

Mục lục

1 Chuẩn bị	1
1.1 Kiến thức về giải tích	1
1.2 Sai số làm tròn và số học máy tính	3
1.3 Thuật toán và sự hội tụ	3
1.4 Python: ngôn ngữ tính toán và lập trình	3
1.5 Python + VS Code: giải tích và đại số	11
2 Giải phương trình một biến	22
2.1 Phương pháp chia đôi	22
2.2 Phương pháp Newton và mở rộng	24
2.3 Lập điểm bất động	30
2.4 Phân tích sai số của các phương pháp lặp	34
2.5 Tăng tốc độ hội tụ	34
2.6 Nghiệm của đa thức và phương pháp Müller	35
3 Nội suy và xấp xỉ bằng đa thức	36
3.1 Nội suy tổng quát	36
3.2 Đa thức nội suy	37
3.3 Xấp xỉ số liệu và phương pháp Neville	41
3.4 Sai phân chia	41
3.5 Nội suy Hermite	42
3.6 Nội suy Newton	42
3.7 Nội suy spline bậc ba	45
3.8 Đường cong tham số	45
4 Đạo hàm và tích phân bằng số	46
4.1 Đạo hàm bằng số	47
4.2 Ngoại suy Richardson	51
4.3 Tích phân bằng số	51
4.4 Tích phân Romberg	56

4.5	Phương pháp cầu phương thích ứng	56
4.6	Cầu phương Gauss	56
4.7	Tích phân bội	57
4.8	Tích phân suy rộng	57
5	Bài toán giá trị ban đầu của phương trình vi phân thường	58
5.1	Lý thuyết cơ bản về bài toán giá trị ban đầu	59
5.2	Phương pháp Picard	60
5.3	Phương pháp chuỗi Taylor	64
5.4	Phương pháp Euler	67
5.5	Phương pháp Taylor bậc cao	69
5.6	Phương pháp Runge–Kutta	70
5.7	Điều khiển sai số và phương pháp Runge–Kutta–Fehlberg	74
5.8	Phương pháp đa bước	74
5.9	Phương pháp đa bước với bước nhảy biến thiên	74
5.10	Phương pháp ngoại suy	74
5.11	Phương trình cấp cao và hệ phương trình vi phân	74
5.12	Sự ổn định	74
5.13	Phương trình vi phân cứng	74
6	Phương pháp trực tiếp giải hệ phương trình tuyến tính	68
6.1	Hệ phương trình tuyến tính	68
6.2	Chiến thuật chốt	69
6.3	Đại số tuyến tính và ma trận nghịch đảo	69
6.4	Định thức của ma trận	69
6.5	Phân tích ma trận	69
6.6	Các dạng ma trận đặc biệt	69
7	Kỹ thuật lặp trong đại số tuyến tính	70
7.1	Chuẩn của vectơ và ma trận	70
7.2	Giá trị riêng và vectơ riêng	72
7.3	Lặp điểm bất động	72
7.4	Kỹ thuật lặp Jacobi và Gauss–Seidel	76
7.5	Ma trận nghịch đảo	79
7.6	Kỹ thuật giảm dư giải hệ tuyến tính	80
7.7	Giới hạn sai số và tinh chỉnh phép lặp	80
7.8	Phương pháp gradient liên hợp	80

8 Lý thuyết xấp xỉ	81
8.1 Xấp xỉ bình phương nhỏ nhất	81
8.2 Đa thức trực giao và xấp xỉ bình phương nhỏ nhất	86
8.3 Đa thức Chebyshev và [Economization] chuỗi lũy thừa	86
8.4 Xấp xỉ hàm hữu tỷ	86
8.5 Xấp xỉ đa thức lượng giác	86
8.6 Biến đổi Fourier nhanh	86
9 Xấp xỉ giá trị riêng	84
9.1 Đại số tuyến tính và giá trị riêng	84
9.2 Ma trận trực giao và biến đổi đồng dạng	84
9.3 Phương pháp lũy thừa	84
9.4 Phương pháp Householder	84
9.5 Thuật toán QR	84
9.6 Phân tích giá trị kỳ dị	84
10 Nghiệm số của hệ phương trình phi tuyến	85
10.1 Điểm bất động của hàm nhiều biến	85
10.2 Phương pháp Newton	85
10.3 Phương pháp tựa Newton	85
10.4 Phương pháp độ dốc nhất	85
10.5 Đồng luân và các phương pháp mở rộng	85
11 Bài toán giá trị biên của phương trình vi phân thường	86
11.1 Phương pháp bắn tuyến tính	86
11.2 Phương pháp bắn cho bài toán phi tuyến	86
11.3 Phương pháp sai phân hữu hạn cho bài toán tuyến tính	86
11.4 Phương pháp sai phân hữu hạn cho bài toán phi tuyến	87
11.5 Phương pháp Rayleigh–Ritz	87
12 Nghiệm số của phương trình đạo hàm riêng	88
12.1 Phương trình đạo hàm riêng Elliptic	88
12.2 Phương trình đạo hàm riêng Parabolic	89
12.3 Phương trình đạo hàm riêng Hyperbolic	89
12.4 Giới thiệu về phương pháp phần tử hữu hạn	89

Chương 8

Lý thuyết xấp xỉ

8.1 Xấp xỉ bình phương nhỏ nhất

8.1.1 Bài toán tổng quát

Xét $(V, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ là không gian Euclide có tích vô hướng $\langle f, g \rangle$ và chuẩn $\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle}$. Trong V cho không gian con W có cơ sở $\{f_1, f_2, \dots, f_n\}$ và $f \notin W$. Tìm $P \in W$ sao cho $\|f - P\| = \min_{Q \in W} \|f - Q\|$.

P gọi là xấp xỉ tốt nhất của f bởi không gian W , giá trị nhỏ nhất ở trên gọi là sai số của xấp xỉ.

Ta có

$$P = \sum_{i=1}^n c_i f_i.$$

Xét

$$\begin{aligned} G(c) &= \|f - P\|^2 = \langle f - \sum_{i=1}^n c_i f_i, f - \sum_{i=1}^n c_i f_i \rangle \\ &= \|f\|^2 - 2 \sum_{i=1}^n \langle f, f_i \rangle c_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \langle f_i, f_j \rangle c_i c_j \end{aligned}$$

Đặt

$$a_{ij} = \langle f_i, f_j \rangle, \quad b_i = \langle f, f_i \rangle \quad (8.1)$$

ta có $a_{ij} = a_{ji}$ và

$$\frac{\partial G}{\partial c_i} = -2b_i + 2a_{ii}c_i + 2 \sum_{j \neq i} a_{ij}c_j = -2b_i + 2 \sum_{j=1}^n a_{ij}c_j.$$

$G(c)$ đạt cực tiểu thì c là điểm dừng

$$\frac{\partial G}{\partial c_i} = 0, \quad \forall i = \overline{1, n} \Rightarrow \sum_{j=1}^n a_{ij}c_j = b_i \quad \forall i = \overline{1, n}.$$

Đặt $A = (a_{ij})_n$, $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ thì

$$Ac = b \quad (8.2)$$

Hệ $\{f_1, f_2, \dots, f_n\}$ độc lập tuyến tính nên A là ma trận đối xứng xác định dương. Khi đó $\det A \neq 0$, suy ra hệ trên có nghiệm duy nhất.

Hơn nữa, $\frac{\partial^2 G}{\partial c_i \partial c_j} = 2a_{ij}$, $\forall i, j = \overline{1, n}$, nên ma trận $\left(\frac{\partial^2 G}{\partial c_i \partial c_j} \right)_{i,j=\overline{1,n}} = 2A$ xác định dương. Vậy nghiệm duy nhất trên là cực tiểu của $G(c)$.

8.1.2 Xấp xỉ hàm rời rạc

V là không gian hàm xác định tại các điểm x_1, x_2, \dots, x_N có tích vô hướng và chuẩn:

$$\langle f, g \rangle = \sum_{k=1}^N f(x_k)g(x_k), \quad \|f\| = \sqrt{\sum_{k=1}^N f^2(x_k)}.$$

Khi đó

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^N f_j(x_k) f_i(x_k), \quad b_i = \sum_{k=1}^N y_k f_i(x_k), \quad i, j = \overline{1, n} \quad (8.3)$$

và sai số $\|f - P\| = \sqrt{\sum_{k=1}^N [y_k - P(x_k)]^2}.$

Ví dụ 8.1. Tìm xấp xỉ bình phương nhỏ nhất của hàm số $y = f(x)$ có giá trị trong bảng

x	1	1.3	1.7	2
y	3.5	4	4.6	5.2

bởi không gian hàm có cơ sở $\{1, x, \ln x\}$ và đánh giá sai số của xấp xỉ.

Giải. Lập bảng tính

	1	1.3	1.7	2
1	1	1	1	1
x	1	1.3	1.7	2
$\ln x$	0	0.262364	0.530628	0.693147
P	3.51173	3.96557	4.64125	5.18146
$f - P$	-0.01173	0.03443	-0.04125	0.01854

Gọi xấp xỉ cần tìm $P(x) = a \cdot 1 + bx + c \ln x$. Ta có hệ

$$\begin{bmatrix} 4 & 6 & 1.48614 \\ 6 & 9.58 & 2.62944 \\ 1.48614 & 2.62944 & 0.830854 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 17.3 \\ 26.92 \\ 7.09471 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a = 1.24243 \\ b = 2.2693 \\ c = -0.864993 \end{cases}$$

trong đó, ta tính chi tiết vài giá trị:

$$a_{23} = \langle x, \ln x \rangle = 1 \cdot 0 + 1.3 \cdot 0.262364 + 1.7 \cdot 0.530628 + 2 \cdot 0.693147 = 2.62944$$

$$\begin{aligned} b_3 &= \langle f, \ln x \rangle = 3.5 \cdot 0 + 4 \cdot 0.262364 + 4.6 \cdot 0.530628 + 5.2 \cdot 0.693147 \\ &= 7.09471. \end{aligned}$$

Ta được $P(x) = 1.24243 + 2.2693x - 0.864993 \ln x$. Quay lại bảng trên để hoàn tất hai hàng cuối.

Sai số của xấp xỉ

$$\sqrt{(-0.01173)^2 + 0.03443^2 + (-0.04125)^2 + 0.01854^2} = 0.0580325.$$

```

1 X = [1, 1.3, 1.7, 2.]
2 Y = [3.5, 4., 4.6, 5.2]

3 from sympy import *
4 x = symbols('x')
5 cs = [1 + 0*x, x, log(x)] # biểu thức xuất hiện biến thì mới
    thể biến được

6 V = [ [cs_i.subs(x, X_k) for X_k in X] for cs_i in cs ]

7 import numpy as np
8 A = [ [np.dot(V_i, V_j) for V_j in V] for V_i in V ]
9 b = [np.dot(Y, V_i) for V_i in V]

10 hs = np.linalg.solve(
11     np.array(A).astype(float),
12     np.array(b).astype(float) )

13 P = hs.dot(cs)

14 [P.subs(x, X_k) for X_k in X]
15 errors = [Y_k - P.subs(x, X_k) for X_k, Y_k in zip(X, Y)]
16 np.linalg.norm(np.array(errors).astype(float))

```

□

Ví dụ 8.2. Tìm xấp xỉ bình phương nhỏ nhất của hàm số $z = f(x, y)$ có giá trị trong bảng

(x, y)	$(-0.7, -2.9)$	$(1.7, -1.1)$	$(-4.9, -2.9)$	$(3.1, 1.5)$	$(-1.3, 0.8)$
z	7.1	5.8	-3.1	-1	-8.7

bởi đa thức bậc nhất (hai biến) và đánh giá sai số của xấp xỉ.

Giải. $P(x, y) = a + bx + cy$ (cơ sở $\{1, x, y\}$).

$$\begin{bmatrix} 5 & -2.1 & -4.6 \\ -2.1 & 38.69 & 17.98 \\ -4.6 & 17.98 & 20.92 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1 \\ 28.29 \\ -26.44 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a = -2.54722 \\ b = 2.39859 \\ c = -3.88546 \end{cases}$$

P	7.04161	5.80439	-3.03247	-0.939779	-8.77375
$f - P$	0.0583935	-0.0043924	-0.067531	-0.0602206	0.0737505

Sai số $\|f - P\| = \sqrt{0.0583935^2 + 0.0043924^2 + \dots + 0.0737505^2} = 0.130596$.

```

1 X = [-0.7, 1.7, -4.9, 3.1, -1.3]
2 Y = [-2.9, -1.1, -2.9, 1.5, 0.8]
3 Z = [7.1, 5.8, -3.1, -1, -8.7]

4 from sympy import *
5 x, y = symbols('x y')
6 cs = [1 + 0*x, x, y]

7 V = [ [cs_i.subs({x: X_k, y: Y_k}) for X_k, Y_k in zip(X,
   Y)] for cs_i in cs ]

8 import numpy as np
9 A = [ [np.dot(V_i, V_j) for V_j in V] for V_i in V ]
10 b = [np.dot(Z, V_i) for V_i in V]

11 hs = np.linalg.solve(
12     np.array(A, dtype=float),
13     np.array(b, dtype=float) )

14 P = hs.dot(cs)

15 [P.subs({x: X_k, y: Y_k}) for X_k, Y_k in zip(X, Y)]
16 errors = [Z_k - P.subs({x: X_k, y: Y_k}) for X_k, Y_k, Z_k
   in zip(X, Y, Z)]
17 np.linalg.norm( np.array(errors, dtype=float) )

```

□

8.1.3 Xấp xỉ hàm khả tích

Cho $V = \{f \mid \int_a^b f^2(x) dx < \infty\}$. Trên V xét tích vô hướng và chuẩn:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) g(x) dx, \quad \|f\| = \sqrt{\int_a^b f^2(x) dx} \quad (8.4)$$

Ví dụ 8.3. Tìm xấp xỉ bình phương nhỏ nhất của $f(x) = \sin x$ trên $[0, 1]$ bởi không gian hàm có cơ sở $\{1, x, e^x\}$. Đánh giá sai số của xấp xỉ.

Giải. Gọi xấp xỉ cần tìm $P(x) = a \cdot 1 + bx + ce^x$. Ta có hệ:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0.5 & 1.71828 \\ 0.5 & 0.333333 & 1 \\ 1.71828 & 1 & 3.19453 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.459698 \\ 0.301169 \\ 0.909331 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a = 0.278208 \\ b = 1.33291 \\ c = -0.282237. \end{cases}$$

trong đó, chẳng hạn

$$a_{23} = \langle x, e^x \rangle = \int_0^1 x e^x dx = 1$$

$$b_3 = \langle \sin x, e^x \rangle = \int_0^1 e^x \sin x dx = 0.909331.$$

$$\Rightarrow P(x) = 0.278208 \cdot 1 + 1.33291x - 0.282237e^x.$$

$$\text{Sai số } \|f - P\| = \sqrt{\int_0^1 [f(x) - P(x)]^2 dx} = 0.00125824.$$

```
1 from sympy import *
2 x = symbols('x')
3 f = sin(x)
4 cs = [1 + 0*x, x, E**x] # biểu thức xuất hiện biến thì mới lấy
   được tích phân

5 A = [ [N( (cs_i * cs_j).integrate((x, 0, 1)) , 6 ) for
   cs_j in cs] for cs_i in cs ]
6 b = [N( (f * cs_i).integrate((x, 0, 1)) , 6 ) for cs_i in
   cs]

7 import numpy as np
8 hs = np.linalg.solve(
9     np.array(A, dtype=float),
```



```
10 np.array(b, dtype=float) )
11 P = hs.dot(cs)
12 sqrt( N( ((f - P)**2 ).integrate((x, 0, 1)) , 6 ) )
```

□

8.2 Đa thức trực giao và xấp xỉ bình phương nhỏ nhất

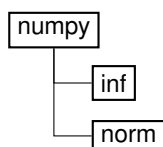
8.3 Đa thức Chebyshev và [Economization] chuỗi lũy thừa

8.4 Xấp xỉ hàm hữu tỷ

8.5 Xấp xỉ đa thức lượng giác

8.6 Biến đổi Fourier nhanh

Tóm tắt Python



Tài liệu tham khảo

- [1] Phạm Kỳ Anh. *Giải tích số*. Đại học Quốc gia Hà Nội, 2002. 284 trang.
- [2] Richard L. Burden, Douglas J. Faires **and** Annette M. Burden. *Numerical Analysis*. phiên bản 10. Cengage Learning, 2016. 918 trang.
- [3] NumPy community. *NumPy User Guide*. phiên bản 1.22.0. 531 trang. URL: <https://numpy.org/doc/stable>.
- [4] SciPy community. *SciPy Reference Guide*. phiên bản 1.8.1. 3584 trang. URL: <https://docs.scipy.org/doc>.
- [5] Phan Văn Hạp **and** Lê Đình Thịnh. *Phương pháp tính và các thuật toán*. Nhà xuất bản Giáo dục, 2000. 400 trang.
- [6] Doãn Tam Hòe. *Toán học tính toán*. Đại học Quốc gia Hà Nội, 2009. 240 trang.
- [7] Matplotlib development team. *Matplotlib documentation*. phiên bản 3.5.1. URL: <https://matplotlib.org/3.5.1/tutorials/index.html>.
- [8] SymPy Development Team. *SymPy Documentation*. phiên bản 1.8. 2750 trang. URL: <https://github.com/sympy/sympy/releases>.

