CHƯƠNG 4

GiẢI PHƯƠNG TRÌNH PHI TUYẾN

Nội dung

Đặt vấn đề

1. **Phương pháp chia đôi**
2. **Phương pháp dây cung**
3. **Phương pháp Newton**
4. **Phương pháp cát tuyến**
5. **Phương pháp lặp**
6. **Phương pháp Bairstow**

Đặt vấn đề

- Phương trình phi tuyến (PTPT)
  - VD1: $x^2 = 0$
  - VD2: $1 + 2x + x^2 - 3x^3 + 7x^4 = 0$
  - VD3: $\ln(x+1) = 0$
  - VD4: $tg(x) – artg(2x) = 0$
  - Tổng quát: $f(x) = 0$
- Giải phương trình phi tuyến (root finding)
  - Tìm x để $f(x) = 0$
  - X được gọi là nghiệm của PT, cũng được gọi là không điểm của hàm f
- Tìm nghiệm dưới dạng công thức hiện: Khó, một số không tồn tại (VD PT đa thức bậc lớn hơn 4)

  => sử dụng PP số dựa trên thủ tục lặp

Giải PTPT: Một số khái niệm (1)

- Sự tồn tại nghiệm
  - Định lý: Cho hàm f:R->R; [a,b] là đoạn phân ly nghiệm nếu f(a) và f(b) trái dấu. Nếu thêm điều kiện f liên tục trên [a,b] thì tồn tại nghiệm x^* ϵ [a,b] sao cho $f(x^*)=0$.
  - VD: $e^x + 1 = 0$ vô nghiệm

    $2x + 3 = 0$ có một nghiệm

    $x^2 + 3x + 1 = 0$ có hai nghiệm

    $\sin(x) = 0$ có vô số nghiệm
- Độ nhạy và điều kiện của bài toán giải PTPT
  - Số điều kiện của bài toán tìm nghiệm x^* : $1/\left|f'(x^*)\right|$

Giải PTPT: Một số khái niệm (2)

- Giải PTPT bằng phương pháp lặp
  - Điều kiện dừng
    - $\left|f(x)\right| < \varepsilon$

      $\left|x^{*} - x\right| < \varepsilon$
    - ε là độ chính xác cho trước
  - Tốc độ hội tụ:
    - Gọi sai số ở bước lặp k là $e_k = x_k - x^*$; x_k là lời giải xấp xỉ tại bước k, x^* là nghiệm chính xác.
    - Dãy $\{e_k\}$ hội tụ với tốc độ r nếu: $\lim_{k\to\infty} \frac{\left|e_{k+1}\right|}{\left|e_k\right|^r} = C$; $C \neq 0$
      - r = 1: hội tụ tuyến tính
      - r > 1: hội tụ trên tuyến tính
      - r = 2: hội tụ bình phương

Giải PTPT: Phương pháp chia đôi (1)

- Ý tưởng: nếu [a,c] chỉ chứa một nghiệm của PT $f(x)=0$ thì $f(a)*f(c)\leq 0$; [a,c]-khoảng phân ly nghiệm
- Phương pháp chia đôi: Chia đôi khoảng phân ly nghiệm liên tục cho đến khi đủ nhỏ, như sau:
  - Chia đôi: $b = (a+c)/2$
  - Kiểm tra:
    - Nếu $f(b) = 0$, => b là nghiệm
    - Nếu $f(a)*f(b)<0$ thì đặt [a,b] là khoảng phân ly nghiệm mới
    - Nếu $f(c)*f(b)<0$ thì đặt [b,c] là khoảng phân ly nghiệm mới
  - Lặp cho đến khi khoảng phân ly nghiệm nhỏ hơn độ chính xác ε cho trước

Giải PTPT: Phương pháp chia đôi (2)

- Độ dài khoảng phân ly nghiệm sau mỗi bước lặp:
  - Bước 1: $(c-a)/2^1$
  - Bước 2: $(c-a)/2^2$
  - Bước n: $(c-a)/2^n$
- Cho trước độ chính xác ε, thì số bước lặp cần thiết là số nguyên n thỏa mãn:

$$\frac{c-a}{2^n} \le \varepsilon \quad => n \ge \log_2 \frac{c-a}{\varepsilon}$$

- Vậy số bước lặp cần thiết là: $=> n = \left\lceil \log_2 \frac{c-a}{\varepsilon} \right\rceil$

Giải PTPT: Phương pháp chia đôi (3)

- VD: PT $e^x - 2 = 0$ có nghiệm nằm trong khoảng [0,2]. Tìm nghiệm với sai số cho phép 0.01
  - Đặt a = 0, c = 2, => f(a)*f(c) = -1*5.389 < 0
  - Bước lặp 1:
    - Đặt b = (2-0)/2 = 1; f(b) = 0.718
    - Kiểm tra: f(a)*f(b) < 0, => [0,1] là khoảng phân ly nghiệm mới
  - Bước lặp 2:
    - Đặt b = (1-0)/2 = 0.5; f(b) = - 0.351
    - Kiểm tra: f(b)*f(c) < 0, => [0.5,1] là khoảng phân ly nghiệm mới
  - ....

Giải PTPT: Phương pháp chia đôi (4)

Lần lặp	a	b	c	f(a)	f(b)	f(c)	Sai số (độ dài khoảng PLN)
1	0	1	2	-1	0.718	5.3890	1
2	0	0.5	1	-1	-0.351	0.718	0.5
3	0.5	0.75	1	-0.351	0.117	0.718	0.25
4	0.5	0.625	0.75	-0.351	-0.132	0.117	0.125
5	0.625	0.688	0.75	-0.132	-0.011	0.117	0.0625
6	0.688	0.719	0.75	-0.011	0.058	0.117	0.03125
7	0.688	0.703	0.719	-0.011	0.020	0.052	0.015625
8	0.688	0.695	0.703	-0.011	0.004	0.020	0.0078125

- Ghi chú: số bước lặp: $=> n = \left\lceil \log_2 \frac{2-0}{0.01} \right\rceil = \lceil \log_2 200 \rceil = 8$

Giải PTPT: Phương pháp chia đôi (5)

- Yêu cầu và tính năng:
  – Yêu cầu phải biết trước khoảng phân ly nghiệm
  – Không đòi hỏi tính liên tục của đạo hàm bậc nhất
  – Có thể giải kiểu PTPT bất kỳ
  – Có thể áp dụng cho hàm không biểu diễn dưới dạng giải tích

Giải PTPT: Phương pháp chia đôi (6)

- Bài tập: Viết chương trình Matlab giải phương trình phi tuyến bằng phương pháp chia đôi

Giải PTPT: Phương pháp dây cung (1)

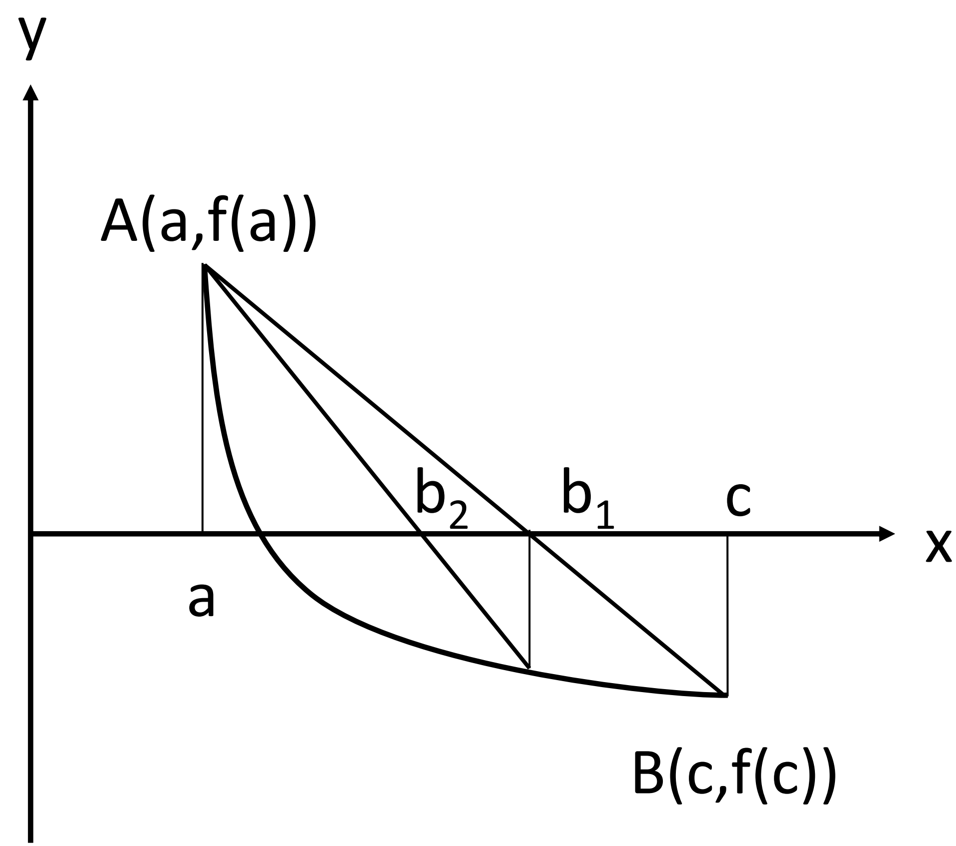
- Thay vì chia đôi khoảng phân ly nghiệm, phương pháp dây cung sử dụng đoạn thẳng đi qua hai đầu mút của khoảng phân ly nghiệm để tìm khoảng phân ly nghiệm mới
- Giả sử [a,c] là khoảng phân ly nghiệm, PT đường thẳng đi qua 2 điểm A(a,f(a)) và B(c,f(c)), gọi là dây cung AB, là:

$$y = f(a) + \frac{f(c) - f(a)}{c - a}(x - a) \ldots hay \ldots x = a + \frac{c - a}{f(c) - f(a)}(y - f(a))$$

- Điểm b được tìm bằng giao điểm của AB và trục hoành, tức y=0, do đó:

$$b = a - \frac{c - a}{f(c) - f(a)} f(a) = \frac{af(c) - cf(a)}{f(c) - f(a)}$$

Giải PTPT: Phương pháp dây cung (2)



Giải PTPT: Phương pháp dây cung (3)

- Khác so với phương pháp chia đôi:
  - Không đặt b=(c-a)/2
  - Đặt:

$$b = \frac{af(c) - cf(a)}{f(c) - f(a)}$$

Giải PTPT: Phương pháp dây cung (4)

- Yêu cầu và tính năng:
  - Yêu cầu phải biết trước khoảng phân ly nghiệm
  - Có thể giải kiểu PTPT bất kỳ
  - Hội tụ nhanh nếu hàm có dạng phép nội suy tuyến tính; hội tụ chậm nếu khoảng phân ly nghiệm lớn.

Giải PTPT: Phương pháp Newton (1)

- Ý tưởng:
  - Thay PTPT $f(x) = 0$ bằng một phương trình tuyến tính với x.
  - Yêu cầu biết nghiệm xấp xỉ ban đầu
  - Dựa trên khai triển Taylor

Giải PTPT: Phương pháp Newton (2)

- Xét PT f(x) = 0, f(x) khả vi liên tục đến cấp n trong khoảng $[x_{0,}x]$, khả vi cấp n+1 trong khoảng $(x_{0,}x)$; khai triển Taylor cho hàm f(x) là:

$$f(x)=f(x_0)+\frac{(x-x_0)}{1!}f'(x_0)+\frac{(x-x_0)^2}{2!}f''(x_0)+\ldots+\frac{(x-x_0)^n}{n!}f^{(n)}(x_0)+\frac{(x-x_0)^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi)$$

trong đó ξ thuộc (x_o,x). Ký hiệu h = x - x_o, ta có:

$$f(x)=f(x_0)+(x-x_0)f'(x_0)+o(h^2)$$

- Một cách xấp xỉ: $f(x)=f(x_0)+(x-x_0)f'(x_0)$
- Vậy giải PT f(x)=0 ⬄ giải PT

$$f(x_0)+(x-x_0)f'(x_0)=0 \Rightarrow x=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

Giải PTPT: Phương pháp Newton (3)

- Thủ tục lặp để giải PTPT bằng phương pháp Newton:
  - Chọn nghiệm xấp xỉ x_0
  - Tìm nghiệm theo công thức lặp

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}, k = 1,2,\ldots$$

  - Kết thúc khi:

$$\left|f(x_k)\right| < \varepsilon$$

Giải PTPT: Phương pháp Newton (4)

- Nhận xét:
  - Đòi hỏi tính đạo hàm bậc nhất.
  - Tốc độ hội tụ bình phương

Giải PTPT: Phương pháp Newton (6)

- VD: Giải PT sau: $f(x) = x^2 – 4 \sin(x) = 0$:
  - Ta có: $f'(x) = 2x – 4 \cos(x)$
  - Suy ra công thức lặp Newton:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^{\ 2} - 4\sin(x_n)}{2x_n - 4\cos(x_n)}$$

  - Lấy $x_0 = 3$, ta có kết quả như bảng sau:

Bước lặp	x	f(x)
0	3	8.346
1	2.153	1.295
2	1.954	0.108

Giải PTPT: Phương pháp Newton (7)

- Bài tập: Viết chương trình Matlab giải PTPT bằng phương pháp Newton

Giải PTPT: Phương pháp cát tuyến

- Phương pháp Newton

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}, k = 1,2,\ldots$$

- Ý tưởng: Thay việc tính đạo hàm trong phương pháp Newton bằng việc tính sai phân xấp xỉ dựa trên hai bước lặp liên tiếp.
- Phương pháp cát tuyến:

$$S_{k-1} = f'(x_{k-1}) = \frac{f(x_{k-1}) - f(x_{k-2})}{x_{k-1} - x_{k-2}}; \quad x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{S_{k-1}}, k = 1,2,\ldots$$

  – Cần hai điểm xuất phát: x_0 và x_1

Giải PTPT: Phương pháp lặp (1)

- Ý tưởng:
  – Thay vì bài toán tìm x để $f(x) = 0$, người ta viết bài toán dưới dạng: tìm x thỏa mãn

$$x = g(x) \qquad (1)$$

- Định nghĩa: Điểm x^* là điểm bất động của hàm g nếu $x^* = g(x^*)$, nghĩa là x^* không bị biến đổi bởi ánh xạ g. Bài toán (1) gọi là bài toán điểm bất động

Giải PTPT: Phương pháp lặp (2)

- Các ví dụ:
  - Phương pháp Newton, vì $x_k = x_{k-1} - \dfrac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}, k = 1,2,\ldots$

    Nên có thể đặt $g(x) = x - \dfrac{f(x)}{f'(x)}$, ta được phương pháp lặp

  - Tìm nghiệm của PT: $f(x) = x - e^x$, => $g(x) = e^x$
  - Tìm nghiệm của PT: $f(x) = x^2 – x – 2$, => $g(x) = x^2 – 2$
- Công thức giải PTPT bằng phương pháp lặp

$$x_k = g(x_{k-1});\ k = 1, 2, \ldots$$

Giải PTPT: Phương pháp Bairstow (1)

- Ý tưởng:
  - Dùng để tìm nghiệm của một đa thức
  - Chia đa thức thành các nhân tử bậc 2, => việc tìm nghiệm của đa thức được thay bằng tìm nghiệm của các đa thức bậc 2

Giải PTPT: Phương pháp Bairstow (2)

- Mô tả phương pháp Bairstow:
  - Xét đa thức bậc N:

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \ldots + a_Nx^N \qquad (1)$$

Ta có thể viết dưới dạng:

$$y = (x^2 + px + q)*G(x) + R(x) \qquad (2)$$

- p, q chọn tùy ý
- G(x) là đa thức bậc N-2:

$$G(x) = b_2 + b_3x + b_4x^2 + \ldots + b_Nx^{N-2} \qquad (3)$$

- R(x) là phần dư, thường là bậc 1:

$$R(x) = b_0 + b_1x \qquad (4)$$

Giải PTPT: Phương pháp Bairstow (3)

- Nếu chọn được p, q sao cho R(x) = 0 thì $x^2 + px + q$ là nhân tử bậc 2 của y và nghiệm của nó được tính theo công thức:

$$-p \pm \frac{\sqrt{p^2 - 4q}}{2}$$

- Vì b_0 và b_1 phụ thuộc vào cách chọn p, q, nên ta có thể viết:

$$b_0 = b_0(p,q) \qquad (5a)$$

$$b_1 = b_1(p,q)$$

- Bây giờ ta phải tìm p = p*, q = q* để

$$b_0(p^*,q^*) = 0 \qquad (5b)$$

$$b_1(p^*,q^*) = 0$$

khi đó ta sẽ có: R(x) = 0

Giải PTPT: Phương pháp Bairstow (4)

– Thay (3) và (4) vào (2) và viết phương trình thu được theo dạng chuỗi lũy thừa. Bởi vì phương trình này phải bằng phương trình (1), nên bằng cách cân bằng hệ số ta có:

$a_N = b_N$

$a_{N-1} = b_{N-1} + p*b_N$

$a_{N-2} = b_{N-2} + p*b_{N-1} + q*b_N$

.... (6)

$a_2 = b_2 + p*b_3 + q*b_4$

$a_1 = b_1 + p*b_2 + q*b_3$

$a_0 = b_0 + q*b_2$

Giải PTPT: Phương pháp Bairstow (5)

– Viết lại PT (6), các hệ số b_0, b_1, ..., b_n, có thể tính được như sau:

$$
\begin{aligned}
&b_N = a_N \\
&b_{N-1} = a_{N-1} - p*b_N \\
&b_{N-2} = a_{N-2} - p*b_{N-1} - q*b_N \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \qquad\qquad (7) \\
&b_2 = a_2 - p*b_3 - q*b_4 \\
&b_1 = a_1 - p*b_2 - q*b_3 \\
&b_0 = a_0 - q*b_2
\end{aligned}
$$

Giải PTPT: Phương pháp Bairstow (6)

- Coi p, q trong PT (5a) như là một lân cận của p* và q*, khai triển Taylor cho PT (5b) ta có:

$$b_0(p^*,q^*) = b_0(p,q) + \Delta p\left(\frac{\partial b_0}{\partial p}\right) + \Delta q\left(\frac{\partial b_0}{\partial q}\right) + \ldots = 0 \qquad (8)$$

$$b_1(p^*,q^*) = b_1(p,q) + \Delta p\left(\frac{\partial b_1}{\partial p}\right) + \Delta q\left(\frac{\partial b_1}{\partial q}\right) + \ldots = 0$$

trong đó Δp = p* - p; Δq = q^* – q

- Từ (8) ta có:

$$\Delta p\left(\frac{\partial b_0}{\partial p}\right) + \Delta q\left(\frac{\partial b_0}{\partial q}\right) = -b_0(p,q) \qquad (9)$$

$$\Delta p\left(\frac{\partial b_1}{\partial p}\right) + \Delta q\left(\frac{\partial b_1}{\partial q}\right) + = -b_1(p,q)$$

Giải PTPT: Phương pháp Bairstow (7)

- Trong PT (9), đạo hàm riêng được tính bằng cách đạo hàm hai vế của PT (7):
  - Đạo hàm theo p:

$$(b_N)_p = 0$$

$$(b_{N-1})_p = -b_N - p^*(b_N)_p$$

$$(b_{N-2})_p = -b_{N-1} - p^*(b_{N-1})_p - q^*(b_N)_p$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \qquad (10)$$

$$(b_2)_p = -b_3 - p^*(b_3)_p - q^*(b_4)_p$$

$$(b_1)_p = -b_2 - p^*(b_2)_p - q^*(b_3)_p$$

$$(b_0)_p = -q^*(b_2)_p$$

Giải PTPT: Phương pháp Bairstow (8)

– Đạo hàm theo q:

$(b_N)_q = 0$

$(b_{N-1})_q = 0$

$(b_{N-2})_q = -b_N$

………………….. (11)

$(b_2)_q = -b_4 - p^*(b_3)_q - q^*(b_4)_q$

$(b_1)_q = -b_3 - p^*(b_2)_q - q^*(b_3)_q$

$(b_0)_q = -b_2 - q^*(b_2)_q$

Giải PTPT: Phương pháp Bairstow (8)

- Tóm tắt phương pháp Bairstow:
  - (1) Khởi tạo giá trị p, q; tính b_0, b_1 theo (7);
  - (2) Tính $(b_0)_p$, $(b_1)_p$, $(b_0)_q$, $(b_1)_q$ theo (10) và (11);
  - (3) Giải (9) để tìm Δp và Δq;
  - (4) Tìm p* và q* theo công thức: $p^*=p+\Delta p; q^*=q+\Delta q$

  Các bước trên được lặp lài nhờ sử dụng p*, q* của bước trước như là giá trí khởi tạo p, q của bước sau.

Một số hàm trên MatLab để giải phương trình

- Tìm nghiệm của đa thức: roots
- Tìm nghiệm của phương trình phi tuyến: FZERO

Parallel Programming

TS. Vũ Văn Thiệu

email: thieuvv@soict.hust.edu.vn

Tel: 0982 928 307

Bộ môn: Khoa học máy tính

P 602, B1

Tổng quan về tính toán song song

Current computing platform

- PC
  - Multi CPUs
  - Multi cores per CPU
  - Multi threads per core
- Super computer
  - Multi CPUs
- Cluster/Cloud/Grid
  - Multi PCs
- GPGPU
  - Multi threads

⇒ A normal (traditional) serial program executed by one thread

⇒ How to use multi threads/cores/CPUs/PCs efficiently: Distributed/parallel program

High Performance Computing Problems

- Weather forecast model
- Climate model
- Medical imaging
- Financial trading
- Oil and Gas
- Bioscience
- Data compression, coder/decoder

⇒A normal (traditional) serial program:

  ⇒run time hours/days/years

⇒How to run HPC programs in a reasonable time:

  ⇒Distributed/parallel program

Nhu cầu tính toán hiệu năng cao

- Oregon State University:
  - Mô phỏng các dòng chảy lưu thông của đại dương → xác định nguyên nhân gây trái đất đang nóng dần lên.
  - Phân chia đại dương thành:
    - 4096 vùng từ đông sang tây.
    - 1024 vùng từ bắc sang nam.
    - 12 tầng biển.
    - → ~ 50 triệu khối trong không gian 3 chiều.
  - Mô phỏng lưu thông thực hiện ~ 30 tỷ phép tính trong 10 phút. Công việc này thực hiện liên tục trong năm.

Nhu cầu tính toán hiệu năng cao

- Dự báo thời tiết (weather forecasting):
  - Chia bầu khí quyển theo không gian 3 chiều, mỗi khối kích thước 1mile x 1mile x 1mile.
  - Ước tính khoảng 5×10^8 khối (cells).
  - Trên mỗi khối cần thực hiện ~ 200 phép toán → cần thực hiện ~ 10^{11} phép toán.
  - Nếu cần dự báo cho 1 tuần, chu kỳ 1 phút → cần thực hiện 10^4 lần, mỗi lần 10^{11} phép toán.
  - Siêu máy tính có thể thực hiện: 10^9 phép toán trên 1 giây → cần 10^6 giây ~ 10 ngày để thực hiện.

Nhu cầu tính toán hiệu năng cao

- Mô phỏng tương tác của các protein với phân tử nước (Levin 1990):
  - Thực hiện trên máy Cray X/MP (~800 triệu phép toán / 1 giây): để mô phỏng 10^{-12} giây phản ứng protein cần 1 giờ thực hiện.
  - Nếu mô phỏng một phản ứng thực sự trên cùng máy Cray X/MP cần 31,688 năm.

Nhu cầu tính toán hiệu năng cao

- Yêu cầu về thực nghiệm nghiên cứu, mô phỏng → giải quyết những bài toán có khối lượng tính toán lớn trong một khoảng thời gian chấp nhận được.
- Phương hướng giải quyết vấn đề:
  - Thực hiện trên các siêu máy tính mạnh.
  - Thực hiện phân chia công việc thực hiện song song trên hệ thống các máy tính.

Chương 5

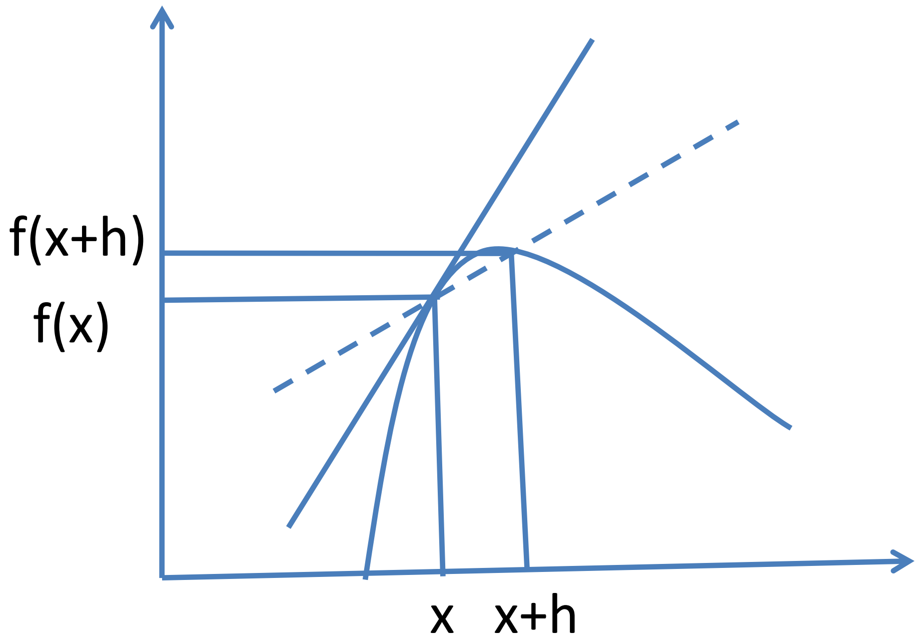
TÍNH GẦN ĐÚNG
ĐẠO HÀM VÀ TÍCH PHÂN

5.1. Tính gần đúng đạo hàm: đặt vấn đề

- Định nghĩa đạo hàm bậc nhất:

$$f^{'}(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

- Ý nghĩa hình học:
  - f'(x) là hệ số góc của tiếp tuyến tại điểm x



- Tính gần đúng đạo hàm:
  - h ≠ 0
  - f'(x) là hệ số góc của cát tuyến

5.1.1. Công thức sai phân thuận (Forward difference)

- Xây dựng công thức : Xét khai triển Taylor của hàm f tại lân cận x:

$$f(x+h) = f(x) + f^{'}(x)h + f^{''}(\zeta)\frac{h^2}{2!} \qquad (1)$$

Trong đó ξ thuộc đoạn [x,x+h].

Từ (1) ta có:

$$f^{'}(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + f^{''}(\zeta)\frac{h}{2!} \qquad (2)$$

Coi số hạng f’’(ξ) h/2 là sai số rút gọn, từ (2) suy ra:

$$f^{'}(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \qquad (3)$$

Là công thức tính gần đúng ĐH theo PP sai phân thuận

CT sai phân thuận: Phân tích sai số

- Sai số rút gọn là: f''(ξ) h/2= O(h)

⇒Phương pháp có độ chính xác bậc nhất

- Sai số làm tròn: Giả sử khi tính f(x) và f(x+h) có sai số làm tròn, công thức tính f':

$$\frac{f(x+h)(1+\delta_1)-f(x)(1+\delta_2)}{h}=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}+\frac{\delta_1 f(x+h)-\delta_2 f(x)}{h}$$

Do |δi| nhỏ hơn độ chính xác của máy tính ε nên sai số làm tròn khi tính f' là:

$$\frac{\varepsilon(|f(x+h)|+|f(x)|)}{h}$$

- Sai số tổng cộng đạt tối thiểu khi: $h \approx \sqrt{\varepsilon}$

CT sai phân thuận: Ví dụ

- Xét hàm: $f(x) = \sin x$. Sử dụng CT sai phân thuận để tính gần đúng $f'(\pi/3)$. Phân tích sai số.
  - Tính với $h=10^{-k}$, $k = 1,\dots,16$
  - Tìm h để có sai số nhỏ nhất

Kết quả

h	Đạo hàm	Sai số
10^{-1}	0.455901885410761	-0.044098114589239
10^{-2}	0.495661575773687	-0.004338424226313
10^{-3}	0.499566904000770	-0.000433095999230
10^{-4}	0.499956697895820	-0.000043302104180
10^{-5}	0.499995669867026	-0.000004330132974
10^{-6}	0.499999566971887	-0.000000433028113
10^{-7}	0.499999956993236	-0.000000043006764
10^{-8}	0.499999996961265	-0.000000003038736
10^{-9}	0.500000041370186	0.000000041370185

5.1.2. Công thức sai phân ngược (Backward difference)

- Xây dựng công thức: Tương tự như trong CT sai phân thuận,khai triển Taylor với x-h thay vì x+h, ta có:

$$f^{'}(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \qquad (1)$$

- Sai số: Tương tự như trong CT sai phân thuận
  - Độ chính xác bậc nhất
  - Sai số nhỏ nhất khi: $h \approx \sqrt{\varepsilon}$

- Bài tập: Sử dụng CT sai phân ngược để tính gần đúng f'(π/3), biết f(x) = sin x

5.1.3. Công thức sai phân trung tâm (Central difference)

- Xây dựng công thức : Xét khai triển Taylor của hàm f tại lân cận x:

$$f(x-h)=f(x)-f^{'}(x)h+f^{''}(x)\frac{h^2}{2!}-f^{'''}(\zeta^-)\frac{h^3}{3!} \qquad (1)$$

$$f(x+h)=f(x)+f^{'}(x)h+f^{''}(x)\frac{h^2}{2!}+f^{'''}(\zeta^+)\frac{h^3}{3!} \qquad (2)$$

Trong đó ξ^+ thuộc đoạn [x,x+h], ξ^- thuộc đoạn [x-h,x].

Từ (1) và (2) ta có công thức tính gần đúng ĐH theo PP sai phân trung tâm

$$f^{'}(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \qquad (3)$$

CT sai phân trung: Phân tích sai số

- Sai số rút gọn:

$$-\frac{1}{6}f'''(\zeta)h^2, \qquad \zeta \in [x-h, x+h]$$

  - CT có độ chính xác bậc 2;
  - Sai số tổng cộng bé nhất khi $h = \varepsilon^{1/3}$

- Bài tập: Sử dụng PP sai phân trung tâm để tính gần đúng $f'(\pi/3)$, biết $f(x) = \sin x$. So sánh với PP sai phân thuận và sai phân ngược

So sánh sai số 3 phương pháp

h	**Sai phân thuận**	**Sai phân ngược**	**Sai phân trung tâm**
10^{-1}	$\sim 10^{-2}$	$\sim 10^{-2}$	$\sim 10^{-4}$
10^{-2}	$\sim 10^{-3}$	$\sim 10^{-3}$	$\sim 10^{-6}$
10^{-3}	$\sim 10^{-4}$	$\sim 10^{-4}$	$\sim 10^{-8}$
10^{-4}	$\sim 10^{-5}$	$\sim 10^{-5}$	$\sim 10^{-10}$
10^{-5}	$\sim 10^{-6}$	$\sim 10^{-6}$	**$\sim 10^{-12}$**
10^{-6}	$\sim 10^{-7}$	$\sim 10^{-7}$	$\sim 10^{-11}$
10^{-7}	$\sim 10^{-8}$	$\sim 10^{-8}$	$\sim 10^{-10}$
10^{-8}	**$\sim 10^{-9}$**	**$\sim 10^{-9}$**	$\sim 10^{-9}$
10^{-9}	$\sim 10^{-8}$	$\sim 10^{-8}$	$\sim 10^{-8}$

5.1.4. Tính gần đúng đạo hàm cấp cao: Đạo hàm cấp 2

- Xét khai triển Taylor của hàm f tại lân cận x:

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + f''(h)\frac{h^2}{2!} - f'''(x)\frac{h^3}{3!} + f''''(x)\frac{h^4}{4!} - f'''''(x)\frac{h^5}{5!} + \ldots(1)$$

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + f''(h)\frac{h^2}{2!} + f'''(x)\frac{h^3}{3!} + f''''(x)\frac{h^4}{4!} + f'''''(x)\frac{h^5}{5!} + \ldots(2)$$

Từ (1) và (2) ta có công thức tính gần đúng ĐH bậc 2

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \qquad (3)$$

- Sai số rút gọn: $-\frac{1}{12}f''''(\zeta)h^2, \qquad \zeta \in [x-h, x+h]$
  - Sai số bé nhất khi h = $\varepsilon^{1/4}$

5.1.5. Tính gần đúng đạo hàm riêng

- Tương tự, ta có thể xây dựng các PP tính gần đúng đạo hàm riêng, ví dụ PP sai phân trung tâm tính đạo hàm riêng cho hàm f(x,y) như sau:

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} = \frac{f(x+h,y) - f(x-h,y)}{2h}$$

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial y} = \frac{f(x,y+h) - f(x,y-h)}{2h}$$

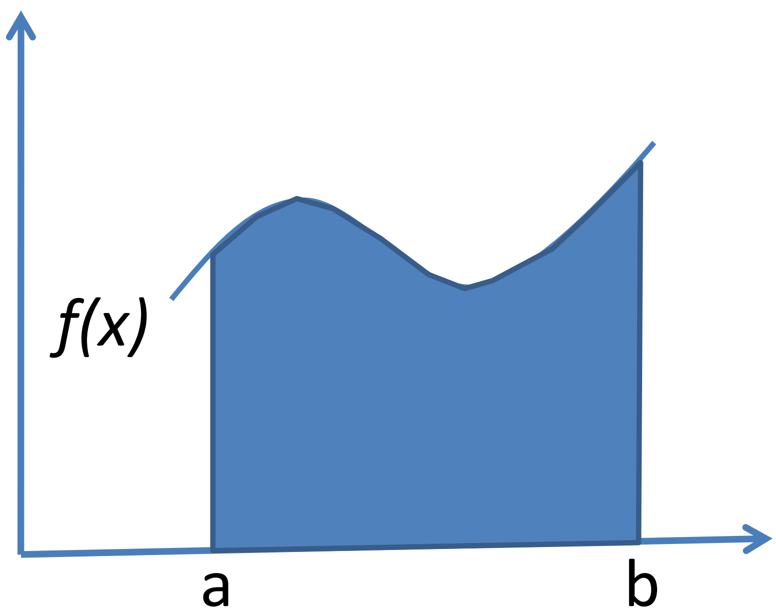
5.2. Tính gần đúng tích phân: đặt vấn đề

- Tính tích phân:

$$I = \int_a^b f(x)dx,$$

trong đó f(x) là hàm khả tích trên đoạn [a,b]

- Ý nghĩa hình học của tích phân:



5.2.1. Tính gần đúng tích phân: Tổng Riemann

- Giả sử hàm f xác định trên [a,b] và Δ là phép chia đoạn [a,b] thành n đoạn đóng $I_k=[x_{k-1},x_k]$, k=1,…,n, trong đó $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$. Chọn n điểm $\{c_k: k=1,\ldots,n\}$, mỗi điểm thuộc đoạn con, nghĩa là: c_k thuộc I_k với mọi k. Tổng

$$\sum_{k=1}^{n} f(c_k)\Delta x_k = f(c_1)\Delta x_1 + f(c_2)\Delta x_2 + \ldots + f(c_n)\Delta x_n$$

được gọi là tổng Riemann của hàm f(x) tương ứng với phép chia Δ và các điểm chọn lọc $\{c_k: k=1,\ldots,n\}$.

5.2.2. Tính gần đúng tích phân: Định nghĩa

- Tích phân xác định của hàm f(x) theo x từ a đến b là giới hạn của tổng Riemann

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{n\to\infty} \sum_{k=1}^{n} f(c_k)\Delta x_k,$$

-

Với giả thiết là giới hạn này tồn tại.

  – Hàm f(x) gọi là hàm cần tích phân

  – a, b là các cận tích phân

  – [a,b] là khoảng tích phân

5.2.3. Tính gần đúng tích phân: Các tính chất của tích phân xác định

$$\int_a^a f(x)dx = 0$$

$$\int_a^b f(x)dx = -\int_b^a f(x)dx$$

$$\int_a^b C.f(x)dx = C.\int_a^b f(x)dx$$

$$\int_a^b (f(x) + g(x))dx = \int_a^b f(x)dx + \int_a^b g(x)dx$$

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx, \qquad c \in [a,b]$$

5.2.4. Tính gần đúng tích phân: Các định lý

- ĐL1: Nếu f là liên tục trên [a,b] và F là nguyên hàm của hàm f (F’ = f) thì:

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$$

- ĐL2 (ĐL về giá trị trung bình): Nếu f là liên tục trên [a,b] thì tồn tại số c trong đoạn [a,b] sao cho:

$$f(c) = \frac{1}{b-a}\int_a^b f(x)dx$$

5.2.5. Tính gần đúng tích phân: Công thức Newton-Cotes (1)

- Cách tiếp cận đầu tiên để xây dựng công thức tính gần đúng tích phân là xấp xỉ hàm f(x) trên khoảng tích phân [a,b] bởi một đa thức. Trong mỗi khoảng con ta xấp xỉ hàm f(x) bởi một đa thức:

$$p_m(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \ldots + a_mx^m \qquad (1)$$

  Ta có thể dễ dàng tính chính xác tích phân của (1)
- Đơn giản nhất ta có thể thay hàm f(x) bởi đa thức nội suy.

Tính gần đúng tích phân: PP Newton-Cotes (2)

- Thay f(x) bằng đa thức nội suy Lagrange ta có:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_b^a \left(\sum_{i=0}^{m} \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{m} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} f(x_i) \right) dx$$

$$= \sum_{i=0}^{m} f(x_i) \int_a^b \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{m} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx \qquad (1)$$

Tính gần đúng tích phân: PP Newton-Cotes (3)

- Sai số của PP được đánh giá bởi:

$$\int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_m(x)dx = \frac{1}{(m+1)!}\int_b^a f^{(m+1)}(\zeta_x)\left(\prod_{i=0}^{m}(x-x_{i)}\right)dx$$

$$\zeta_x \in [a,b] \qquad (2)$$

Tính gần đúng tích phân: PP Newton-Cotes (4)

- Các công thức tính gần đúng tích phân thu được theo cách tiếp cận này trong đó sử dụng lưới chia cách đều trong khoảng tích phân, nghĩa là:

  $x_i = a+i*h$; $i=0,1,\ldots,m$; $h =(b-a)/m$,

  được gọi là công thức Newton-Cotes.
- Với m khác nhau, ta có các PP khác nhau

m	Bậc đa thức	Công thức	Sai số
1	Tuyến tính	Hình thang	$O(h^2)$
2	Bậc 2	Simpson 1/3	$O(h^4)$
3	Bậc 3	Simpson 3/8	$O(h^4)$

5.2.6. Tính gần đúng tích phân: Công thức hình thang (Trapezoidal rule)

- Với n=1, đa thức nội suy có dạng:

$$p_1(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b-a}(x-a)$$

$$\Rightarrow I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_1(x)dx = \int_a^b \left(f(a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a) \right) dx$$

$$\Rightarrow I = \frac{\left(f(a) + f(b)\right)}{2}\left(b-a\right) \qquad (1)$$

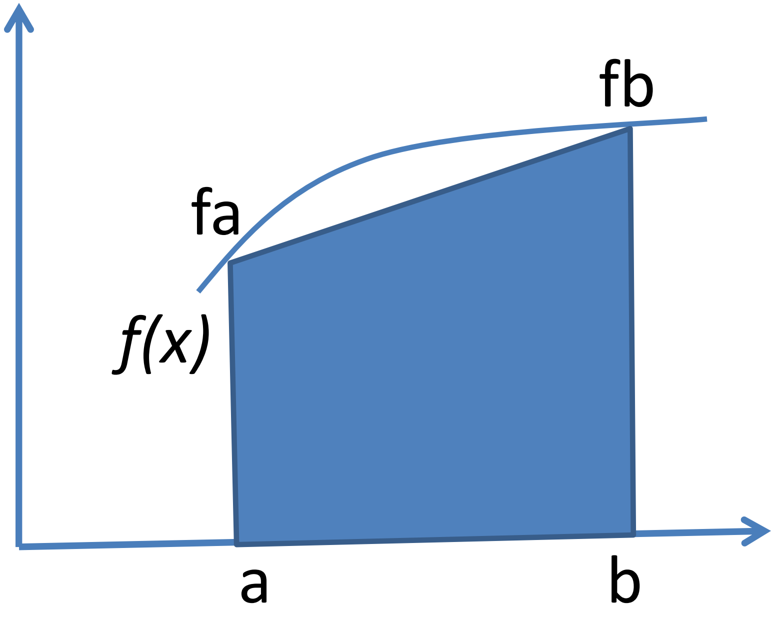
- (1) gọi là công thức hình thang tính gần đúng tích phân

Tính gần đúng tích phân: Công thức hình thang (2)

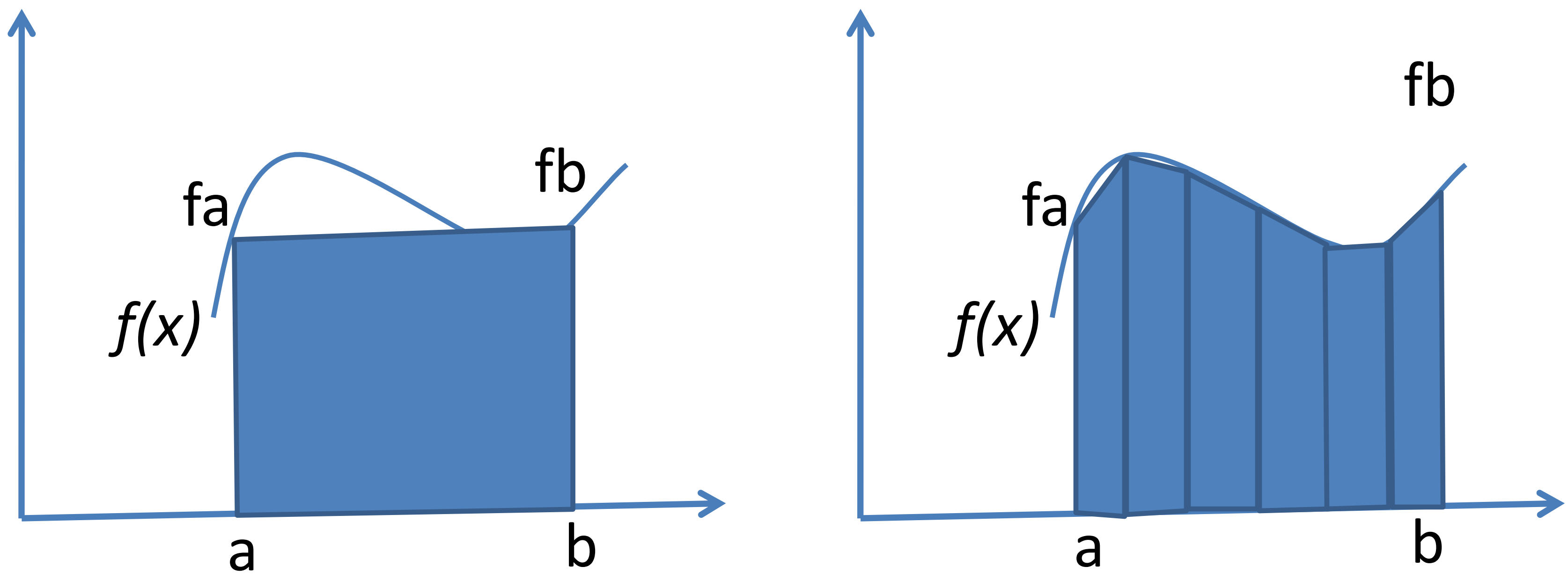
- Sai số của CT hình thang:

$$-\frac{b-a}{12} f''(\zeta) h^2, \qquad h = b - a, \quad \zeta \in [a, b]$$

- Ý nghĩa hình học:



5.2.7. Tính gần đúng tích phân: Công thức hình thang mở rộng (1)



- Ý tưởng công thức hình thang mở rộng: Chia nhỏ đoạn [a,b] để giảm sai số

Tính gần đúng tích phân: Công thức hình thang mở rộng (2)

- Chia đoạn [a,b] thành n khoảng bằng nhau dùng n+1 điểm: x_0 = a, x_1 = a + h, x_{n-1} = a + (n-1)*h, x_n = a + n*h trong đó h = (b-a)/n, ta có:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^{a+h} f(x)dx + \int_{a+h}^{a+2h} f(x)dx + \ldots + \int_{a+(n-1)h}^{a+nh} f(x)dx \qquad (1)$$

- Áp dụng công thức hình thang cho mỗi đoạn ta có:

$$I = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih) + f(b) \right] \qquad (2)$$

- (2) gọi là công thức hình thang mở rộng

5.2.8. Tính gần đúng tích phân: Công thức Simpson 1/3

- Thay n=2 vào công thức Newton-Cotes rồi tính tích phân, ta được:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]$$

$$x_0 = a, \qquad x_1 = a + h, \qquad x_2 = a + 2h = b, \qquad\qquad (1)$$

- (1) gọi là công thức Simpson 1/3

5.2.9. Tính gần đúng tích phân: Công thức Simpson 1/3 mở rộng

- Giống như CT hình thang mở rộng, ta chia đoạn tích phân [a,b] thành nhiều khoảng con và áp dụng CT Simpson 1/3 cho mỗi khoảng con, ta thu được CT Simpson mở rộng:

$$I = \int_a^b f(x)dx = (b-a)\frac{f(x_0) + 4\sum_{i=1,3,5,..}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{j=2,4,6,..}^{n-2} f(x_j) + f(x_n)}{3n}$$

$$x_0 = a, \quad x_i = a + ih, \quad i = 1,...,n, \quad (1)$$

- Chú ý: Ta cần số khoảng con chẵn, hay số điểm lẻ.

5.2.10. Tính gần đúng tích phân: Công thức Simpson 3/8

- Thay n=3 vào công thức Newton-Cotes rồi tính tích phân, ta được:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \frac{3h}{8}\left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)\right]$$

$$x_0 = a, \qquad x_1 = a + h, \qquad x_2 = a + 2h, \qquad x_3 = a + 3h \qquad\qquad (1)$$

- (1) gọi là công thức Simpson 3/8