

(b) Sử dụng công thức Simpson

Câu 11. Khối lượng của một thanh dầm được tính theo công thức

$$m = \int_0^L \rho(x) A_c(x)\, dx$$

với m - khối lượng, $\rho(x)$ - mật độ, $A_c(x)$ - diện tích mặt cắt, L - chiều dài của thanh và x - khoảng cách ($0 \leqslant x \leqslant L$). Bảng sau cho chúng ta số liệu của thanh dài $10m$.

x, (m)	0	2	3	4	6	8	10
ρ, (g/cm^3)	4.00	3.95	3.89	3.80	3.60	3.41	3.30
A_c, (cm^2)	100	103	106	110	120	133	150

Sử dụng phương pháp thích hợp, hãy xấp xỉ khối lượng của thanh.

Câu 12. Khối lượng chất khí vận chuyển qua ống dẫn trong khoảng thời gian $[t_1, t_2]$ được tính theo công thức

$$M = \int_{t_1}^{t_2} Q(t)c(t)\, dt$$

với M - khối lượng (mg), t_1 - thời điểm ban đầu (min), t_2 - thời điểm kết thúc (min), $Q(t)$ - tốc độ vận chuyển (m^3/min), $c(t)$ - nồng độ (mg/m^3). Ta có các công thức sau:

$$Q(t) = 9 + 5\cos^2(0.4t), \quad c(t) = 5\,\mathrm{e}^{-0.5t} + 2\,\mathrm{e}^{0.15t}$$

Hãy xấp xỉ khối lượng chất khi biết $t_1 = 2$ và $t_2 = 8$:

(a) Sử dụng công thức Simpson với sai số nhỏ hơn 10^{-5}

(b) Sử dụng công thức Gauss bậc 5

CHƯƠNG NĂM

PHƯƠNG TRÌNH VI PHÂN

Mục lục

5.1 Bài toán Cauchy **129**
5.1.1 Công thức Euler 130
5.1.2 Công thức Euler cải tiến 130
5.1.3 Công thức Runge-Kutta 131
5.1.4 Hệ phương trình vi phân 137
5.1.5 Phương trình vi phân cấp cao 140
5.2 Bài toán biên tuyến tính cấp hai **141**
5.2.1 Phương pháp sai phân hữu hạn 141
5.2.2 Phương pháp bắn 144
5.3 Phương trình vi phân đạo hàm riêng **147**
5.3.1 Phương trình parabolic 147
5.3.2 Phương trình hyperbolic 152
5.3.3 Phương trình elliptic 155
Bài tập chương 5 . . . . **158**

§5.1 BÀI TOÁN CAUCHY

Trong phần này chúng ta sẽ xét một số phương pháp tìm nghiệm gần đúng của một dạng bài toán của phương trình vi phân thường có nhiều ứng dụng trong thực tế. Đó là *bài toán Cauchy* hay còn gọi là *bài toán với điều kiện ban đầu*

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), \quad t \geqslant t_0, \\ y(t_0) = y_0 \end{cases} \tag{5.1}$$

với $y = y(t)$ là hàm cần tìm, khả vi với $t \geqslant t_0$, y_0 là giá trị ban đầu cho trước của hàm tại điểm $t = t_0$ và $f(t, y)$ là hàm hai biến liên tục cùng với các đạo hàm riêng của nó.

Chúng ta chỉ quan tâm đến các phương pháp giải số cho bài toán (5.1) với giả thiết rằng chúng ta có đủ tất cả các điều kiện để đảm bảo sự tồn tại và tính duy nhất nghiệm của bài toán. Trước tiên ta đưa ra các công thức tìm nghiệm gần đúng của hàm tại điểm $t_1 = t_0 + h$ với bước $h > 0$ đủ bé. Ta thường ký hiệu $y(t_1)$ là giá trị chính xác của hàm tại t_1 và y_1 là giá trị gần đúng: $y_1 \approx y(t_1)$. Sau đó nếu xét bài toán trên một đoạn, ta chia đều đoạn đó với bước h đủ nhỏ và áp dụng liên tiếp các công thức vừa tìm được.

5.1.1 CÔNG THỨC EULER

Ta dựa vào ý nghĩa hình học để đưa ra công thức tìm y_1 đơn giản nhất. Tại điểm (t_0, y_0) của đường cong $y = y(t)$ ta kẻ tiếp tuyến có phương trình:

$$y - y_0 = y'(t_0)(t - t_0)$$

Do $y'(t_0) = f(t_0, y(t_0)) = f(t_0, y_0)$ đã biết, nên từ phương trình trên ta có:

$$y = y_0 + f(t_0, y_0)(t - t_0)$$

Thay $t = t_1$ trong biểu thức trên ta thu được

$$y(t_1) \approx y_1 = y_0 + f(t_0, y_0)(t_1 - t_0)$$

và được xem là giá trị gần đúng của $y(t_1)$. Từ đây ta có công thức Euler:

$$y(t_1) \approx y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0) \tag{5.2}$$

Ví dụ 5.1: Xét bài toán $\begin{cases} y' = y + t, & t \geqslant 0 \\ y(0) = 1 \end{cases}$ có nghiệm chính xác là $y(t) = 2\,e^t - t - 1$. Sử dụng công thức Euler với bước $h = 0.1$ ta có:

$$y(0.1) \approx y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0) = y_0 + h(y_0 + t_0) = 1 + 0.1(1 + 0) = 1.1$$

Nghiệm chính xác: $y(0.1) = 1.110341836$.

5.1.2 CÔNG THỨC EULER CẢI TIẾN

Trong công thức (5.2), vai trò của $f(t_0, y_0)$ chính là hệ số góc của tiếp tuyến với đường cong tại điểm (t_0, y_0) và hoàn toàn không có thông tin gì về đường cong tại điểm $(t_1, y(t_1))$. Vì lý do đó, người ta thay vai trò của $f(t_0, y_0)$ bởi trung bình cộng của các hệ số góc của hai tiếp tuyến tại hai điểm (t_0, y_0) và $(t_1, y(t_1))$. Khi đó ta có công thức

$$y_1 = y_0 + h\frac{f(t_0, y_0) + f(t_1, y(t_1))}{2} \approx y_0 + h\frac{f(t_0, y_0) + f(t_1, y_1)}{2}$$

Cả vế phải lẫn vế trái của công thức trên đều có chứa y_1 nên ta phải giải phương trình để tìm nó. Vì vậy, để đơn giản người ta thay giá trị y_1 ở vế phải bởi giá trị được xác định theo công thức (5.2). Ta thu được:

$$y(t_1) \approx y_1 = y_0 + h\frac{f(t_0, y_0) + f(t_1, y_0 + hf(x_0, y_0))}{2}$$

Hoặc

$$\begin{cases} K_1 = hf(x_0, y_0) \\ K_2 = hf(x_0 + h, y_0 + K_1) \\ y(t_1) \approx y_1 = y_0 + \dfrac{1}{2}(K_1 + K_2) \end{cases} \tag{5.3}$$

Ví dụ 5.2: Xét bài toán trong ví dụ 5.1. Sử dụng công thức Euler cải tiến với bước $h = 0.1$ ta có:

$$\begin{cases} K_1 = 0.1(0 + 1) = 0.1 \\ K_2 = 0.1(0 + 0.1 + 1 + 0.1) = 0.12 \\ y(0.1) \approx y_1 = 1 + \dfrac{1}{2}(0.1 + 0.12) = 1.11 \end{cases}$$

5.1.3 CÔNG THỨC RUNGE-KUTTA

Trong phần này chúng ta sẽ xét một phương pháp khác để đưa ra công thức giải gần đúng bài toán Cauchy (5.1) có tên gọi là phương pháp Runge-Kutta. Công thức xấp xỉ như sau:

$$\begin{cases} y(t_1) = y(t_0 + h) \approx y_1 = y_0 + \sum\limits_{i=1}^{n} A_i K_i \\ K_1 = hf(t_0, y_0) \\ K_2 = hf(t_0 + \alpha_2 h, y_0 + \beta_{21} K_1) \\ K_3 = hf(t_0 + \alpha_3 h, y_0 + \beta_{31} K_1 + \beta_{32} K_2) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ K_n = hf(t_0 + \alpha_n h, y_0 + \beta_{n1} K_1 + \beta_{n2} K_2 + \cdots + \beta_{n,n-1} K_{n-1}) \end{cases} \tag{5.4}$$

Trong đó các hệ số

$$\begin{array}{c} A_1,\ A_2, \dots, A_n,\ \alpha_2,\ \alpha_3, \dots, \alpha_n \\ \beta_{21},\ \beta_{31},\ \beta_{32}, \dots, \beta_{n1},\ \beta_{n2}, \dots, \beta_{n,n-1} \end{array} \tag{5.5}$$

được xác định theo phương pháp sau. Đặt

$$\varphi(h) = y(t_0 + h) - y_0 - \sum_{i=1}^{n} A_i K_i$$

như là một hàm phụ thuộc vào bước h. Giá trị tuyệt đối của $\varphi(h)$ là sai số tuyệt đối của giá trị gần đúng tại $t_0 + h$. Ta có thể giả thiết rằng nghiệm $y(t)$, và do đó hàm $\varphi(h)$, có đạo hàm đến cấp m. Chú ý rằng $\varphi(0) = 0$, khi đó ta có khai triển MacLaurin của $\varphi(h)$ như sau:

$$\varphi(h) = \varphi'(0)h + \frac{1}{2}\varphi''(0)h^2 + \dots + \frac{1}{m!}\varphi^{(m)}(0)h^m + o(h^m)$$

Các hệ số của (5.5) được xác định theo điều kiện:

$$\varphi'(0) = \varphi''(0) = \dots = \varphi^{(m)}(0) = 0 \tag{5.6}$$

Khi đó $\varphi(h) = o(h^m)$. Bây giờ chúng ta sẽ xét một số trường hợp thường được sử dụng trong tính toán gần đúng.

Trường hợp n = m = 1: Công thức (5.4) có dạng: $y(t_0 + h) \approx y_0 + A_1 K_1$ với $K_1 = hf(t_0, y_0)$ và A_1 là hệ số duy nhất cần xác định. Khi đó

$$\varphi(h) = y(t_0 + h) - y_0 - A_1 K_1 = y(t_0 + h) - y_0 - A_1 h f(t_0, y_0)$$

Điều kiện (5.6) trở thành

$$\varphi'(0) = y'(t_0) - A_1 f(t_0, y_0) = (1 - A_1) f(t_0, y_0) = 0$$

Như vậy ta có $A_1 = 1$ và, trong trường hợp này, công thức trở thành công thức Euler (5.2).

Trường hợp n = m = 2: Khi đó công thức (5.4) có dạng:

$$\begin{cases} y(t_0 + h) \approx y_0 + A_1 K_1 + A_2 K_2 \\ K_1 = hf(t_0, y_0) \\ K_2 = hf(t_0 + \alpha_2 h, y_0 + \beta_{21} K_1) \end{cases}$$

với $A_1, A_2, \alpha_2, \beta_{21}$ là các hệ số cần xác định theo điều kiện (5.6): $\varphi'(0) = \varphi''(0) = 0$ trong đó

$$\varphi(h) = y(t_0 + h) - y_0 - A_1K_1 - A_2K_2$$

Ta có:

$$\begin{aligned}
\varphi'(h) &= y'(t_0 + h) - A_1 f(t_0, y_0) - A_2\{f(t_0 + \alpha_2 h, y_0 + \beta_{21}K_1) + \\
&\quad + h[\alpha_2 f'_x(\ldots) + \beta_{21} f(t_0, y_0) f'_y(\ldots)]\} \\
\varphi''(h) &= y''(t_0 + h) - A_2\{2[\alpha_2 f'_x(\ldots) + \beta_{21} f(t_0, y_0) f'_y(\ldots)] + h[\ldots]\}
\end{aligned}$$

Cho $h = 0$ và từ điều kiện $\varphi'(0) = \varphi''(0) = 0$ ta thu được ba phương trình dùng để xác định bốn hệ số cần tìm:

$$\begin{cases} 1 - A_1 - A_2 &= 0 \\ 1 - 2\alpha_2 A_2 &= 0 \\ 1 - 2\beta_{21} A_2 &= 0 \end{cases}$$

Hệ phương trình này có vô số nghiệm. Trong đó bộ nghiệm tương ứng với công thức thường sử dụng là: $A_1 = A_2 = \frac{1}{2}$, $\alpha_2 = \beta_{21} = 1$. Ta thu được:

$$\begin{cases} y(t_1) = y(t_0 + h) \approx y_1 = y_0 + \dfrac{1}{2}(K_1 + K_2) \\ K_1 = hf(t_0, y_0) \\ K_2 = hf(t_0 + h, y_0 + K_1) \end{cases} \tag{5.7}$$

Công thức này chính là công thức Euler cải tiến (5.3). Ngoài ra ta cũng thường sử dụng bộ nghiệm $A_1 = 0$, $A_2 = 1$, $\alpha_2 = \beta_{21} = \frac{1}{2}$. Khi đó ta có công thức

$$\begin{cases} y(t_1) = y(t_0 + h) \approx y_1 = y_0 + K_2 \\ K_1 = hf(t_0, y_0) \\ K_2 = hf\left(t_0 + \dfrac{h}{2}, y_0 + \dfrac{K_1}{2}\right) \end{cases} \tag{5.8}$$

Ví dụ 5.3: Xét bài toán $\begin{cases} y' = y^2 + t^2, & t \geqslant 1 \\ y(1) = 0.5 \end{cases}$. Sử dụng công thức (5.7) với bước $h = 0.1$ để xấp xỉ giá trị của hàm tại $x_1 = 1.1$ ta thu được:

$K_1 = 0.1 \times (.5^2 + 1^2) = 0.125$

$K_2 = 0.1 \times ((0.5 + 0.125)^2 + (1 + 0.1)^2) = 0.1600625$

$y(1.1) \approx y_1 = 0.5 + 0.5(0.125 + 0.1600625) = \mathbf{0.64253125}$

Trường hợp n = m = 4: Trong trường hợp này ta thường dùng công thức có dạng sau:

$$\begin{cases} y(t_1) = y(t_0 + h) \approx y_1 = y_0 + \dfrac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \\ K_1 = hf(t_0, y_0) \\ K_2 = hf\left(t_0 + \dfrac{h}{2}, y_0 + \dfrac{K_1}{2}\right) \\ K_3 = hf\left(t_0 + \dfrac{h}{2}, y_0 + \dfrac{K_2}{2}\right) \\ K_4 = hf(t_0 + h, y_0 + K_3) \end{cases} \tag{5.9}$$

Công thức (5.9) được gọi là *công thức Runge-Kutta cấp bốn* và thường gọi là công thức RK4.

Ví dụ 5.4: Cũng xét bài toán trong ví dụ 5.1. Sử dụng công thức RK4 với bước $h = 0.1$ ta có:

$K_1 = h(y_0 + t_0) = 0.1(1 + 0) = 0.1$

$K_2 = h\left(t_0 + \dfrac{h}{2} + y_0 + \dfrac{K_1}{2}\right) = 0.1\left(0 + \dfrac{0.1}{2} + 1 + \dfrac{0.1}{2}\right) = 0.11$

$K_3 = h\left(t_0 + \dfrac{h}{2} + y_0 + \dfrac{K_2}{2}\right) = 0.1\left(0 + \dfrac{0.1}{2} + 1 + \dfrac{0.11}{2}\right) = 0.1105$

$K_4 = h(t_0 + h + y_0 + K_3) = 0.1(0 + 0.1 + 1 + 0.1105) = 0.12105$

$y(0.1) \approx y_1 = 1 + \dfrac{1}{6}[0.1 + 2 \times 0.11 + 2 \times 0.1105 + 0.12105] = \underline{1.11034}167$

Chú ý rằng giá trị chính xác của hàm tại 0.1 là $y(0.1) = \underline{1.11034}184$. Nó cho thấy sự vượt trội của công thức RK4 so với hai công thức còn lại.

Bây giờ để tìm nghiệm gần đúng của bài toán Cauchy trên đoạn $[t_0, t_0 + H]$, $H > 0$, ta chia đoạn $[t_0, t_0 + H]$ thành n đoạn nhỏ bằng nhau với bước $h = \dfrac{H}{n}$. Các điểm chia là $t_k = t_0 + kh, k = 0, 1, \ldots, n$. Giá trị gần đúng của hàm tại điểm t_k được ký hiệu là $y_k \approx y(t_k)$. Khi đó nếu áp dụng liên tiếp công thức Euler, Euler cải tiến và RK4, ta được ba công thức tương ứng như sau:

Công thức Euler

$$y(t_k) \approx y_k = y_{k-1} + hf(t_{k-1}, y_{k-1}), \quad k = 1, 2, \ldots, n$$

Công thức Euler cải tiến

$$\begin{cases} K_1 = hf(t_{k-1}, y_{k-1}) \\ K_2 = hf(t_{k-1} + h, y_{k-1} + K_1) \\ y(t_k) \approx y_k = y_{k-1} + \frac{1}{2}(K_1 + K_2) \end{cases} \qquad k = 1, 2, \ldots, n$$

Công thức RK4

$$\begin{cases} K_1 = hf\,(t_{k-1}, y_{k-1}) \\ K_2 = hf\left(t_{k-1} + \frac{h}{2}, y_{k-1} + \frac{K_1}{2}\right) \\ K_3 = hf\left(t_{k-1} + \frac{h}{2}, y_{k-1} + \frac{K_2}{2}\right) \\ K_4 = hf\,(t_{k-1} + h, y_{k-1} + K_3) \\ y(t_k) \approx y_k = y_{k-1} + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K4) \end{cases} \qquad k = 1, 2, \ldots, n$$

Ví dụ 5.5: Xét bài toán $\begin{cases} y' = 1 + (y-t)^2, & 2 \leqslant t \leqslant 3 \\ y(2) = 1 \end{cases}$ có nghiệm chính xác $y = t + \dfrac{1}{1-t}$. Sử dụng ba công thức Euler, Euler cải tiến và RK4 để xấp xỉ hàm $y(t)$ trên đoạn $[2, 3]$ với bước $h = 0.1$

và so sánh với nghiệm chính xác. Kết quả cho ta bảng sau:

t_k	$Euler$	$RK2$	$RK4$	$y(t_k)$
2.0	1.00000000	1.00000000	1.00000000	1.00000000
2.1	1.20000000	1.19050000	1.19090881	1.19090909
2.2	1.38100000	1.36603785	1.36666627	1.36666667
2.3	1.54807610	1.53002885	1.53076879	1.53076923
2.4	1.70461506	1.68492533	1.68571385	1.68571429
2.5	1.85297108	1.83253283	1.83333291	1.83333333
2.6	1.99483572	1.97420966	1.97499960	1.97500000
2.7	2.13145810	2.11099702	2.11176433	2.11176471
2.8	2.26378209	2.24370625	2.24444410	2.24444444
2.9	2.39253505	2.37297888	2.37368389	2.37368421
3.0	2.51828712	2.49932878	2.49999970	2.50000000

Sau đây là các chương trình theo ba công thức trên: euler, euler cải tiến và Runge-Kutta cấp bốn. $f(x, y)$ là hàm hai biến, $x0$, $y0$ là các giá trị ban đầu, h là bước lặp, N là số lần lặp với giá trị mặc định là 1. Hàm trả về mảng Y chứa giá trị xấp xỉ của hàm.

```
def euler(f, x0, y0, h, N=1):
    y = np.zeros(N+1, dtype=float)
    y[0] = y0
    for i in range(1, N+1):
        y[i] = y[i-1] + h * f(x0 + (i-1) * h, y[i-1])
    return y

def euler_m(f, x0, y0, h, N=1):
    y = np.zeros(N+1, dtype=float)
    y[0] = y0
    for i in range(1, N+1):
        K1 = h * f(x0 + (i-1) * h, y[i-1])
        K2 = h * f(x0 + i * h, y[i-1] + K1)
        y[i] = y[i-1] + 0.5 * (K1 + K2)
    return y

def rk4(f, x0, y0, h, N=1):
    y = np.zeros(N+1, dtype=float)
    y[0] = y0
```

```
    for i in range(1, N+1):
        K1 = h * f(x0+(i-1.0)*h, y[i-1])
        K2 = h * f(x0+(i-0.5)*h, y[i-1]+0.5*K1)
        K3 = h * f(x0+(i-0.5)*h, y[i-1]+0.5*K2)
        K4 = h * f(x0+i*h, y[i-1]+K3)
        y[i] = y[i-1]+(K1 + 2 * K2 + 2 * K3 + K4)/6.0
    return y
```

5.1.4 HỆ PHƯƠNG TRÌNH VI PHÂN

Phần này sẽ xét bài toán Cauchy cho hệ phương trình vi phân cấp một. Phương pháp dùng để giải gần đúng bài toán Cauchy cũng dựa trên các phương pháp đã xét trong các mục trước. Ở đây để đơn giản cho cách trình bày, ta sẽ xét hệ gồm hai phương trình vi phân cấp một

$$\begin{cases} x'(t) = f(t, x(t), y(t)) \\ y'(t) = g(t, x(t), y(t)) & t \in [t_0, t_0 + H] \\ x(t_0) = \alpha,\ y(t_0) = \beta \end{cases} \tag{5.10}$$

và sử dụng cả ba công thức Euler, Euler cải tiến và Runge-Kutta cấp bốn đối với hệ (5.10).

Chia đoạn $[t_0, t_0+H]$ thành n đoạn nhỏ bằng nhau có độ dài $h = \dfrac{H}{n}$. Khi đó các điểm chia là $t_k = t_0 + kh, k = 0, 1, \ldots, n$. Giá trị gần đúng của hàm $x(t)$ tại điểm t_k là $x_k \approx x(t_k)$, còn giá trị gần đúng của hàm $y(t)$ tại điểm t_k là $y_k \approx y(t_k)$. Ta có các công thức sau:

Công thức Euler:

$$\begin{cases} x(t_k) \approx x_k = x_{k-1} + hf(t_{k-1}, x_{k-1}, y_{k-1}) \\ y(t_k) \approx y_k = y_{k-1} + hg(t_{k-1}, x_{k-1}, y_{k-1}) \\ \forall k = 1, 2, \ldots, n; \end{cases} \tag{5.11}$$

Công thức Euler cải tiến:

$$\begin{cases} K_{1x} = hf\left(t_{k-1}, x_{k-1}, y_{k-1}\right), \quad K_{1y} = hg\left(t_{k-1}, x_{k-1}, y_{k-1}\right) \\ K_{2x} = hf\left(t_{k-1} + h, x_{k-1} + K_{1x}, y_{k-1} + K_{1y}\right) \\ K_{2y} = hg\left(t_{k-1} + h, x_{k-1} + K_{1x}, y_{k-1} + K_{1y}\right) \\ x(t_k) \approx x_k = x_{k-1} + \dfrac{1}{2}\left(K_{1x} + K_{2x}\right) \\ y(t_k) \approx y_k = y_{k-1} + \dfrac{1}{2}\left(K_{1y} + K_{2y}\right) \\ \forall k = 1, 2, \ldots, n; \end{cases} \tag{5.12}$$

Công thức Runge-Kutta cấp bốn:

$$\begin{cases} K_{1x} = hf\left(t_{k-1}, x_{k-1}, y_{k-1}\right) \\ K_{1y} = hg\left(t_{k-1}, x_{k-1}, y_{k-1}\right) \\ K_{2x} = hf\left(t_{k-1} + \dfrac{h}{2}, x_{k-1} + \dfrac{K_{1x}}{2}, y_{k-1} + \dfrac{K_{1y}}{2}\right) \\ K_{2y} = hg\left(t_{k-1} + \dfrac{h}{2}, x_{k-1} + \dfrac{K_{1x}}{2}, y_{k-1} + \dfrac{K_{1y}}{2}\right) \\ K_{3x} = hf\left(t_{k-1} + \dfrac{h}{2}, x_{k-1} + \dfrac{K_{2x}}{2}, y_{k-1} + \dfrac{K_{2y}}{2}\right) \\ K_{3y} = hg\left(t_{k-1} + \dfrac{h}{2}, x_{k-1} + \dfrac{K_{2x}}{2}, y_{k-1} + \dfrac{K_{2y}}{2}\right) \\ K_{4x} = hf\left(t_{k-1} + h, x_{k-1} + K_{3x}, y_{k-1} + K_{3y}\right) \\ K_{4y} = hg\left(t_{k-1} + h, x_{k-1} + K_{3x}, y_{k-1} + K_{3y}\right) \\ x(t_k) \approx x_k = x_{k-1} + \dfrac{1}{6}\left(K_{1x} + 2K_{2x} + 2K_{3x} + K_{4x}\right) \\ y(t_k) \approx y_k = y_{k-1} + \dfrac{1}{6}\left(K_{1y} + 2K_{2y} + 2K_{3y} + K_{4y}\right) \\ \forall k = 1, 2, \ldots, n; \end{cases} \tag{5.13}$$

Ví dụ 5.6: Xét hệ: $\begin{cases} x'(t) = tx - 2y + 1 \\ y'(t) = 2x + ty + \sin t \quad t \geqslant 1 \\ x(1) = 0.25, \ y(1) = 0.75 \end{cases}$. Ta sử dụng công thức Euler cải tiến để xấp xỉ giá trị của $x(t)$ và $y(t)$ tại $t = 1.2$ với bước $h = 0.2$.

Ta có: $t_0 = 1, \ x_0 = 0.25, \ y_0 = 0.75, h = 0.2, \ f(t, x, y) = tx - 2y + 1,$

$g(t,x,y) = 2x + ty + \sin t$. Và

$$K_{1x} = h(t_0x_0 - 2y_0 + 1) = 0.2(1 \times 0.25 - 2 \times 0.75 + 1) = -0.05$$

$$K_{1y} = h(2x_0 + t_0y_0 + \sin t_0) = 0.2(2 \times 0.25 + 1 \times 0.75 + \sin 1) = 0.4183$$

$$\begin{aligned} K_{2x} &= h((t_0 + h)(x_0 + K_{1x}) - 2(y_0 + K_{1y}) + 1) = \\ &= 0.2(1.2(0.25 - 0.05) - 2(0.75 + 0.4183) + 1) = -0.2193 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K_{2y} &= h(2(x_0 + K_{1x}) + (t_0 + h)(y_0 + K_{1y}) + \sin(t_0 + h)) = \\ &= 0.2(2(0.25 - 0.05) + 1.2(0.75 + 0.4183) + \sin 1.2) = 0.5468 \end{aligned}$$

$$x(1.2) \approx 0.25 + \frac{1}{2}(-0.05 - 0.2193) = 0.1154$$

$$y(1.2) \approx 0.75 + \frac{1}{2}(0.4183 + 0.5468) = 1.2326$$

Thuật toán sau sử dụng công thức Runge-Kutta cấp bốn để xấp xỉ nghiệm của hệ hai phương trình vi phân cấp một.

```
def rk4sys2(f, g, t0, x0, y0, h, N=1):
  X = np.zeros(N+1, dtype=float)
  Y = np.zeros(N+1, dtype=float)
  X[0] = x0
  Y[0] = y0
  for i in range(1, N+1):
    K1X=h*f(t0+(i-1)*h,X[i-1],Y[i-1])
    K1Y=h*g(t0+(i-1)*h,X[i-1],Y[i-1])
    K2X=h*f(t0+(i-0.5)*h,X[i-1]+K1X/2,Y[i-1]+K1Y/2)
    K2Y=h*g(t0+(i-0.5)*h,X[i-1]+K1X/2,Y[i-1]+K1Y/2)
    K3X=h*f(t0+(i-0.5)*h,X[i-1]+K2X/2,Y[i-1]+K2Y/2)
    K3Y=h*g(t0+(i-0.5)*h,X[i-1]+K2X/2,Y[i-1]+K2Y/2)
    K4X=h*f(t0+i*h,X[i-1]+K3X,Y[i-1]+K3Y)
    K4Y=h*g(t0+i*h,X[i-1]+K3X,Y[i-1]+K3Y)
    X[i]=X[i-1]+(K1X + 2*K2X + 2*K3X + K4X)/6.0
    Y[i]=Y[i-1]+(K1Y + 2*K2Y + 2*K3Y + K4Y)/6.0
  return X, Y
```

5.1.5 PHƯƠNG TRÌNH VI PHÂN CẤP CAO

Đối với phương trình vi phân cấp cao, ta chuyển về hệ phương trình vi phân cấp một bằng cách đổi biến hàm. Ta cũng xét phương trình vi phân cấp hai:

$$\begin{cases} x''(t) = F(t, x(t), x'(t)) & t_0 \leqslant t \leqslant t_0 + H \\ x(t_0) = \alpha,\ x'(t_0) = \beta \end{cases} \tag{5.14}$$

Ta biến đổi về bài toán Cauchy cho hệ phương trình vi phân cấp một dạng (5.10) bằng phép đổi biến $y(t) = x'(t)$. Khi đó ta có hệ:

$$\begin{cases} x'(t) = f(t, x, y) = y \\ y'(t) = g(t, x, y) = F(t, x, y) \\ x(t_0) = \alpha,\ y(t_0) = \beta \end{cases}$$

Ví dụ 5.7: Xét phương trình vi phân cấp hai $x'' - 2x' + 2x = e^{2t}\sin t,\ 0 \leqslant t \leqslant 1$ với điều kiện ban đầu $x(0) = -0.4, x'(0) = -0.6$. Đặt $y(t) = x'(t)$, phương trình được biến đổi thành hệ:

$$\begin{cases} x'(t) = f(t, x, y) = y \\ y'(t) = g(t, x, y) = -2x + 2y + e^{2t}\sin t \\ x(t_0) = -0.4,\ y(t_0) = -0.6 \end{cases}$$

Phương pháp Runge-Kutta cấp bốn được dùng để xấp xỉ nghiệm gần đúng của hệ với bước $h = 0.1$. Kết quả được cho bởi bảng sau và so sánh với nghiệm chính xác $x(t) = 0.2\,e^{2t}(\sin t - 2\cos t)$ và $y(t) = x'(t) = 0.2\,e^{2t}(4\sin t - 3\cos t)$.

t_k	$x(t_k)$	x_k	$x'(t_k)$	y_k
0.0	−0.4000000	−0.4000000	−0.6000000	−0.6000000
0.1	−0.4617330	−0.4617333	−0.6316304	−0.6316312
0.2	−0.5255591	−0.5255599	−0.6401478	−0.6401490
0.3	−0.5886001	−0.5886014	−0.6136630	−0.6136638
0.4	−0.6466103	−0.6466123	−0.5365821	−0.5365820
0.5	−0.6935640	−0.6935667	−0.3887395	−0.3887381

t_k	$x(t_k)$	x_k	$x'(t_k)$	y_k
0.6	−0.7211485	−0.7211519	−0.1443834	−0.1443809
0.7	−0.7181489	−0.7181530	+0.2289917	+0.2289970
0.8	−0.6697068	−0.6697113	+0.7719815	+0.7719918
0.9	−0.5564381	−0.5564429	+0.1534764	+0.1534782
1.0	−0.3533944	−0.3533989	+0.2578741	+0.2578766

§5.2 BÀI TOÁN BIÊN TUYẾN TÍNH CẤP HAI

Các phương pháp tìm nghiệm gần đúng của phương trình vi phân thường đòi hỏi các điều kiện được cho tại một thời điểm ban đầu nào đó. Đối với phương trình vi phân cấp hai, ta cần hai giá trị $x(t_0)$ và $x'(t_0)$. Tuy nhiên nhiều bài toán trong thực tế cho thấy điều kiện của hàm cần tìm được cho tại nhiều thời điểm khác nhau. Vấn đề này dẫn tới việc tìm nghiệm gần đúng của một dạng bài toán thứ hai được gọi là bài toán biên. Trong phần này chúng ta chỉ xét bài toán biên của phương trình vi phân thường tuyến tính cấp hai với điều kiện biên được cho ở hai điểm có dạng

$$\begin{cases} y''(t) = p(t)y'(t) + q(t)y(t) + r(t), \ a \leqslant t \leqslant b, \\ y(a) = \alpha, \ y(b) = \beta \end{cases} \tag{5.15}$$

Khi đó ta có định lý tồn tại duy nhất nghiệm sau.

Định lý 5.1: *Giả sử $p(x)$, $q(x)$, $r(x)$ là các hàm liên tục trên $[a, b]$ và $q(x) > 0$ với mọi $x \in [a, b]$. Khi đó bài toán (5.15) có nghiệm duy nhất.*

5.2.1 PHƯƠNG PHÁP SAI PHÂN HỮU HẠN

So với một số phương pháp khác, phương pháp sai phân hữu hạn cho kết quả không chính xác bằng, khối lượng tính toán nhiều hơn, nhưng ổn định hơn và giải quyết được các trường hợp hai chiều, ba chiều, ... Ý tưởng của phương pháp là xấp xỉ các đạo hàm $y'(t), y''(t)$ trong (5.15) bằng sai phân hữu hạn tại các điểm chia. Bài toán (5.15) trở thành bài toán giải hệ phương trình tuyến tính ba đường chéo, và có thể được thực hiện bằng phương pháp nhân tử LU.

Đầu tiên, chọn số tự nhiên $n > 0$. Chia đều đoạn $[a, b]$ thành n đoạn bởi các điểm chia $t_0 = a$; $t_k = t_0 + kh$, $k = 1, 2 \cdots, n-1$; $t_n = b$, với $h = \dfrac{b-a}{n}$ là bước chia. Gọi $y_k \approx y(t_k)$ là giá trị xấp xỉ của hàm tại điểm t_k. Tại các điểm nút t_k, $k = 1, 2 \cdots, n-1$ bên trong đoạn $[a, b]$, sử dụng các công thức sai phân hướng tâm đã xét trong chương trước:

$$y'(t_k) \approx \frac{y(t_{k+1}) - y(t_{k-1})}{2h} = \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2h} \tag{5.16a}$$

$$y''(t_k) \approx \frac{y(t_{k+1}) - 2y(t_k) + y(t_{k-1})}{h^2} = \frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{h^2} \tag{5.16b}$$

Các công thức (5.16a) và (5.16b) có sai số là $o(h^2)$. Thay giá trị xấp xỉ của $y'(t_k), y''(t_k)$ của công thức (5.16a) và (5.16b) vào (5.15) tại các điểm chia $t_k, k = 1, 2, \ldots, n-1$, ta thu được các phương trình

$$\frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{h^2} = p_k \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2h} + q_k y_k + r_k, \ \forall k = 1, 2, \ldots, n-1$$

với $p_k = p(t_k)$, $q_k = q(x_k)$ và $r_k = r(x_k)$. Bổ sung vào hệ phương trình các điều kiện được suy ra từ các điều kiện biên $y_0 = \alpha, y_n = \beta$ và sau khi biến đổi ta thu được hệ phương trình sau

$$\begin{cases} y_0 = \alpha, \quad y_n = \beta \\ \left(\dfrac{1}{h^2} + \dfrac{p_k}{2h}\right) y_{k-1} - \left(q_k + \dfrac{2}{h^2}\right) y_k + \left(\dfrac{1}{h^2} - \dfrac{p_k}{2h}\right) y_{k+1} = r_k \\ \forall k = 1, 2, \ldots, n-1 \end{cases} \tag{5.17}$$

Đây chính là hệ phương trình đại số tuyến tính gồm $n-1$ phương trình với $n-1$ ẩn cần tìm là: $y_1, y_2, \ldots, y_{n-1}$.

Ví dụ 5.8: Xét bài toán biên $\begin{cases} y'' + ty' - 16y = -4t, \ t \in [0, 1] \\ y(0) = 0, \ y(1) = 1 \end{cases}$. Sử dụng phương pháp sai phân hữu hạn, hãy xấp xỉ $y(t)$ trong $[0, 1]$ với bước $h = 0.25$.

Ta có $a = 0, b = 1, h = 0.25 \Rightarrow n = 4, t_k = 0.25k, y_k \approx y(t_k), k = 0, 1, 2, 3, 4$. Từ các điều kiện biên ta thu được $y_0 = 0, y_4 = 1$. Cần xác định y_1, y_2, y_3. Mặt khác $p(t) = t \Rightarrow p_k = t_k = 0.25k$, $q(t) = -16 \Rightarrow q_k = -16$, $r(t) = -4t \Rightarrow r_k = -4t_k = -k$. Từ hệ phương trình (5.17) ta có hệ:

$$\begin{cases} -48y_1 + 16.5y_2 + & = -1 \\ 15y_1 - 48y_2 + 17y_3 = -2 \\ 14.5y_2 - 48y_3 = -3 - 17.5 \end{cases}$$

Ta có kết quả: $y_1 = 0.1081,\ y_2 = 0.2539,\ y_3 = 0.5038$.

Ví dụ 5.9: Xét bài toán biên

$$\begin{cases} y'' + \frac{2}{t}y' - \frac{2}{t^2}y = \frac{\sin(\ln t)}{t^2}, \ t \in [1,2] \\ y(1) = 1,\ y(2) = 2 \end{cases}$$

có nghiệm chính xác $y = C_1 t + \frac{C_2}{t^2} - \frac{3}{10}\sin(\ln t) - \frac{1}{10}\cos(\ln t)$ với $C_1 = 1.13920701$ và $C_2 = -0.03920701$. Chọn $n = 10$ và do đó $h = 0.1$ ta được kết quả như trong bảng dưới đây

t_k	y_k	$y(t_k)$	$\lvert y_k - y(t_k)\rvert$
1.0	1.00000000	1.00000000	
1.1	1.09260052	1.09262930	2.88×10^{-5}
1.2	1.18704313	1.18708484	4.17×10^{-5}
1.3	1.28333687	1.28338236	4.55×10^{-5}
1.4	1.38140205	1.38144595	4.39×10^{-5}
1.5	1.48112026	1.48115942	3.92×10^{-5}
1.6	1.58235990	1.58239246	3.26×10^{-5}
1.7	1.68498902	1.68501396	2.49×10^{-5}
1.8	1.78888175	1.78889853	1.68×10^{-5}
1.9	1.89392110	1.89392951	0.85×10^{-5}
2.0	2.00000000	2.00000000	

Thuật toán của phương pháp sai phân hữu hạn như sau.

```
def fdm(p, q, r, a, b, n, al, be):
    h = (b - a) / float(n)
    x = np.zeros(n + 1, dtype=float)
    for i in range(n + 1):
        x[i] = a + i * h
    A = np.zeros((n + 1, n + 1), dtype=float)
```

```
    B = np.zeros(n + 1, dtype=float)
    A[0, 0] = 1.0
    for k in range(1, n):
        A[k, k] = -(q(x[k]) + 2 / h / h)
        A[k, k - 1] = 1.0 / h / h + p(x[k]) / 2 / h
        A[k, k + 1] = 1.0 / h / h - p(x[k]) / 2 / h
    A[n, n] = 1
    B[0] = al
    for k in range(1, n):
        B[k] = r(x[k])
    B[n] = be
    return tri_diag(A, B)
```

5.2.2 PHƯƠNG PHÁP BẮN

Xét bài toán biên (5.15). Trước tiên ta xét hai bài toán Cauchy tương ứng sau

$$\begin{cases} y''(t) = p(t)y'(t) + q(t)y(t) + r(t), \ a \leqslant t \leqslant b, \\ y(a) = \alpha, \ y'(a) = 0 \end{cases} \tag{5.18}$$

và

$$\begin{cases} y''(t) = p(t)y'(t) + q(t)y(t), \ a \leqslant t \leqslant b, \\ y(a) = 0, \ y'(a) = 1 \end{cases} \tag{5.19}$$

Gọi $y_1(t)$ là nghiệm của bài toán (5.18) và $y_2(t)$ là nghiệm của bài toán (5.19). Giả sử $y_2(b) \neq 0$. Ta định nghĩa

$$y(t) = y_1(t) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2(t) \tag{5.20}$$

Khi đó: $y'(t) = y_1'(t) + \dfrac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2'(t)$, $y''(t) = y_1''(t) + \dfrac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2''(t)$. Như vậy

$$\begin{aligned} y''(t) &= \left[p(t)y_1'(t) + q(t)y_1(t) + r(t)\right] + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)}\left[p(t)y_2'(t) + q(t)y_2(t)\right] \\ &= p(t)\left[y_1'(t) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2'(t)\right] + q(t)\left[y_1(t) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2(t)\right] + r(t) \\ &= p(t)y'(t) + q(t)y(t) + r(t) \end{aligned}$$

Hơn nữa

$$y(a) = y_1(a) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2(a) = \alpha + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} \cdot 0 = \alpha$$

và

$$y(b) = y_1(b) + \frac{\beta - y_1(b)}{y_2(b)} y_2(b) = y_1(b) + \beta - y_1(b) = \beta$$

Do đó $y(t)$ là nghiệm của bài toán biên (5.15). Như vậy, thay vì giải bài toán biên (5.15), ta sẽ giải hai bài toán Cauchy (5.18) và (5.19).

Ví dụ 5.10: Xét bài toán biên

$$\begin{cases} y''(t) = 3y'(t) - 2y(t) + 4t^2, \ t \in [0,1] \\ y(0) = 0, \ y(1) = 1 \end{cases}$$

có nghiệm chính xác $y(t) = \dfrac{14 - 7\,\mathrm{e}^2}{\mathrm{e}^2 - \mathrm{e}}\,\mathrm{e}^x + \dfrac{7\,\mathrm{e} - 14}{\mathrm{e}^2 - \mathrm{e}}\,\mathrm{e}^{2x} + 2x^2 + 6x + 7.$
Khi đó hai bài toán Cauchy tương ứng là:

$$(A) \begin{cases} y_1''(t) = 3y_1'(t) - 2y_1(t) + 4t^2, \ t \in [0,1] \\ y_1(0) = 0, \ y_1'(0) = 0 \end{cases}$$

$$(B) \begin{cases} y_2''(t) = 3y_2'(t) - 2y_2(t), \ t \in [0,1] \\ y_2(0) = 0, \ y_2'(0) = 1 \end{cases}$$

Sử dụng công thức Runge-Kutta cấp bốn (5.13) kết hợp với bài toán (5.14), ta thu được bảng kết quả sau. Chú ý rằng $y_1(t_k)$ là nghiệm của bài toán Cauchy (A), $y_2(t_k)$ là nghiệm của bài toán Cauchy (B) và y_k được tính theo công thức (5.20):

$$y_k = y_1(t) + \frac{1 - 0.64273386}{4.67060950} y_2(t) = y_1(t_k) + 0.0764924 \cdot y_2(t_k)$$

t_k	$y_1(t_k)$	$y_2(t_k)$	y_k	$y(t_k)$	$\lvert y(t_k) - y_k\rvert$
0.0	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000	
0.1	0.00003583	0.11622917	0.00892648	0.00892427	0.23×10^{-5}
0.2	0.00060304	0.27041539	0.02128777	0.02128321	0.46×10^{-5}
0.3	0.00324809	0.47224796	0.03937147	0.03936453	0.70×10^{-5}
0.4	0.01094146	0.73369659	0.06706367	0.06705446	0.93×10^{-5}
0.5	0.02850676	1.06953050	0.11031771	0.11030655	1.12×10^{-5}

t_k	$y_1(t_k)$	$y_2(t_k)$	y_k	$y(t_k)$	$\lvert y(t_k) - y_k\rvert$
0.6	0.06315666	1.49795398	0.17773875	0.17772627	1.25×10^{-5}
0.7	0.12516082	2.04138424	0.28131120	0.28129845	1.28×10^{-5}
0.8	0.22867624	2.72740338	0.43730188	0.43729053	1.14×10^{-5}
0.9	0.39277766	3.58992310	0.66737950	0.66737204	0.75×10^{-5}
1.0	0.64273386	4.67060950	1.00000000	1.00000000	

Thuật toán của phương pháp bắn như sau.

```
def shooting(p, q, r, a, b, n, al, be):

    def rk4ode2(ff, t0, x0, x1, h0, N):
        def f(t, x, y):
            z = y + 0.0 * x + 0.0 * t
            return z
        def g(t, x, y):
            z = ff(t, x, y)
            return z
        X, Y = rk4sys2(f, g, t0, x0, x1, h0, N)
        return X

    def h1(t, x, y):
        z = p(t) * y + q(t) * x + r(t)
        return z

    def h2(t, x, y):
        z = p(t) * y + q(t) * x
        return z

    h = (b - a) / float(n)
    Y1 = rk4ode2(h1, a, al, 0.0, h, n + 1)
    Y2 = rk4ode2(h2, a, 0.0, 1.0, h, n + 1)
    Y = np.zeros(n + 1, dtype=float)
    tmp = (be - Y1[n]) / Y2[n]
    for i in range(n + 1):
        Y[i] = Y1[i] + Y2[i] * tmp
    return Y
```

§5.3 PHƯƠNG TRÌNH VI PHÂN ĐẠO HÀM RIÊNG

5.3.1 PHƯƠNG TRÌNH PARABOLIC

Ta xét phương trình truyền nhiệt của hàm phân bố nhiệt độ $u(t, x)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}, \quad 0 < x < a, \quad t > 0, \tag{5.21}$$

với $\gamma > 0$ là hằng số dẫn nhiệt, thoả điều kiện biên

$$u(t, 0) = \alpha(t), \quad u(t, a) = \beta(t), \quad t > 0 \tag{5.22}$$

và điều kiện ban đầu

$$u(0, x) = f(x), \quad 0 < x < a \tag{5.23}$$

Để thực hiện việc giải số bài toán trên, ta xét một lưới chữ nhật chứa các điểm $(t_j, x_m) \in \mathbb{R}^2$ với

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots \quad \text{và} \quad 0 = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = a$$

Để đơn giản, ta xét lưới đều theo hai hướng với các bước thời gian và không gian tương ứng

$$\Delta t = t_{j+1} - t_j, \quad \Delta x = x_{m+1} - x_m = \frac{a}{n}$$

Chúng ta cũng sử dụng ký hiệu

$$u_{j,m} \approx u(t_j, x_m) \quad \text{với} \quad t_j = j\Delta t, \; x_m = m\Delta x,$$

với $j = 0, 1, 2, \dots,$ $m = 0, 1, \dots, n$. Trước tiên ta sử dụng công thức sai phân hướng tâm để xấp xỉ đạo hàm cấp hai theo x

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}(t_j, x_m) \approx \frac{u(t_j, x_{m+1}) - 2u(t_j, x_m) + u(t_j, x_{m-1})}{\Delta x^2} \approx \frac{u_{j,m+1} - 2u_{j,m} + u_{j,m-1}}{\Delta x^2}$$

Còn để xấp xỉ đạo hàm cấp một theo biến thời gian t, ta xét hai trường hợp. Trước tiên nếu sử dụng công thức sai phân tiến, ta được

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t_j, x_m) \approx \frac{u(t_{j+1}, x_m) - u(t_j, x_m)}{\Delta t} \approx \frac{u_{j+1,m} - u_{j,m}}{\Delta t}$$

Thay vào trong phương trình truyền nhiệt (5.21) ta thu được

$$\frac{u_{j+1,m} - u_{j,m}}{\Delta t} = \gamma \frac{u_{j,m+1} - 2u_{j,m} + u_{j,m-1}}{\Delta x^2}$$

Sau khi rút gọn, ta có phương trình

$$u_{j+1,m} = \mu u_{j,m+1} + (1 - 2\mu)u_{j,m} + \mu u_{j,m-1} \tag{5.24}$$

với $\mu = \dfrac{\gamma \Delta t}{\Delta x^2}$ và $j = 0, 1, 2, \ldots,\ m = 1, 2, \ldots, n - 1$.

Từ điều kiện ban đầu (5.23) ta thu được

$$u_{0,m} = f(x_m) = f_m, \quad m = 1, 2, \ldots, n - 1 \tag{5.25}$$

Tương tự, từ các điều kiện biên (5.22) ta có

$$u_{j,0} = \alpha(t_j) = \alpha_j, \quad u_{j,n} = \beta(t_j) = \beta_j, \quad j = 0, 1, 2, \ldots \tag{5.26}$$

Chú ý rằng các điều kiện biên và điều kiện ban đầu tại hai điểm góc phải tương thích với nhau, nghĩa là:

$$f_0 = f(0) = u(0,0) = \alpha(0) = \alpha_0, \quad f_n = f(a) = u(0,a) = \beta(0) = \beta_0$$

Sơ đồ giải bài toán truyền nhiệt (5.21-5.23) bằng các công thức (5.24-5.26) được gọi là **sơ đồ hiển**. Lý do là chúng ta tính trực tiếp giá trị của hàm tại thơi điểm t_{j+1} thông qua các giá trị của hàm ở thời điểm t_j. Tuy nhiên sơ đồ hiển là ổn định khi ta chọn bước thời gian và bước không gian thoả điều kiện (xem [2] - trang 190)

$$\Delta t \leqslant \frac{\Delta x^2}{2\gamma}, \quad (\mu \leqslant 0.5)$$

Ví dụ, nếu $\gamma = 1$ và bước không gian $\Delta x = 0.1$, thì để sơ đồ hiển ổn định ta phải chọn bước thời gian $\Delta t \leqslant 0.005$.

Bây giờ nếu đặt

$$\mathbf{u}^{(j)} = (u_{j,1}, u_{j,2}, \ldots, u_{j,n-1})^T$$

thì công thức (5.24) được viết lại dưới dạng ma trận

$$\mathbf{u}^{(j+1)} = A\mathbf{u}^{(j)} + B^{(j)}$$

với A là ma trận vuông cấp $n-1$ và $B^{(j)}$ là véc-tơ của $\mathbb{R}^{n-1}$

$$A = \begin{pmatrix} 1-2\mu & \mu & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \mu & 1-2\mu & \mu & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 1-2\mu & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1-2\mu & \mu \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \mu & 1-2\mu \end{pmatrix}, \quad B^{(j)} = \begin{pmatrix} \mu\alpha_j \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \mu\beta_j \end{pmatrix}$$

Chú ý rằng A là ma trận đối xứng và có dạng ba đường chéo. Thuật toán của sơ đồ hiển như sau.

```
def heat_problem_ex(ga, al, be, ff, Dt, Dx, m, n):
    UU = np.zeros((m+1, n+1), dtype=float)
    AA = np.zeros((n-1, n-1), dtype=float)
    BB = np.zeros(n-1, dtype=float)
    mu = ga * Dt / (Dx**2)
    for i in range(0, n):
        UU[0, i] = ff(i*Dx)
    for j in range(n-1):
        for i in range(n-1):
            if i == j:
                AA[i, i] = 1 - 2*mu
            elif abs(i - j) == 1:
                AA[i, j] = mu
                AA[j, i] = mu
    for j in range(1, m+1):
        UU[j, 0] = al(j*Dt)
        UU[j, n] = be(j*Dt)
        BB[0] = mu * UU[j, 0]
        BB[n-2] = mu * UU[j, n]
        for i in range(1, n):
            tmp = 0.0
            for k in range(n-1):
                tmp += AA[i-1, k] * UU[j-1, k+1]
            UU[j, i] = tmp + BB[i-1]
    return UU
```

Ví dụ 5.11: Cho bài toán truyền nhiệt sau:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial^2 x}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \\ u(t,0) = 0,\ u(t,1) = t,\ u(0,x) = \sin \pi x \end{cases}$$

Chọn $\Delta t = 0.02$, $\Delta x = 0.25$, $\mu = 0.32 < 0.5$. Kết quả tính toán cho ta bảng sau:

t_j	$x_0 = 0.00$	$x_1 = 0.25$	$x_2 = 0.50$	$x_3 = 0.75$	$x_4 = 1.00$
0.00	0.0000	0.7071	1.0000	0.7071	0.0000
0.02	0.0000	0.5746	0.8125	0.5810	0.0200
0.04	0.0000	0.4669	0.6623	0.4820	0.0400
0.06	0.0000	0.3800	0.5420	0.4046	0.0600
0.08	0.0000	0.3103	0.4462	0.3447	0.0800
0.10	0.0000	0.2545	0.3702	0.2989	0.1000
0.12	0.0000	0.2101	0.3104	0.2645	0.1200
0.14	0.0000	0.1749	0.2636	0.2393	0.1400
0.16	0.0000	0.1473	0.2275	0.2217	0.1600
0.18	0.0000	0.1258	0.2000	0.2102	0.1800
0.20	0.0000	0.1093	0.1795	0.2037	0.2000

Bây giờ nếu ta sử dụng công thức sai phân lùi để xấp xỉ $\dfrac{\partial u}{\partial t}$:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t_j, x_m) \approx \frac{u(t_j, x_m) - u(t_{j-1}, x_m)}{\Delta t} \approx \frac{u_{j,m} - u_{j-1,m}}{\Delta t}$$

Thay vào phương trình (5.21) cùng với công thức sai phân hướng tâm đối với đạo hàm cấp hai của u theo x, ta được

$$\frac{u_{j+1,m} - u_{j,m}}{\Delta t} = \gamma \frac{u_{j+1,m+1} - 2u_{j+1,m} + u_{j+1,m-1}}{\Delta x^2}$$

Sau khi rút gọn, ta có phương trình

$$-\mu u_{j+1,m+1} + (1 + 2\mu)u_{j+1,m} - \mu u_{j+1,m-1} = u_{j,m} \qquad (5.27)$$

với $\mu = \dfrac{\gamma \Delta t}{\Delta x^2}$ như trong sơ đồ hiển và $j = 0, 1, 2, \ldots,\ m = 1, 2, \ldots, n-1$. Như vậy để xác định được u tại thời điểm t_{j+1} ta phải giải hệ phương trình (5.27). Sơ đồ tính theo cách này được gọi là **sơ đồ ẩn**. Và sơ đồ ẩn luôn ổn định không phụ thuộc vào cách chọn bước thời gian và bước không gian (xem [2]).

Hệ phương trình (5.27) được viết lại dưới dạng ma trận như sau

$$\hat{A}\mathbf{u}^{(j+1)} = \mathbf{u}^{(j)} + B^{(j+1)}.$$

với $\hat{A}$ cũng là ma trận vuông cấp $n-1$ thu được từ A bằng cách thay μ bằng $-\mu$:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1+2\mu & -\mu & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -\mu & 1+2\mu & -\mu & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -\mu & 1+2\mu & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1+2\mu & -\mu \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\mu & 1+2\mu \end{pmatrix}$$

Thuật toán của sơ đồ ẩn như sau.

```
def heat_problem_im(ga, al, be, ff, Dt, Dx, m, n):
    UU = np.zeros((m+1, n+1), dtype=float)
    AA = np.zeros((n-1, n-1), dtype=float)
    BB = np.zeros(n-1, dtype=float)
    mu = ga * Dt / (Dx**2)
    for i in range(0, n):
        UU[0, i] = ff(i*Dx)
    for j in range(n-1):
        for i in range(n-1):
            if i == j:
                AA[i, i] = 1 + 2*mu
            elif abs(i - j) == 1:
                AA[i, j] = -mu
                AA[j, i] = -mu
    for j in range(1, m+1):
        UU[j, 0] = al(j*Dt)
        UU[j, n] = be(j*Dt)
        BB[0] = UU[j-1, 1] + mu * UU[j, 0]
        for i in range(1, n-2):
            BB[i] = UU[j-1, i+1]
        BB[n-2] = UU[j-1, n-1] + mu * UU[j, n]
        XX = tri_diag(AA, BB)
        for i in range(1, n):
            UU[j, i] = XX[i-1]
    return UU
```

Ví dụ 5.12: Xét bài toán truyền nhiệt trong ví dụ 5.11. Cũng chọn $\Delta t = 0.02$, $\Delta x = 0.25$. Kết quả tính toán cho ta bảng sau:

t_j	$x_0 = 0.00$	$x_1 = 0.25$	$x_2 = 0.50$	$x_3 = 0.75$	$x_4 = 1.00$
0.00	0.0000	0.7071	1.0000	0.7071	0.0000
0.02	0.0000	0.5956	0.8430	0.5995	0.0200
0.04	0.0000	0.5021	0.7119	0.5123	0.0400
0.06	0.0000	0.4238	0.6030	0.4417	0.0600
0.08	0.0000	0.3585	0.5128	0.3850	0.0800
0.10	0.0000	0.3041	0.4383	0.3398	0.1000
0.12	0.0000	0.2590	0.3771	0.3042	0.1200
0.14	0.0000	0.2218	0.3272	0.2767	0.1400
0.16	0.0000	0.1912	0.2868	0.2559	0.1600
0.18	0.0000	0.1662	0.2543	0.2407	0.1800
0.20	0.0000	0.1459	0.2285	0.2304	0.2000

5.3.2 PHƯƠNG TRÌNH HYPERBOLIC

Ta xét phương trình sóng của hàm sóng $u(t, x)$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 t} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}, \quad 0 < x < a, \quad t \geqslant 0, \tag{5.28}$$

với vận tốc sóng $c > 0$ là hằng số, thoả điều kiện biên

$$u(t, 0) = \alpha(t), \quad u(t, a) = \beta(t), \quad t \geqslant 0 \tag{5.29}$$

và các điều kiện ban đầu

$$u(0, x) = f(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(0, x) = g(x), \quad 0 \leqslant x \leqslant a \tag{5.30}$$

Tương tự như phương trình truyền nhiệt, ta cũng xét lưới

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots \quad \text{và} \quad 0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n = a$$

với

$$\Delta t = t_{j+1} - t_j, \quad \Delta x = x_{m+1} - x_m = \frac{a}{n}$$

Ta xấp xỉ các đạo hàm cấp hai bằng công thức sai phân hướng tâm:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}(t_j, x_m) \approx \frac{u(t_j, x_{m+1}) - 2u(t_j, x_m) + u(t_j, x_{m-1})}{\Delta x^2} \approx \frac{u_{j,m+1} - 2u_{j,m} + u_{j,m-1}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 t}(t_j, x_m) \approx \frac{u(t_{j+1}, x_m) - 2u(t_j, x_m) + u(t_{j-1}, x_m)}{\Delta t^2} \approx \frac{u_{j+1,m} - 2u_{j,m} + u_{j-1,m}}{\Delta t^2}$$

Thay vào phương trình (5.28)

$$\frac{u_{j+1,m} - 2u_{j,m} + u_{j-1,m}}{\Delta t^2} = c^2 \frac{u_{j,m+1} - 2u_{j,m} + u_{j,m-1}}{\Delta x^2}$$

Cuối cùng

$$u_{j+1,m} = \sigma^2 u_{j,m+1} + 2(1-\sigma^2)u_{j,m} + \sigma^2 u_{j,m-1} - u_{j-1,m} \tag{5.31}$$

với $\sigma = \dfrac{c\Delta t}{\Delta x} > 0$ và $j = 1, 2, \ldots,\ m = 1, 2, \ldots, n-1$.

Điều kiện biên cho ta

$$u_{j,0} = \alpha_j = \alpha(t_j), \quad u_{j,n} = \beta_j = \beta(t_j), \quad j = 0, 1, 2, \ldots \tag{5.32}$$

Trong công thức (5.31) ta thấy để tính giá trị của hàm tại thời điểm t_{j+1} ta phải biết giá trị của hàm tại các thời điểm t_j và t_{j-1}. Do đó ta cần biết giá trị của hàm tại thời điểm ban đầu $t_0 = 0$ và $t_1 = \Delta t$ để tính toán cho các thời điểm tiếp theo. Tại $t_0 = 0$ ta có

$$u_{0,m} = f_m = f(x_m) \tag{5.33}$$

Còn tại thời điểm $t_1 = \Delta t$ ta có thể sử dụng điều kiện ban đầu thứ hai và công thức sai phân tiến

$$g_m = \frac{\partial u}{\partial t}(0, x_m) \approx \frac{u(\Delta t, x_m) - u(0, x_m)}{\Delta t} \approx \frac{u_{1,m} - f_m}{\Delta t}$$

Từ đây ta thu được $u_{1,m} = f_m + g_m\Delta t$. Tuy nhiên xấp xỉ này có độ chính xác không cao. Để thu được xấp xỉ có độ chính xác cao hơn, ta sử dụng khai triển Taylor

$$\begin{aligned}\frac{u(\Delta t, x_m) - u(0, x_m)}{\Delta t} &= \frac{\partial u}{\partial t}(0, x_m) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial^2 t}(0, x_m)\Delta t + O(\Delta t^2)\\ &= \frac{\partial u}{\partial t}(0, x_m) + \frac{c^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}(0, x_m)\Delta t + O(\Delta t^2)\end{aligned}$$

do hàm $u(t, x)$ thoả phương trình sóng (5.28). Vì vậy

$$\begin{aligned}u_{1,m} &= u(\Delta t, x_m) \approx u(0, x_m) + \frac{\partial u}{\partial t}(0, x_m)\Delta t + \frac{c^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}(0, x_m)\Delta t^2\\ &= f(x_m) + g(x_m)\Delta t + \frac{c^2}{2} f''(x_m)\Delta t^2\\ &= f_m + g_m\Delta t + \frac{c^2}{2}\cdot\frac{f_{m+1} - 2f_m + f_{m-1}}{\Delta x^2}\cdot\Delta t^2\end{aligned}$$

Cuối cùng ta được

$$u_{1,m} = \frac{1}{2}\sigma^2 f_{m+1} + (1-\sigma^2) f_m + \frac{1}{2}\sigma^2 f_{m-1} + g_m \Delta t \tag{5.34}$$

Bây giờ ta viết dạng ma trận của hệ phương trình (5.31) với các điều kiện biên (5.32) và các điều kiện ban đầu (5.33), (5.34).

$$\mathbf{u}^{(j+1)} = A\mathbf{u}^{(j)} - \mathbf{u}^{(j-11)} + B^{(j)}, \quad j = 1, 2, 3, \ldots$$

với

$$A = \begin{pmatrix} 2(1-\sigma^2) & \sigma^2 & \cdots & 0 & 0 \\ \sigma^2 & 2(1-\sigma^2) & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \sigma^2 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 2(1-\sigma^2) & \sigma^2 \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma^2 & 2(1-\sigma^2) \end{pmatrix}, \quad B^{(j)} = \begin{pmatrix} \sigma^2 \alpha_j \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \sigma^2 \beta_j \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{f}, \quad \mathbf{u}^{(1)} = \frac{1}{2} A\mathbf{u}^{(0)} + \mathbf{g}\Delta t + \frac{1}{2} B^{(0)}$$

Thuật toán của phương trình sóng như sau.

```
def wave_problem(cc, al, be, ff, gg, Dt, Dx, m, n):
    si1 = cc * Dt / Dx; si2 = si1**2
    si3 = 2.0 * (1.0 - si2)
    UU = np.zeros((m + 1, n + 1), dtype=float)
    for j in range(1, m+1):
        UU[j, 0] = al(j*Dt)
        UU[j, n] = be(j*Dt)
    for i in range(1, n):
        UU[0, i] = ff(i*Dx)
    for i in range(1, n):
        UU[1, i] = 0.5 * (si2 * UU[0, i-1] +
        si3 * UU[0, i] + si2 * UU[0, i+1]) +
        gg(i * Dx) * Dt
    for j in range(2, m+1):
        for i in range(1, n):
            UU[j, i] = si2 * UU[j-1, i-1] +
            si3 * UU[j-1, i] + si2 * UU[j-1, i+1] -
            UU[j-2, i]
    return UU
```

Ví dụ 5.13: Xét bài toán

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 t} = \frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}, \quad 0 < x < 1, \quad t \geqslant 0,$$

thoả các điều kiện

$$u(t,0) = 0, \quad u(t,1) = 0, \quad u(0,x) = x^2(1-x)^2, \quad \frac{\partial u}{\partial t}(0,x) = 0$$

Ta có $c = 1$. Chọn $\Delta t = 0.2$, $\Delta x = 0.25$. Khi đó $\sigma = 0.8$. Kết quả tính toán cho ta bảng sau

t_j	$x_0 = 0.00$	$x_1 = 0.25$	$x_2 = 0.50$	$x_3 = 0.75$	$x_4 = 1.00$
0.00	0.0000	0.0352	0.0625	0.0352	0.0000
0.20	0.0000	0.0327	0.0450	0.0327	0.0000
0.40	0.0000	0.0172	0.0117	0.0172	0.0000
0.60	0.0000	−0.0128	−0.0146	−0.0128	0.0000
0.80	0.0000	−0.0357	−0.0386	−0.0357	0.0000
1.00	0.0000	−0.0376	−0.0589	−0.0376	0.0000
1.20	0.0000	−0.0291	−0.0520	−0.0291	0.0000
1.40	0.0000	−0.0166	−0.0157	−0.0166	0.0000
1.60	0.0000	0.0071	0.0195	0.0071	0.0000
1.80	0.0000	0.0341	0.0388	0.0341	0.0000
2.00	0.0000	0.0423	0.0522	0.0423	0.0000

5.3.3 PHƯƠNG TRÌNH ELLIPTIC

Trong phần này ta chỉ xét bài toán đơn giản nhất: phương trình Poisson trong hình chữ nhật

$$\begin{cases} -\Delta u = -\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial^2 x} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial^2 y}\right) = f(x,y), & (x,y) \in \Omega \\ u(x,y) = g(x,y), & (x,y) \in \partial\Omega \end{cases} \tag{5.35}$$

với $\Omega = \{a < x < b,\ c < y < d\}$ là hình chữ nhật và $\partial\Omega$ là biên của Ω. Chia đoạn $[a,b]$ thành m đoạn với bước $\Delta x = \dfrac{b-a}{m}$ và chia đoạn $[c,d]$ thành n đoạn với bước $\Delta y = \dfrac{d-c}{n}$. Khi đó bên trong miền Ω sẽ có $(m-1)(n-1)$ điểm nút $(x_i, y_j) = (a + i\Delta x, b + j\Delta y)$ với $i = 1, 2, \ldots, m$, $j = 1, 2, \ldots, n$. Ngoài ra còn có $2m + 2n$ điểm nút trên biên $(x_0, y_j) = (a, y_j)$, $(x_m, y_j) = (b, y_j)$, $(x_i, y_0) = (x_i, c)$ và $(x_i, y_n) = (x_i, d)$.

Tại các điểm nút bên trong miền, ta xấp xỉ các đạo hàm cấp hai bằng công thức sai phân hướng tâm

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}(x_i, y_j) \approx \frac{u(x_{i-1}, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_{i+1}, y_j)}{\Delta x^2} \approx \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 y}(x_i, y_j) \approx \frac{u(x_i, y_{j-1}) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j+1})}{\Delta y^2} \approx \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{\Delta y^2}$$

Thay các công thức này vào phương trình (5.35) ta được

$$-\frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2} - \approx \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{\Delta y^2} = f_{i,j} \qquad (5.36)$$

với $i = 1, 2, \ldots, m-1$, $j = 1, 2, \ldots, n-1$ và $f_{i,j} = f(x_i, y_j)$. Nếu ta đặt $\rho = \dfrac{\Delta x}{\Delta y}$ thì hệ phương trình (5.36) trở thành

$$2(1+\rho^2)u_{i,j} - (u_{i-1,j} + u_{i+1,j}) - \rho^2(u_{i,j-1} + u_{i,j+1}) = \Delta x^2 f_{i,j} \qquad (5.37)$$

với $i = 1, 2, \ldots, m-1$, $j = 1, 2, \ldots, n-1$. Người ta thường chọn Δx và Δy sao cho ρ gần bằng 1, nghĩa là, $\Delta x \approx \Delta y$. Ngoài ra, từ điều kiện biên ta thu được

$$\begin{cases} u_{i,0} = g_{i,0},\ u_{i,n} = g_{i,n}, & i = 1, 2, \ldots, m-1 \\ u_{0,j} = g_{0,j},\ u_{m,j} = g_{m,j}, & j = 1, 2, \ldots, n-1 \end{cases} \qquad (5.38)$$

Hệ (5.37) với điều kiện biên (5.38) là hệ phương trình tuyến tính gồm $(m-1)(n-1)$ phương trình với $(m-1)(n-1)$ ẩn $u_{i,j}$, $i = 1, 2, \ldots, m-1$, $j = 1, 2, \ldots, n-1$. Thông thường ta sẽ sắp xếp các phần tử $u_{i,j}$ của véc-tơ nghiệm $\mathbf{w}$ theo thứ tự từ trái sang phải và sau đó là từ dưới lên trên. Cụ thể

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &= (w_1, w_2, \ldots, w_{(m-1)(n-1)})^T \\ &= (u_{1,1}, u_{2,1}, \ldots, u_{m-1,1}, u_{1,2}, u_{2,2}, \ldots, u_{m-1,2}, \ldots, u_{m-1,n-1})^T \end{aligned}$$

Ta xét ví dụ sau

Ví dụ 5.14: Xét bài toán tìm $u(x, y)$ thoả

$$\begin{cases} -\Delta u = \pi^2 y \sin(\pi x), & (x, y) \in \Omega = \{0 < x, y < 1\} \\ u(x, 0) = u(0, y) = u(1, y) = 0,\ u(x, 1) = \sin(\pi x) \end{cases}$$

Chọn lưới với $\Delta x = \Delta y = \frac{1}{4}$. Khi đó ta có $m = n = 4$ và trên lưới có 9 điểm nút bên trong miền, tương ứng với các giá trị cần tìm tạo thành véc-tơ

$$\begin{aligned} \mathbf{w} &= (w_1, w_2, w_3, w_4, w_5, w_6, w_7, w_8, w_9)^T \\ &= (u_{1,1}, u_{2,1}, u_{3,1}, u_{1,2}, u_{2,2}, u_{3,2}, u_{1,3}, u_{2,3}, u_{3,3})^T \end{aligned}$$

Trong trường hợp này $\rho = 1$ và hệ phương trình (5.37) có dạng

$$\begin{cases} 4u_{1,1} - u_{0,1} - u_{1,0} - u_{1,2} - u_{2,1} = \frac{1}{16} f_{1,1} \\ 4u_{2,1} - u_{1,1} - u_{2,0} - u_{2,2} - u_{3,1} = \frac{1}{16} f_{2,1} \\ 4u_{3,1} - u_{2,1} - u_{3,0} - u_{3,2} - u_{4,1} = \frac{1}{16} f_{3,1} \\ 4u_{1,2} - u_{0,2} - u_{1,1} - u_{1,3} - u_{2,2} = \frac{1}{16} f_{1,2} \\ 4u_{2,2} - u_{1,2} - u_{2,1} - u_{2,3} - u_{3,2} = \frac{1}{16} f_{2,2} \\ 4u_{3,2} - u_{2,2} - u_{3,1} - u_{3,3} - u_{4,2} = \frac{1}{16} f_{3,2} \\ 4u_{1,3} - u_{0,3} - u_{1,2} - u_{1,4} - u_{2,3} = \frac{1}{16} f_{1,3} \\ 4u_{2,3} - u_{1,3} - u_{2,2} - u_{2,4} - u_{3,3} = \frac{1}{16} f_{2,3} \\ 4u_{3,3} - u_{2,3} - u_{3,2} - u_{3,4} - u_{4,3} = \frac{1}{16} f_{3,3} \end{cases} \tag{5.39}$$

Chú ý rằng các giá trị của hàm tại bốn góc của Ω không xuất hiện trong hệ (5.39). Từ các điều kiện biên ta thu được

$$\begin{aligned} &u_{0,1} = 0,\ u_{1,0} = 0,\ u_{2,0} = 0,\ u_{3,0} = 0,\ u_{4,1} = 0, \\ &u_{0,2} = 0,\ u_{1,0} = 0,\ u_{4,2} = 0,\ u_{0,3} = 0,\ u_{4,3} = 0 \\ &u_{1,4} = \sin\frac{\pi}{4} = \frac{\sqrt{2}}{2},\ u_{2,4} = \sin\frac{\pi}{2} = 1,\ u_{3,4} = \sin\frac{3\pi}{4} = \frac{\sqrt{2}}{2} \end{aligned}$$

và do $f(x, y) = \pi^2 y \sin(\pi x)$ nên

$$\frac{1}{16} f_{i,j} = \frac{1}{16}\pi^2 \frac{j}{4} \sin\frac{i\pi}{4} = \frac{j\pi^2}{64} \sin\frac{i\pi}{4}$$

Hệ (5.39) cùng với các điều kiện biên được viết lại dưới dạng ma trận $A\mathbf{w} = B$ với

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0.1090 \\ 0.1542 \\ 0.1090 \\ 0.2181 \\ 0.3084 \\ 0.2181 \\ 1.0342 \\ 1.4626 \\ 1.0342 \end{pmatrix}$$

Giải hệ phương trình trên ta đi đến kết quả

$$\begin{array}{lll} u_{1,1} = 0.1831 & u_{2,1} = 0.3643 & u_{3,1} = 0.5409 \\ u_{1,2} = 0.2589 & u_{2,2} = 0.5152 & u_{3,2} = 0.7649 \\ u_{1,3} = 0.1831 & u_{2,3} = 0.3643 & u_{3,3} = 0.5409 \end{array}$$

BÀI TẬP

Câu 1. Sử dụng lần lượt các công thức Euler, Euler cải tiến (RK2) và Runge-Kutta cấp bốn (RK4) xấp xỉ nghiệm của các bài toán Cauchy sau và so sánh với nghiệm chính xác.

(a) $\begin{cases} y' = \dfrac{y}{t} - 1,\ 1 \leqslant t \leqslant 2,\ y(1) = 1, & \text{với } h = 0.1 \\ \text{Nghiệm chính xác: } y = t(1 - \ln t) \end{cases}$

(b) $\begin{cases} y' = 2ty + 2t\,\mathrm{e}^{t^2},\ 0 \leqslant t \leqslant 1,\ y(0) = 2, & \text{với } h = 0.1 \\ \text{Nghiệm chính xác: } y = (2 + t^2)\,\mathrm{e}^{t^2} \end{cases}$

(c) $\begin{cases} y'\cos t - y\sin t = 2t,\ 0 \leqslant t \leqslant 1,\ y(0) = 0, & \text{với } h = 0.1 \\ \text{Nghiệm chính xác: } y = \dfrac{t^2}{\cos t} \end{cases}$

(d) $\begin{cases} y' = \dfrac{t^3 + 2y^3}{3ty^2},\ 1 \leqslant t \leqslant 2,\ y(1) = 2, & \text{với } h = 0.1 \\ \text{Nghiệm chính xác: } y = \sqrt[3]{t^3 + 7t^2} \end{cases}$

Câu 2. Xét bài toán Cauchy $\begin{cases} y' = \dfrac{2y}{t} + t^2\,\mathrm{e}^t,\ 1 \leqslant t \leqslant 2, \\ y(1) = 0 \end{cases}$ có nghiệm chính xác $x^2(\mathrm{e}^x - \mathrm{e})$.

(a) Sử dụng công thức Runge-Kutta cấp bốn với $h = 0.1$ xấp xỉ hàm $y(t)$ trong $[1, 2]$ và so sánh với nghiệm chính xác.

(b) Sử dụng kết quả xấp xỉ của câu (a) và công thức nội suy Newton tiến bậc ba để xấp xỉ giá trị của hàm tại các điểm sau và so sánh với giá trị chính xác.

(i) $y(1.04)$ (ii) $y(1.32)$ (iii) $y(1.66)$

(c) Cũng sử dụng kết quả xấp xỉ của câu (a) và công thức Simpson mở rộng để xấp xỉ tích phân $I = \int_1^2 y(t)dt$ và so sánh với giá trị chính xác.

Câu 3. Sử dụng các công thức Euler, Euler cải tiến và Runge-Kutta cấp bốn hãy xấp xỉ giá trị của hàm tại $t_1 = t_0 + h$ với $h = 0.2$ đối với các hệ phương trình sau:

(a) $\begin{cases} x'(t) = x - 2y + 1 \\ y'(t) = 2x + y + t \quad t \geqslant 1 \\ x(1) = 1.5,\ y(1) = 1.2 \end{cases}$ (b) $\begin{cases} x'(t) = \sin(x + y) \\ y'(t) = \cos(x - y) \quad t \geqslant 0 \\ x(0) = 0.25,\ y(0) = 0.35 \end{cases}$

(c) $\begin{cases} x'(t) = x\,\mathrm{e}^{-t} + 2y \\ y'(t) = 2x + y\,\mathrm{e}^{-t} \quad t \geqslant 0 \\ x(0) = 0.2,\ y(0) = 0.4 \end{cases}$ (d) $\begin{cases} x'(t) = x^2 + y^2 + t \\ y'(t) = x^2 - y^2 - t \quad t \geqslant 1 \\ x(1) = 1.2,\ y(1) = 0.7 \end{cases}$

Câu 4. Cho hệ: $\begin{cases} x'(t) = x + y - \cos t \quad 0 \leqslant t \leqslant 1 \\ y'(t) = -2x - y + \sin t + \cos t \\ x(0) = 1,\ y(0) = -2 \end{cases}$ có nghiệm chính xác $x(t) = (1 - t)\cos t - \sin t,\ y(t) = (t - 2)\cos t + t\sin t$. Sử dụng công thức Runge-Kutta cấp bốn xấp xỉ nghiệm của hệ phương trình trong $[0, 1]$ với bước $h = 0.1$ và so sánh với nghiệm chính xác.

Câu 5. Đối với các bài toán sau, sử dụng công thức Euler cải tiến, tìm nghiệm gần đúng của $x(t)$ tại các điểm t_1 và t_2 với bước h đã cho.

(a) $\begin{cases} x'' - 4x' + 3x = \ln t,\ t \geqslant 1 \\ x(1) = 0.24,\ x'(1) = 0.15 \end{cases}$, $h = 0.1,\ t_1 = 1.1,\ t_2 = 1.2$.

(b) $\begin{cases} x'' = tx + 2x' + 1,\ t \geqslant 0 \\ x(0) = 0,\ x'(1) = 1 \end{cases}$, $h = 0.2,\ t_1 = 0.2,\ t_2 = 0.4$.

Câu 6. Xét bài toán $\begin{cases} 3x'(t)x''(t) = 2x(t),\ 0 \leqslant t \leqslant 1 \\ x(0) = x'(0) = 1 \end{cases}$ có nghiệm chính xác $x = \left(1 + \dfrac{t}{3}\right)^3$. Sử dụng công thức Runge-Kutta cấp bốn xấp xỉ $x(t)$ trong $[0, 1]$ với bước $h = 0.1$ và so sánh với nghiệm chính xác.

Câu 7. Bài toán biên $\begin{cases} y'' = -2y' - 2y + 2t,\ t \in [0, 1] \\ y(0) = 0,\ y(1) = \mathrm{e}^{-1} = 0.36787944 \end{cases}$ có nghiệm chính xác $y = \mathrm{e}^{-t}\left(\cos t + \dfrac{1 - \cos 1}{\sin 1}\sin t\right) + t - 1$. Sử dụng hai phương pháp sai phân hữu hạn và phương pháp bắn để xấp xỉ nghiệm của bài toán với bước h lần lượt là $h = 0.25$ và $h = 0.1$. So sánh với giá trị chính xác.

Câu 8. Sử dụng phương pháp sai phân hữu hạn, hãy xấp xỉ nghiệm của các bài toán biên sau với bước h đã cho:

(a) $\begin{cases} y'' = 4y - 4t^2, \ t \in [0,1] \\ y(0) = 0, \ y(1) = 1 \end{cases}$ $\quad h = 0.25$

(b) $\begin{cases} y'' + ty' - 8y = 2\ln t, \ t \in [1,2] \\ y(1) = 0, \ y(2) = 0 \end{cases}$ $\quad h = 0.2$

(c) $\begin{cases} y'' - (1+t^2)y = 1, \ t \in [2,3] \\ y(2) = 1, \ y(3) = 0 \end{cases}$ $\quad h = 0.1$

(d) $\begin{cases} y'' + ty' - 4t^2y = t\,e^{-t}, \ t \in [0,1] \\ y(0) = 0.2, \ y(1) = 0.8 \end{cases}$ $\quad h = 0.1$

Câu 9. Lặp lại các bài toán trong Câu 8 với phương pháp bắn.

Câu 10. Vị trí x của một vật thể rơi tự do được cho bởi phương trình vi phân

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{c}{m} \cdot \frac{dx}{dt} - g = 0$$

với $c = 12.5kg/s$, $m = 70kg$ và $g = 9.81m/s^2$. Sử dụng phương pháp bắn để tìm vị trí và vận tốc của vật thể nếu biết $x(0) = 0m$ và $x(12) = 500m$.

Câu 11. Giải bài toán sau

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial^2 x}, \quad u(t,0) = u(t,1) = 0, \quad u(0,x) = f(x), \quad 0 \leqslant x \leqslant 1$$

với $f(x) = \begin{cases} 2\left|x - \frac{1}{6}\right| - \frac{1}{3} & 0 \leqslant x \leqslant \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} \leqslant x \leqslant \frac{2}{3} \\ \frac{1}{2} - 3\left|x - \frac{5}{6}\right| & \frac{2}{3} \leqslant x \leqslant 1 \end{cases}$ sử dụng: (a) Sơ đồ hiển, (b) Sơ đồ ẩn. Chọn bước không gian $\Delta x = 0.1$ và $\Delta x = 0.05$ và chọn bước thời gian thích hợp.

Câu 12. (a) Hãy thiết lập sơ đồ hiển đối với bài toán truyền nhiệt sau

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} + s(x), \quad u(t,0) = u(t,1) = 0, \quad u(0,x) = f(x), \quad 0 \leqslant x \leqslant 1$$

với $s(x)$ là nguồn nhiệt.

(b) Giải bài toán với các số liệu sau

$$\gamma = \frac{1}{6}, \quad s(x) = x(1-x)(10-22x), \quad f(x) = \begin{cases} 2\left|x - \frac{1}{6}\right| - \frac{1}{3} & 0 \leqslant x \leqslant \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} \leqslant x \leqslant \frac{2}{3} \\ \frac{1}{2} - 3\left|x - \frac{5}{6}\right| & \frac{2}{3} \leqslant x \leqslant 1 \end{cases}$$

Chọn bước không gian $\Delta x = 0.1$ và $\Delta x = 0.05$ và chọn bước thời gian thích hợp.

(c) Hãy thiết lập sơ đồ ẩn đối với bài toán trên. So sánh các kết quả tìm được.

Câu 13. Cho bài toán

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 t} = 64\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} + s(x), \quad u(t,0) = u(t,3) = 0$$

Hãy giải bài toán với các điều kiện ban đầu sau:

(a) $u(0,x) = \begin{cases} 1 - 2|x-1|, & \frac{1}{2} \leqslant x \leqslant \frac{3}{2} \\ 0, & x \notin \left[\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right] \end{cases}, \quad u_t(0,x) = 0$

(b) $u(0,x) = 0, \quad u_t(0,x) = \begin{cases} 1 - 2|x-1|, & \frac{1}{2} \leqslant x \leqslant \frac{3}{2} \\ 0, & x \notin \left[\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right] \end{cases}$

Câu 14. Giải bài toán Dirichlet

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y} = 0, \quad u(x,0) = \sin^3 x, \quad u(x,\pi) = u(0,y) = u(\pi,y) = 0$$

với $\Delta x = \Delta y = \frac{\pi}{4}$ và $\Delta x = \Delta y = \frac{\pi}{8}$.

Câu 15. Giải bài toán

$$-\left(\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y}\right) = xy, \quad u(x,0) = u(x,1) = u(0,y) = u(1,y) = 0$$

với $\Delta x = \Delta y = 0.25$ và $\Delta x = \Delta y = 0.1$.

CHỈ DẪN VÀ TRẢ LỜI

CHỈ DẪN VÀ TRẢ LỜI BÀI TẬP CHƯƠNG 1

1 $V = 41.60866333\ (m^3)$, $\Delta_V \approx 0.0962\ (m^3)$, $\delta_V \approx 0.24\%$

2 (a) $\Delta_F = 0.018918$

(b) $\Delta_F = 2.5305$

(c) $\Delta_F \approx 0.00509$

3 Ta có:

(a) $[0,1]$ và $[1,2]$

(b) $[0,1]$

(c) $[0,1]$ và $[1,2]$

(d) $[-3,-2]$, $[-1,0]$ và $[2,3]$

(e) $x = 0$ và $[0.5;1]$

(f) $[-2,-1]$ và $[3,4]$

(g) $[-1,0]$

(h) $[0.2,1]$

4 (a) $m = 12$, $\Delta = 0.0152$.

(b) $m = 2$, $\Delta = 0.0053$.

(c) $m = 1 - 4\cos(2) \approx 2.664587$, $\Delta = 0.0036$.

5 (a) $x_5 = \dfrac{91}{64}$, $\Delta_{x_5} = \dfrac{1}{64} = 0.015625$. Sai số theo công thức đánh giá sai số tổng quát: $m = 7$, $\Delta_{x_5} = 0.0117$.

(b) $x_5 = 0.4875$, $\Delta_{x_5} = \dfrac{0.8}{64} = 0.0125$. Sai số theo công thức đánh giá sai số tổng quát: $m = 2\sqrt{6}$, $\Delta_{x_5} = 0.0012$.

6 (a) $x = \sqrt[3]{3x^2+5}$, $q = 0.1984251315$, $p \approx x_4 = 3.430986278$

(b) $x = \sqrt[3]{x+1}$, $q = 0.2099868417$, $p \approx x_3 = 1.324939363$ %item $x = \dfrac{x^2 - e^x + 2}{3}$, $q = \dfrac{1}{3}$, $p \approx x_4 = 0.2572656364$

7 (a) $p \in [2.6, 2.8]$, $q = 0.568958$, $n = 11$, $x_{11} = 2.69064136$

(b) $p \in [0.8, 1.0]$, $q = 0.475945$, $n = 7$, $x_7 = 0.90996735$

(c) $p \in [0.4, 0.6]$, $q = 0.875023$, $n = 67$, $x_{67} = 0.44806306$

(d) $p \in [0.6, 0.8]$, $q = 0.130347$, $n = 2$, $x_2 = 0.70479592$

8 (a) $x_0 = 2$, $m = 0.68876626$, $p = 1.82938372 \pm 0.68 \times 10^{-6}$

(b) $x_0 = 1.3$, $m = 0.15852901$, $p = 1.39774848 \pm 0.64 \times 10^{-9}$

(c) Trong $[2, 3]$: $x_0 = 2$, $m = 3.27332655$, $p = 2.37068706 \pm 0.38 \times 10^{-6}$
Trong $[3.5, 4]$: $x_0 = 4$, $m = 10.69000787$, $p = 3.72211282 \pm 0.77 \times 10^{-7}$

(d) Trong $[1, 2]$: $x_0 = 1$, $m = 0.5$, $p = 1.41239117 \pm 0.1 \times 10^{-12}$
Trong $[3, 4]$: $x_0 = 3$, $m = 1.66666667$, $p = 3.05710355 \pm 0.1 \times 10^{-12}$

(e) Trong $[0.5, 1]$: $x_0 = 1$, $m = 1.35127873$, $p = 0.91000757 \pm 0.75 \times 10^{-9}$
Trong $[3, 5]$: $x_0 = 5$, $m = 2.08553692$, $p = 3.73307903 \pm 0.48 \times 10^{-8}$

(f) Trong $[0, 1]$: $x_0 = 0$, $m = 0.90818175$, $p = 0.58853274 \pm 0.11 \times 10^{-9}$
Trong $[3, 4]$: $x_0 = 3$, $m = 0.63532798$, $p = 3.09636396 \pm 0.29 \times 10^{-7}$
Trong $[6, 7]$: $x_0 = 6$, $m = 0.75481414$, $p = 6.28504900 \pm 0.36 \times 10^{-6}$

9 (a) $n = 6$, $p = 1.82938347 \pm 5.24 \times 10^{-5}$

(b) $n = 8$, $p = 1.39774851 \pm 2.05 \times 10^{-5}$

(c) Trong $[2, 3]$: $n = 5$, $p = 2.37068691 \pm 1.28 \times 10^{-5}$
Trong $[3, 4]$: $n = 7$, $p = 3.72211277 \pm 1.76 \times 10^{-6}$

(d) Trong $[1, 2]$: $n = 7$, $p = 1.41239118 \pm 1.30 \times 10^{-5}$
Trong $[e, 4]$: $n = 7$, $p = 3.05710355 \pm 4.27 \times 10^{-7}$

(e) Trong $[0, 1]$: $n = 6$, $p = 0.91000757 \pm 2.62 \times 10^{-6}$
Trong $[3, 5]$: $n = 10$, $p = 3.73307903 \pm 5.20 \times 10^{-6}$

(f) Trong $[0, 1]$: $n = 6$, $p = 0.58853274 \pm 5.62 \times 10^{-6}$
Trong $[3, 4]$: $n = 5$, $p = 3.09636393 \pm 4.28 \times 10^{-7}$
Trong $[6, 7]$: $n = 5$, $p = 6.28504927 \pm 0.95 \times 10^{-7}$

10 (a) $x_0 = 0.0$, $x_1 = 0.5$, $x_2 = 1.0 \Rightarrow x_6 = 1.15417$.
$x_0 = -3.0$, $x_1 = -2.5$, $x_2 = -2.0 \Rightarrow x_8 = -0.577086 + 1.999771j$
$x_0 = 3.0$, $x_1 = 3.5$, $x_2 = 4.0 \Rightarrow x_{10} = -0.577086 - 1.999771j$

(b) $x_0 = 1.0$, $x_1 = 1.5$, $x_2 = 2.0 \Rightarrow x_6 = 1.625932$.
$x_0 = -3.0$, $x_1 = -2.5$, $x_2 = -2.0 \Rightarrow x_6 = -2.331366$.
$x_0 = -1.0$, $x_1 = -0.5$, $x_2 = 0.0 \Rightarrow x_8 = -0.147283 + 1.249461j$.
$x_0 = 3.0$, $x_1 = 3.5$, $x_2 = 4.0 \Rightarrow x_{12} = -0.147283 - 1.249461j$.

11 Ta có: $f(h) = L\left[r^2 \arccos\dfrac{r-h}{r} - (r-h)\sqrt{2rh - h^2}\right] - V$ với $0 < h < 2r$.
Sử dụng phương pháp dây cung, ta được nghiệm gần đúng sau 7 lần lặp: $h \approx 0.74001522$ với sai số 1.03×10^{-8}.

12 $m = 75.20954 \pm 0.88 \times 10^{-4} (kg)$

13 Thay các giá trị đã biết vào phương trình, ta được

$$1000 = 2200 \ln\frac{160000}{160000 - 2680t} - 9.8t$$

$$\Leftrightarrow f(t) = 1000 + 2200 \ln(1 - 0.01675t) + 9.8t = 0$$

Bằng vài phép toán đơn giản, ta có khoảng cách ly nghiệm $[25, 27]$. Hơn nữa

$$f'(t) = 9.8 - \frac{36.85}{1 - 0.01675t} < 0, \quad \forall x \in [25, 27]$$

Sử dụng thuật toán Newton với $t_0 = 25$ và sai số nhỏ hơn 10^{-6} ta thu được: $t_3 = 25.94239298\ (s)$ là thời điểm để cho $v = 1000\ m/s$.

14 Từ công thức (1.20) ta thu được phương trình bậc ba đối với ν:

$$p(t)\nu^3 - [bp(t) + RT(t)]\nu^2 + a\nu - ab = 0$$

Ta có thể sử dụng thuật toán Muler cho đa thức bậc ba. Chương trình Python như sau

```
import math
import numpy as np
import numan as na

R = 0.082054
a = 1.360
b = 0.03183

def ap_suat(t):
    y = math.exp(-t / 1440.0)
    return y

def nhiet_do(t):
    y = 400.0 + 225 * math.cos(math.pi * t / 720.0)
    return y

N = 61
nu = np.zeros(N)
for i in range(N):
    def f(t):
        y = ap_suat(i) * t ** 3 - (ap_suat(i) * b +
        R * nhiet_do(i)) * t ** 2 + a * t - a * b
        return y
    nu[i] = na.muller_eps(f, 50.0, 51.0, 52.0, 10**(-8))

print(nu)
```

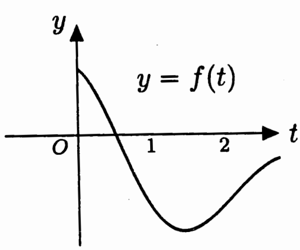
Kết quả cho trong bảng sau:

t(phút)	$\nu(t)$	t(phút)	$\nu(t)$	t(phút)	$\nu(t)$	t(phút)	$\nu(t)$
0	51.2891	16	51.8166	32	52.2577	48	52.6100
1	51.3245	17	51.8467	33	52.2823	49	52.6290
2	51.3597	18	51.8765	34	52.3066	50	52.6477
3	51.3944	19	51.9059	35	52.3305	51	52.6660
4	51.4289	20	51.9351	36	52.3542	52	52.6840
5	51.4630	21	51.9638	37	52.3774	53	52.7016
6	51.4969	22	51.9922	38	52.4003	54	52.7189
7	51.5303	23	52.0203	39	52.4229	55	52.7358
8	51.5635	24	52.0481	40	52.4451	56	52.7523
9	51.5963	25	52.0755	41	52.4669	57	52.7685
10	51.6288	26	52.1025	42	52.4884	58	52.7843
11	51.6609	27	52.1293	43	52.5096	59	52.7998
12	51.6927	28	52.1556	44	52.5304	60	52.8149
13	51.7242	29	52.1817	45	52.5508		
14	51.7553	30	52.2073	46	52.5709		
15	51.7861	31	52.2327	47	52.5906		

15 Khi $u = 4$ ta có phương trình:

$$4 = 10\,e^{-0.5t}\cos 2t \Leftrightarrow f(t) = e^{-0.5t}\cos 2t - 0.4 = 0$$

Đồ thị của $f(t)$ trong $[0, 3]$ như hình vẽ. Sử dụng phương pháp Newton



với $t_0 = 0$ và sai số $< 10^{-5}$, ta có kết quả: khi $u = 4$ thì $t = 0.513652$.

CHỈ DẪN VÀ TRẢ LỜI BÀI TẬP CHƯƠNG 2

1 (a) $x_1 = -0.833333,\ x_2 = 1.083333,\ x_3 = 0.416667.$

(b) $x_1 = 2.763557,\ x_2 = -0.587134,\ x_3 = -1.142683.$

(c) $x_1 = 0.807692$, $x_2 = 0.0$, $x_3 = -0.461538$, $x_4 = 0.884615$.

2 Từ các điều kiện ta thu được hệ phương trình: $a + b = c + d$, $b = 1$, $2c + d = 1$ và $a + b = 4$. Nghiệm của hệ là: $a = 3$, $b = 1$, $c = -3$ và $d = 7$.

3 Ta sử dụng công thức Doolittle. Sinh viên tự làm cho trường hợp công thức Crout.

(a) $L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 3 & -1 & 1 \end{bmatrix}$, $U = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$

(b) $L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ 0.25 & 2.1667 & 1 \end{bmatrix}$, $U = \begin{bmatrix} 4 & 3 & 2 \\ 0 & 1.5 & 0 \\ 0 & 0 & 1.5 \end{bmatrix}$

(c) $L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$, $U = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$

(d) $L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.3333 & 1 & 0 & 0 \\ 0.6667 & -0.1429 & 1 & 0 \\ 0.6667 & 0.2857 & 0.0588 & 1 \end{bmatrix}$

$U = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 2.3333 & 0.6667 & 4 \\ 0 & 0 & 2.4286 & 1.5714 \\ 0 & 0 & 0 & 1.7647 \end{bmatrix}$

4 (a) $\Delta_1 = 2 > 0$, $\Delta_2 = 2m - 1 > 0 \Rightarrow m > 0.5$, $\Delta_3 = 3m - 6 > 0 \Rightarrow m > 2$. Kết hợp các điều kiện: $m > 2$.

(b) $\Delta_1 = 3 > 0$, $\Delta_2 = 15 - m^2 > 0 \Rightarrow -\sqrt{15} < m < \sqrt{15}$, $\Delta_3 = 97 + 4m - 8m^2 > 0 \Rightarrow -3.241 < m < 3.741$. Kết hợp các điều kiện: $-3.241 < m < 3.741$.

(c) $\Delta_1 = 3 > 0$, $\Delta_2 = 2 > 0$, $\Delta_3 = -6m^2 + 24m - 13 > 0 \Rightarrow 0.646 < m < 3.354$.

(d) $\Delta_1 = 2 > 0$, $\Delta_2 = 6 - 3m > 0 \Rightarrow m < 2$, $\Delta_3 = 2m^2 - 27m + 46 > 0 \Rightarrow m < 2$ hoặc $m > 11.5$. Kết hợp các điều kiện: $m < 2$.

5 (a) $\Delta_1 = 1,\ \Delta_2 = 1,\ \Delta_3 = 4,\ C = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$

(b) $\Delta_1 = 4,\ \Delta_2 = 7,\ \Delta_3 = 12,\ C = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -1.5 & 1.3229 & 0 \\ 0 & -1.5119 & 1.3093 \end{bmatrix}$

(c) $\Delta_1 = 2,\ \Delta_2 = 3,\ \Delta_3 = 4,\ \Delta_4 = 5,$

$$C = \begin{bmatrix} 1.4142 & 0 & 0 & 0 \\ -0.7071 & 1.2247 & 0 & 0 \\ 0 & -0.8165 & 1.1547 & 0 \\ 0 & 0 & -0.8660 & 1.1180 \end{bmatrix}$$

(d) $\Delta_1 = 3,\ \Delta_2 = 8,\ \Delta_3 = 21,\ \Delta_4 = 124,$

$$C = \begin{bmatrix} 1.7321 & 0 & 0 & 0 \\ 1.1547 & 1.6330 & 0 & 0 \\ 0.5774 & 1.4289 & 1.6202 & 0 \\ 0.5774 & 0.8165 & -0.3086 & 2.4300 \end{bmatrix}$$

6 (a) $k_1(A) = 13.3333,\ k_\infty(A) = 10.1111$

(b) $k_1(A) = 16.5789,\ k_\infty(A) = 17.0526$

(c) $k_1(A) = 127.5,\ k_\infty(A) = 153$

(d) $k_1(A) = 28375,\ k_\infty(A) = 28375$

7 Ta có $\det A = \alpha - 6 \neq 0 \Rightarrow \alpha \neq 6$. Khi đó $A^{-1} = \dfrac{1}{\alpha - 6}\begin{bmatrix} \alpha & -2 \\ -3 & 1 \end{bmatrix}$.

Như vậy: $\|A\|_\infty = 3 + |\alpha|$ và $\|A^{-1}\|_\infty = \dfrac{1}{|\alpha - 6|}\max(|\alpha| + 2, 4) =$

$$\begin{cases} \dfrac{4}{|\alpha - 6|}, & |\alpha| < 2 \\ \dfrac{|\alpha| + 2}{|\alpha - 6|}, & |\alpha| \geqslant 2 \end{cases}$$

Cuối cùng $k_\infty(A) = \begin{cases} \dfrac{4(3 + |\alpha|)}{|\alpha - 6|}, & |\alpha| < 2 \\ \dfrac{(3 + |\alpha|)(|\alpha| + 2)}{|\alpha - 6|}, & |\alpha| \geqslant 2,\ (\alpha \neq 6) \end{cases}$

8 (a) $X^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.6812 \\ 0.4596 \end{bmatrix},\ \Delta_{X^{(5)}} = 0.0316$

(b) $X^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.6271 \\ 1.0234 \end{bmatrix}$, $\Delta_{X^{(5)}} = 0.0206$

(c) $X^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.328190 \\ 0.982229 \\ 0.580619 \end{bmatrix}$, $\Delta_{X^{(5)}} = 0.001889$

(d) $X^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.244075 \\ 0.554723 \\ 0.467747 \end{bmatrix}$, $\Delta_{X^{(5)}} = 0.000115$

(e) $X^{(5)} = \begin{bmatrix} 1.304877 \\ 1.042144 \\ 0.564413 \\ 1.198341 \end{bmatrix}$, $\Delta_{X^{(5)}} = 0.011200$

9 (a) $X^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.688048 \\ 0.445976 \end{bmatrix}$, $\Delta_{X^{(5)}} = 0.001142$

(b) $X^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.620108 \\ 1.017694 \end{bmatrix}$, $\Delta_{X^{(5)}} = 0.000448$

(c) $X^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.327155 \\ 0.981468 \\ 0.580250 \end{bmatrix}$, $\Delta_{X^{(5)}} = 0.000214$

(d) $X^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.244008 \\ 0.554682 \\ 0.467700 \end{bmatrix}$, $\Delta_{X^{(5)}} = 4.65 \times 10^{-7}$

(e) $X^{(5)} = \begin{bmatrix} 1.306706 \\ 1.041876 \\ 0.561080 \\ 1.200142 \end{bmatrix}$, $\Delta_{X^{(5)}} = 0.000491$

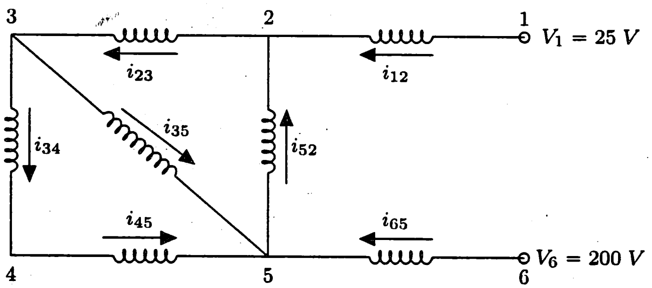
10 $X = \begin{bmatrix} 2.80312387 \\ 0.88124758 \\ -0.33124974 \\ -0.05312285 \\ 0.35000040 \\ 0.34999884 \\ 0.22812453 \\ 0.23125038 \\ 0.31875023 \\ 0.27187496 \end{bmatrix}$, $\overline{X} = \begin{bmatrix} 2.803125 \\ 0.881250 \\ -0.331250 \\ -0.053125 \\ 0.350000 \\ 0.350000 \\ 0.228125 \\ 0.231250 \\ 0.318750 \\ 0.271875 \end{bmatrix}$

11 Gọi x, y, z lần lượt là số lượng xe loại $1, 2, 3$ được sản xuất mỗi ngày. Ta có hệ phương trình:

$$\begin{cases} 1500x + 1700y + 1900z = 106000 \\ 25x + 33y + 42z = 2170 \\ 100x + 120y + 160z = 8200 \end{cases}$$

Giải ra ta được $x = 10$, $y = 20$, $z = 30$.

12 Giả sử



Ta thu được hệ phương trình

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & -7 & 0 & 15 & 0 \\ 0 & 30 & 0 & 7 & 10 & 0 & 0 \\ -20 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i_{12} \\ i_{23} \\ i_{34} \\ i_{35} \\ i_{52} \\ i_{45} \\ i_{65} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 175 \end{bmatrix}$$

Giải ra ta được $i_{12} = -5.4257$, $i_{23} = -1.2008$, $i_{34} = -0.3113$, $i_{35} = -0.8895$, $i_{52} = 4.2249$, $i_{45} = -0.3113$, $i_{65} = 4.8475$.

CHỈ DẪN VÀ TRẢ LỜI BÀI TẬP CHƯƠNG 3

1 (a) $\mathcal{L}_2(x) = 14 - \dfrac{47}{6}x + \dfrac{7}{6}x^2$

(b) $\mathcal{L}_2(x) = 1 + 0.6733x + 0.5333x^2$

(c) $\mathcal{L}_3(x) = 3 - \frac{1}{6}x - \frac{7}{6}x^2 + \frac{1}{3}x^3$

(d) $\mathcal{L}_3(x) = -18.6 + \frac{106}{3}x - 20x^2 + \frac{25}{6}x^3$

2 (a) Bảng số: $\begin{array}{c|cccc} x & 0.2 & 0.5 & 0.7 & 1.0 \\ \hline y & 0.9801 & 0.8776 & 0.7648 & 0.5403 \end{array}$, $\mathcal{L}_3(x^*) = 0.8138$, $f(x^*) = 0.8139$

(b) Bảng số: $\begin{array}{c|cccc} x & 1.2 & 1.4 & 1.6 & 1.8 \\ \hline y & 0.2807 & 0.2430 & 0.2018 & 0.1610 \end{array}$, $\mathcal{L}_3(x^*) = 0.2226$, $f(x^*) = 0.2226$

(c) Bảng số: $\begin{array}{c|cccc} x & 7 & 8 & 9 & 10 \\ \hline y & 2.0794 & 2.1972 & 2.3026 & 2.3979 \end{array}$, $\mathcal{L}_3(x^*) = 2.2246$, $f(x^*) = 2.2246$

3 $f(x_0) = 6,\ f(x_1) = 4,\ f[x_0, x_1] = -1.$

4 (a)
$$\begin{array}{c|c|c|c} 2 & 3 & & \\ & & -2 & \\ 3 & 1 & & 7/6 \\ & & 3/2 & \\ 5 & 4 & & \end{array} \Rightarrow \mathcal{N}_2^{(1)}(x) = 3 - 2(x-2) + \frac{7}{6}(x-2)(x-3).$$

(b)
$$\begin{array}{c|c|c|c} 0.3 & 1.25 & & \\ & & 1.1000 & \\ 0.5 & 1.47 & & 0.5333 \\ & & 1.3667 & \\ 0.8 & 1.88 & & \end{array} \Rightarrow$$
$$\Rightarrow \mathcal{N}_2^{(1)}(x) = 1.25 + 1.1(x - 0.3) + 0.5333(x - 0.3)(x - 0.5).$$

(c)
$$\begin{array}{c|c|c|c|c} 0 & 3 & & & \\ & & -1 & & \\ 1 & 2 & & 1/6 & \\ & & -1/2 & & 1/3 \\ 3 & 1 & & 9/6 & \\ & & 4 & & \\ 4 & 5 & & & \end{array} \Rightarrow$$
$$\Rightarrow \mathcal{N}_3^{(1)}(x) = 3 - x + \frac{1}{6}x(x-1) + \frac{1}{3}x(x-1)(x-3).$$

(d)
$$
\begin{array}{c|c|c|c|c}
1.2 & 2.2 & & & \\
 & & 4.5 & & \\
1.4 & 3.1 & & -2.5 & \\
 & & 3.5 & & 25/6 \;\Rightarrow \\
1.6 & 3.8 & & 0 & \\
 & & 3.5 & & \\
1.8 & 4.5 & & &
\end{array}
$$

$$\Rightarrow \mathcal{N}_3^{(1)}(x) = 2.5 + 4.5(x - 1.2) - 2.5(x - 1.2)(x - 1.4) +$$
$$+ \frac{25}{6}(x - 1.2)(x - 1.4)(x - 1.6).$$

5 (a) Vì $0.43 \in [0.25, 0.5]$, nên nếu chọn các điểm nút $x_0 = 0.25$, $x_1 = 0.5$, ta được $N_1(x) = 0.5791 + 4.2784x$ và $f(0.43) \approx 2.4188$. Đối với đa thức bậc hai, ta có hai cách chọn:

- $x_0 = 0$, $x_1 = 0.25$, $x_2 = 0.5$. Khi đó $N_2(x) = 1 + 1.7530x + 3.3672x^2$ và $f(0.43) \approx 2.3764$.
- $x_0 = 0.25$, $x_1 = 0.5$, $x_2 = 0.75$. Khi đó $N_2(x) = 1.2729 + 0.1156x + 5.5504x^2$ và $f(0.43) \approx 2.3489$.

Nếu dùng cả bốn điểm nút, thì $N_3(x) = 1 + 2.1169x + 1.1840x^2 + 2.9109x^3$ và $f(0.43) \approx 2.3606$.

(b) Vì $0.18 \in [0.1, 0.2]$, nên nếu chọn các điểm nút $x_0 = 0.1$, $x_1 = 0.2$, ta được $N_1(x) = -0.0192 - 2.708x$ và $f(0.18) \approx -0.5066$. Nếu chọn ba điểm nút $x_0 = 0.1$, $x_1 = 0.2$, $x_2 = 0.3$. Khi đó $N_2(x) = -0.0016 - 2.972x + 0.88x^2$ và $f(0.18) \approx -0.5080$. Nếu dùng cả bốn điểm nút, thì $N_3(x) = 0.0014 - 3.027x + 1.18x^2 - 0.5x^3$ và $f(0.18) \approx -0.5081$.

6 (a) $H_3(x) = 2 + (x - 1) - (x - 1)^2(x - 2)$

(b) $H_3(x) = 1.3863 + 1.6931(x - 2) + 0.2164(x - 2)^2 - 0.0273(x - 2)^2(x - 3)$

(c) $H_5(x) = 1 + 2x^2 - 4x^2(x - 1) + 1.5278x^2(x - 1)^2 - 0.5185x^2(x - 1)^2(x - 3)$

(d) $H_5(x) = x + 1.1616x^2 + 0.3028x^2(x - 0.5) - 0.1024x^2(x - 0.5)^2 - 0.0768x^2(x - 0.5)^2(x - 1)$

7 Ta có $f(x) = \dfrac{x}{x^2 + 1}$ và $f'(x) = \dfrac{1 - x^2}{(x^2 + 1)}$. Giá trị chính xác tại $x = 1.05$

là $f(1.05) = 0.4994054697 \approx 0.4994$. Ta có bảng số:

x	1.0	1.1	1.2
y	0.5	0.4997	0.4918
y'	0.0	−0.0430	−0.0739

(a) Nếu dùng hai điểm nút đầu tiên, ta được $H_3(1.05) = 0.4993875 \approx 0.4994$

(b) Nếu dùng cả ba điểm nút, ta được $H_5(1.05) = 0.499384140625 \approx 0.4994$

8 (a) $$S(x) = \begin{cases} 2 - \dfrac{2}{3}x + \dfrac{1}{24}x^3, & 0 \leqslant x \leqslant 2 \\ 1 - \dfrac{1}{6}(x-2) + \dfrac{1}{4}(x-2)^2 - \dfrac{1}{12}(x-2)^3, & 2 \leqslant x \leqslant 3 \end{cases}$$

(b) $$S(x) = \begin{cases} 2 + \dfrac{8}{15}(x-1) - \dfrac{8}{15}(x-1)^3, & 1 \leqslant x \leqslant 2 \\ 2 - \dfrac{16}{15}(x-2) - \dfrac{8}{5}(x-2)^2 + \dfrac{5}{3}(x-2)^3, & 2 \leqslant x \leqslant 3 \\ 1 + \dfrac{11}{15}(x-3) + \dfrac{17}{5}(x-3)^2 - \dfrac{17}{15}(x-3)^3, & 3 \leqslant x \leqslant 4 \end{cases}$$

9 $a = 2, b = 1, c = 3, d = -\dfrac{1}{2}$

10 $b_0 = \dfrac{2}{3}, d_0 = \dfrac{4}{3}, b_1 = \dfrac{2}{3}, d_1 = -\dfrac{4}{3}$

11 (a) $$S(x) = \begin{cases} 1 + \dfrac{17}{2}(x-2) - \dfrac{11}{2}(x-2)^3, & 2 \leqslant x \leqslant 3 \\ 4 + \dfrac{1}{2}(x-3) - 8(x-3)^2 + \dfrac{11}{2}(x-3)^3, & 3 \leqslant x \leqslant 4 \end{cases}$$

(b) $$S(x) = \begin{cases} 1 + x - \dfrac{25}{3}x^2 + \dfrac{16}{3}x^3, & 0 \leqslant x \leqslant 1 \\ -1 + \dfrac{1}{3}(x-1) + \dfrac{23}{3}(x-1)^2 - 5(x-1)^3, & 1 \leqslant x \leqslant 2 \\ 2 + \dfrac{2}{3}(x-2) - \dfrac{22}{3}(x-2)^2 + \dfrac{14}{3}(x-2)^3, & 2 \leqslant x \leqslant 3 \end{cases}$$

12 $a = 15, b = 17, c = 7, d = -10.$

13 $b_0 = \dfrac{10}{3}, d_0 = \dfrac{5}{3}, b_1 = \dfrac{7}{3}, d_1 = -1.$

14 $A = -0.2214,\ B =, 0.1246\ C = 0.9811$

15 $A = 2.0050,\ B = 0.4867$

16 Với $h = 0.2$ ta có bảng số:

x	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
y	1	1.2214	1.4918	1.8221	2.2255	2.7183

Khi đó $f(x) = -0.2562 + 5.3909x - 2.588x^2 \approx e^x$.
Tương tự cho trường hợp $h = 0.1$.

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
y	1	1.1052	1.2214	1.3500	1.4918	1.6487	1.8221

x	0.7	0.8	0.9	1.0
y	2.0138	2.2255	2.4596	2.7183

Khi đó $f(x) = -0.1875 + 5.3996x - 2.764x^2 \approx e^x$.

CHỈ DẪN VÀ TRẢ LỜI BÀI TẬP CHƯƠNG 4

1

(a)

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.01$	$h = 0.005$	$h = 0.001$
$f'(1.2)$	3.964713	4.227127	4.312622	4.315306	4.316164
$f''(1.2)$	−25.73669	−25.88950	−25.93781	−25.93932	−25.93980

Giá trị chính xác $f'(1.2) = 4.316200$ và $f''(1.2) = -25.93982$

(b)

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.01$	$h = 0.005$	$h = 0.001$
$f'(0.5)$	0.708128	0.718166	0.721374	0.721475	0.721507
$f''(0.5)$	0.208379	0.222112	0.226517	0.226657	0.226699

Giá trị chính xác $f'(0.5) = 0.721508$ và $f''(0.5) = 0.226701$

(c)

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.01$	$h = 0.005$	$h = 0.001$
$f'(1)$	3.743304	3.737646	3.735834	3.735778	3.735760
$f''(1)$	5.270354	5.265773	5.264302	5.264256	5.264242

Giá trị chính xác $f'(1) = 3.735759$ và $f''(1) = 5.264241$

(d)

	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.01$	$h = 0.005$	$h = 0.001$
$f'(3)$	0.407806	0.407507	0.407411	0.407408	0.407407
$f''(3)$	−0.210213	−0.209961	−0.209880	−0.209877	−0.209877

Giá trị chính xác $f'(3) = 0.407407$ và $f''(3) = -0.209877$

2 $f'(1.3) \approx N_3^{(1)}(1.3) \approx 4.7458$

3

(a) $I \approx 0.372508$

(b) $I \approx 42.61379$

(c) $I \approx 0.637197$

(d) $I \approx 0.384965$

4

(a) $I \approx 0.373553$

(b) $I \approx 43.63994$

(c) $I \approx 0.636295$

(d) $I \approx 0.384180$

5

(a) $I \approx 0.746670$

(b) $I \approx 0.746824$

6

(a) $M_2 = \max_{x\in[1,2]} |f''(x)| = 1$, $(b-a)\dfrac{M_2h^2}{12} < 10^{-5} \Rightarrow n > 91.287$. Chọn $n = 92 \Rightarrow I \approx 0.38628944$

(b) $M_4 = \max_{x\in[1,2]} \left|f^{(4)}(x)\right| = 6$, $(b-a)\dfrac{M_4h^4}{180} < 10^{-5} \Rightarrow n > 7.598$. Chọn $n = 8 \Rightarrow I \approx 0.38629204$

Chú ý rằng giá trị chính xác $I = 2\ln 2 - 1 = 0.38629436$

7 Công thức hình thang: $I_1 = 2.1380$, $I_2 = 7.3307$. Công thức Simpson: $I_1 = 2.1293$, $I_2 = 7.2251$.

8

(a) $I \approx 0.3738977$

(b) $I \approx 43.570191$

(c) $I \approx 0.6362926$

(d) $I \approx 0.3841561$

9 (a) $e^x = e\left[1 + (x-1) + \dfrac{1}{2}(x-1)^2 + \dfrac{1}{6}(x-1)^3 + \dfrac{1}{24}(x-1)^4\right] + R_4(x) = P_4(x) + R_4(x)$. Ta có $\displaystyle\int_1^2 \frac{P_4(x)}{\sqrt[3]{(x-1)^2}}\,dx = 10.93809724$ Còn tích phân $\displaystyle\int_1^2 \frac{e^x - P_4(x)}{\sqrt[3]{(x-1)^2}}\,dx \approx 0.04067867$ theo công thức Simpson với sai số nhỏ hơn 10^{-6}. Do đó $I \approx 10.97877591$.

(b) $\sin x = x - \frac{x^3}{6} + R_4(x) = P_4(x) + R_4(x)$. Ta có $\int_0^1 \frac{P_4(x)}{\sqrt{x}}\,dx = \frac{13}{21}$

Còn tích phân $\int_1^2 \frac{\sin x - P_4(x)}{\sqrt{x}}\,dx \approx 0.00148901$ theo công thức Simpson với sai số nhỏ hơn 10^{-6}. Do đó $I \approx 0.62053663$.

(c) $I = \int_0^\infty \frac{dx}{1+x^3} = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^3} + \int_1^\infty \frac{dx}{1+x^3} = I_1 + I_2$. I_1 là tích phân xác định thông thường; còn với I_2 ta thực hiện phép đổi biến $x = \frac{1}{t}$, ta thu được $I_2 = \int_1^1 \frac{xdx}{1+x^3}$. Vậy $I = \int_0^1 \frac{(1+x)dx}{1+x^3}$. Xấp xỉ theo công thức Simpson với sai số nhỏ hơn 10^{-6} ta thu được $I \approx 1.20919964$. Biết giá trị chính xác của $I = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}} = 1.20919958$.

(d) Tương tự, $I = \int_1^\infty \frac{dx}{x\sqrt{1+x^5+x^{10}}} = \frac{1}{5}\int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{1+z+z^2}}$ Xấp xỉ theo công thức Simpson với sai số nhỏ hơn 10^{-6} ta thu được $I \approx 0.15353030$. Biết giá trị chính xác của $I = \frac{1}{5}\ln\left(1 + \frac{2}{\sqrt{3}}\right) = 0.15353035$.

10 (a) $h = 1s : s(10) \approx 352.7733$, $h = 0.5s : s(10) \approx 353.2542$

(b) $h = 1s : s(10) \approx 353.4188$, $h = 0.5s : s(10) \approx 353.4145$

11 Công thức hình thang: $m \approx 431567.5g = 431.5675kg$.

12 (a) Công thức Simpson: $M \approx 335.96253$

(b) Công thức Gauss bậc 5: $M \approx 335.96235$

CHỈ DẪN VÀ TRẢ LỜI BÀI TẬP CHƯƠNG 5

1 (a) Ta có:

t_k	$y_k(Euler)$	$y_k(RK2)$	$y_k(RK4)$	$y(t_k)$
1.0	1.00000000	1.00000000	1.00000000	1.00000000
1.1	1.00000000	0.99545455	0.99515907	0.99515880
1.2	0.99090909	0.98178375	0.98121462	0.98121413
1.3	0.97348485	0.95975290	0.95892712	0.95892646
1.4	0.94836830	0.93000862	0.92893968	0.92893887
1.5	0.91610889	0.89310448	0.89180328	0.89180234
1.6	0.87718282	0.84951978	0.84799526	0.84799419
1.7	0.83200674	0.79967358	0.79793315	0.79793197
1.8	0.78094832	0.74393543	0.74198528	0.74198400
1.9	0.72433433	0.68263360	0.68047900	0.68047762
2.0	0.66245719	0.61606168	0.61370711	0.61370564

(b) Ta có:

t_k	$y_k(Euler)$	$y_k(RK2)$	$y_k(RK4)$	$y(t_k)$
0.0	2.00000000	2.00000000	2.00000000	2.00000000
0.1	2.00000000	2.03010050	2.03020081	2.03020084
0.2	2.06020100	2.12313629	2.12325388	2.12325398
0.3	2.18424147	2.28673129	2.28682400	2.28682425
0.4	2.38094642	2.53468232	2.53478294	2.53478348
0.5	2.66530300	2.88877820	2.88905604	2.88905719
0.6	3.06023585	3.38178166	3.38265499	3.38265742
0.7	3.59946368	4.06212211	4.06446211	4.06446739
0.8	4.33191286	5.00119874	5.00669797	5.00670952
0.9	5.32845586	6.30475931	6.31659622	6.31662144
1.0	6.69220135	8.13075149	8.15479098	8.15484549

(c) Ta có:

t_k	$y_k(Euler)$	$y_k(RK2)$	$y_k(RK4)$	$y(t_k)$
0.0	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
0.1	0.00000000	0.01005021	0.01005021	0.01005021
0.2	0.02010042	0.04086423	0.04081358	0.04081355
0.3	0.06132143	0.09436384	0.09420770	0.09420764
0.4	0.12602342	0.17403828	0.17371282	0.17371271
0.5	0.21820796	0.28544762	0.28487369	0.28487348
0.6	0.34407810	0.43711259	0.43618657	0.43618619
0.7	0.51301315	0.64207607	0.64065570	0.64065504
0.8	0.73926795	0.92072781	0.91860867	0.91860749
0.9	1.04503770	1.30619619	1.30307005	1.30306791
1.0	1.46629963	1.85544433	1.85081978	1.85081572

(d) Ta có:

t_k	$y_k(Euler)$	$y_k(RK2)$	$y_k(RK4)$	$y(t_k)$
1.0	2.00000000	2.00000000	2.00000000	2.00000000
1.1	2.14166667	2.14012906	2.14004780	2.14004775
1.2	2.28025812	2.27730238	2.27715259	2.27715249
1.3	2.41617064	2.41189944	2.41169077	2.41169065
1.4	2.54972645	2.54422900	2.54396897	2.54396883
1.5	2.68119157	2.67454620	2.67424078	2.67424062
1.6	2.81078855	2.80306459	2.80271862	2.80271845
1.7	2.93870570	2.92996502	2.92958246	2.92958227
1.8	3.06510393	3.05540207	3.05498622	3.05498602
1.9	3.19012194	3.17950908	3.17906273	3.17906252
2.0	3.31388024	3.30240194	3.30192747	3.30192725

2 (a) Ta có:

t_k	y_k	$y(t_k)$
1.0	0.00000000	0.00000000
1.1	0.34591029	0.34591988
1.2	0.86662169	0.86664254
1.3	1.60718135	1.60721508
1.4	2.62031131	2.62035955
1.5	3.96760190	3.96766629
1.6	5.72087932	5.72096153
1.7	7.96377179	7.96387348
1.8	10.79350178	10.79362466
1.9	14.32293573	14.32308154
2.0	18.68292657	18.68309708

(b) Sử dụng bảng

x	1.0	1.1	1.2	1.3
y	0.000000	0.345910	0.866621	1.607181

ta thu được:

(i) $y(1.04) \approx 0.12027100$. Giá trị chính xác: $y(1.04) = 0.11998750$. Sai số: $\Delta = 0.00028350$.

(ii) $y(1.32) \approx 1.78652215$. Giá trị chính xác: $y(1.32) = 1.78620315$. Sai số: $\Delta = 0.00031900$.

(iii) $y(1.66) \approx 7.00251482$. Giá trị chính xác: $y(1.04) = 7.00205956$. Sai số: $\Delta = 0.00045527$.

(c) $I \approx 5.71717197$. Ta có: $F(t) = \int y(t)dt = (t^2 - 2t + 2)\,\mathrm{e}^t - \frac{\mathrm{e}}{3}t^3$. Giá trị chính xác $I = F(2) - F(1) = 5.71717277$. Sai số: $\Delta = 0.00000080$.

3 (a)

	Euler	RK2	RK4
$x(1.2)$	1.520000	1.314000	1.283553
$y(1.2)$	2.240000	2.368000	2.345040

(b)

	Euler	RK2	RK4
$x(1.2)$	0.362928	0.385533	0.387710
$y(1.2)$	0.549001	0.547774	0.548164

(c)

	Euler	RK2	RK4
$x(1.2)$	0.400000	0.444749	0.455955
$y(1.2)$	0.560000	0.605849	0.616663

(d)

	Euler	RK2	RK4
$x(1.2)$	1.786000	1.979590	2.033934
$y(1.2)$	0.690000	0.846370	0.869250

4 Ta có bảng kết quả sau:

t_k	x_k	$x(t_k)$	y_k	$y(t_k)$
0.0	1.000000	1.000000	−2.000000	−2.000000
0.1	0.795671	0.795670	−1.880525	−1.880525
0.2	0.585384	0.585384	−1.724386	−1.724386
0.3	0.373216	0.373215	−1.535417	−1.535416
0.4	0.163219	0.163218	−1.317931	−1.317930
0.5	−0.040633	−0.040634	−1.076662	−1.076661
0.6	−0.234507	−0.234508	−0.816686	−0.816684
0.7	−0.414763	−0.414765	−0.543345	−0.543342
0.8	−0.578013	−0.578015	−0.262166	−0.262163
0.9	−0.721164	−0.721166	0.021220	0.021223
1.0	−0.841469	−0.841471	0.301165	0.301169

5 (a) $x(t_1) \approx 0.254400$, $x(t_2) \approx 0.267634$.

(b) $x(t_1) \approx 0.260000$, $x(t_2) \approx 0.694800$.

6 Ta có bảng kết quả sau:

t_k	x_k	$x(t_k)$
0.0	1.00000000	1.00000000
0.1	1.10337038	1.10337037
0.2	1.21362964	1.21362963
0.3	1.33100002	1.33100000
0.4	1.45570372	1.45570370
0.5	1.58796298	1.58796296
0.6	1.72800001	1.72800000
0.7	1.87603704	1.87603704
0.8	2.03229630	2.03229630
0.9	2.19699999	2.19700000
1.0	2.37037035	2.37037037

7 Với $h = 0.25$ ta có kết quả:

x_k	y_k (pp sphh)	y_k (pp bắn)	$y(x_k)$
0.00	0.0	0.0	0.0
0.25	0.11214568	0.10988642	0.10985044
0.50	0.19321852	0.19117392	0.19113800
0.75	0.27254037	0.27154537	0.27152566
1.00	0.36787944	0.36787944	0.36787944

Với $h = 0.1$ ta có kết quả:

x_k	y_k (pp sphh)	y_k (pp bắn)	$y(x_k)$
0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	0.04987398	0.04966658	0.04966615
0.2	0.09159134	0.09127108	0.09127040
0.3	0.12769480	0.12733170	0.12733091
0.4	0.16036681	0.16001048	0.16000968
0.5	0.19145543	0.19113874	0.19113800
0.6	0.22250147	0.22224392	0.22224329
0.7	0.25476638	0.25457697	0.25457649
0.8	0.28926011	0.28913989	0.28913957
0.9	0.32676843	0.32671266	0.32671251
1.0	0.36787944	0.36787944	0.36787944

8 Ta có:

(a)

t_k	0.25	0.50	0.75
y_k	0.1952	0.4235	0.6952

(b)

t_k	1.2	1.4	1.6	1.8
y_k	−0.0300	−0.0490	−0.0536	−0.0392

(c)

t_k	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9
y_k	0.751	0.553	0.397	0.277	0.185	0.116	0.066	0.032	0.011

(d)

t_k	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
y_k	0.243	0.286	0.331	0.378	0.428	0.482	0.543	0.614	0.698

9

(a)

t_k	0.25	0.50	0.75
y_k	0.1970892	0.42594958	0.69710663

(b)

t_k	1.2	1.4	1.6	1.8
y_k	−0.03024059	−0.04952096	−0.05414518	−0.03967223

(c)

t_k	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9
y_k	0.7510	0.5528	0.3969	0.2761	0.1840	0.1153	0.0657	0.0315	0.0102

(d)

t_k	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
y_k	0.2427	0.2859	0.3304	0.3770	0.4267	0.4812	0.5426	0.6135	0.6977

Tài liệu tham khảo

[1] RICHARD L. BURDEN and DOUGLAS J. FAIRES, *Numerical Analysis*, Brooks/Cole Publishing Company - 1997.

[2] PETER J. OLVER, *Introduction to Partial Differential Equations*, Springer - 2016.

[3] STEVEN C. CHAPRA and RAYMOND P. CANALE, *Numerical Methods for Engineers*, McGraw-Hill - 1988.

[4] PHẠM KỲ ANH, *Giải tích số*, NXB Đại học Quốc gia. Hà Nội - 2000.

[5] LÊ TRỌNG VINH, *Giải tích số*, NXB Khoa học Kỹ thuật. Hà Nội - 2000.

[6] PHAN VĂN HẠP - LÊ ĐÌNH THỊNH, *Phương pháp tính và các thuật toán*, NXB Giáo dục. Hà Nội - 2000.

[7] NGUYỄN MINH CHƯƠNG (chủ biên)- NGUYỄN VĂN KHẢI - KHUẤT VĂN NINH - NGUYỄN VĂN TUẤN - NGUYỄN TƯỜNG, *Giải tích số*, NXB Giáo dục. Hà Nội - 2000.

[8] LÊ THÁI THANH, *Giáo trình Phương pháp tính*, NXB Đại học Quốc gia TP. Hồ Chí Minh - 2012, 2017

Giáo trình Phương pháp tính
(Tái bản lần thứ hai có chỉnh sửa, bổ sung)

Lê Thái Thanh
Trường Đại học Bách khoa, Đại học Quốc gia Thành Phố Hồ Chí Minh

NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC QUỐC GIA THÀNH PHỐ HỒ CHÍ MINH

ĐHQG-HCM, P. Linh Trung, TP Thủ Đức, TP.HCM.
ĐT: 028 62726361
E-mail: vnuhp@vnuhcm.edu.vn
Website: www.vnuhcmpress.edu.vn

Chịu trách nhiệm xuất bản và nội dung
TS ĐỖ VĂN BIÊN

Biên tập
TRẦN THỊ ĐỨC LINH

Sửa bản in
ÁI NHẬT

Trình bày bìa
VÕ THỊ HỒNG

Đối tác liên kết
TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA - (ĐHQG-HCM)

Tái bản lần thứ 2 có chỉnh sửa, bổ sung. Số lượng in: 500 cuốn, khổ 16 x 24cm. Số XNĐKXB: 1357-2023/CXBIPH/2-22/ĐHQGTPHCM. QĐXB số: 108/QĐ-NXB-TB cấp ngày 18/7/2023. In tại: Xưởng In Trường Đại học Bách khoa. Địa chỉ: 268 Lý Thường Kiệt, Phường 14, Quận 10, TP.HCM. Nộp lưu chiểu: Năm 2023. ISBN: **978-604-73-9859-1**.