

# TÍNH TOÁN KHOA HỌC

## Scientific Computing

**GIẢNG VIÊN: TS. VŨ VĂN THIỆU**

**Bộ môn Khoa học Máy tính**

**Viện Công nghệ thông tin và truyền thông**

**Đại học Bách khoa Hà nội**

*Office: P.602, B1*

*Tel: 0982928307*

*Email: [thieuvv@soict.hust.edu.vn](mailto:thieuvv@soict.hust.edu.vn)*

# Các ví dụ về tính toán khoa học

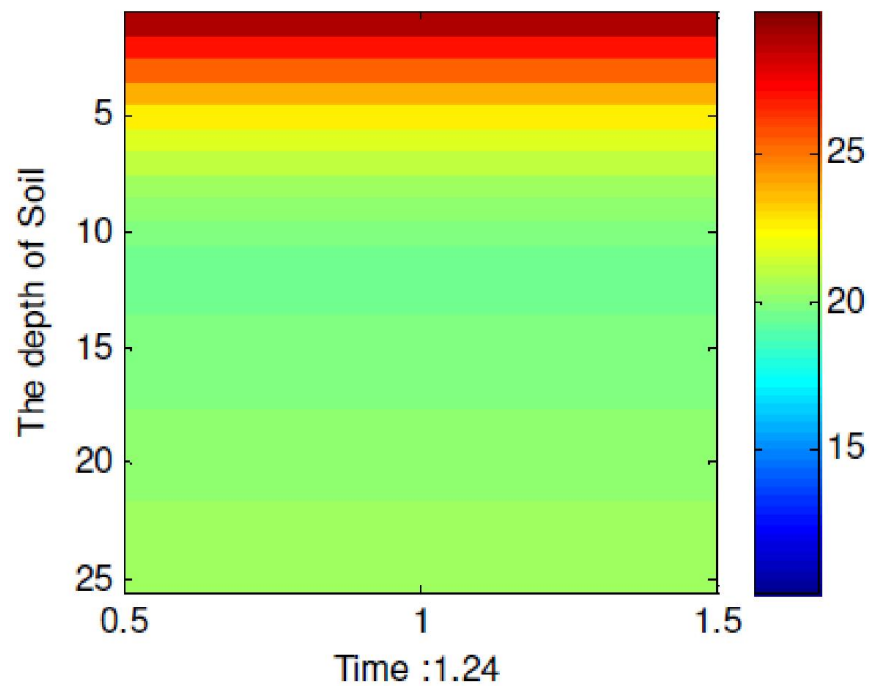
# VD1: Phương trình nhiệt

$$C * \frac{\delta T}{\delta t} = \lambda * \frac{\delta^2 T}{\delta z^2}$$

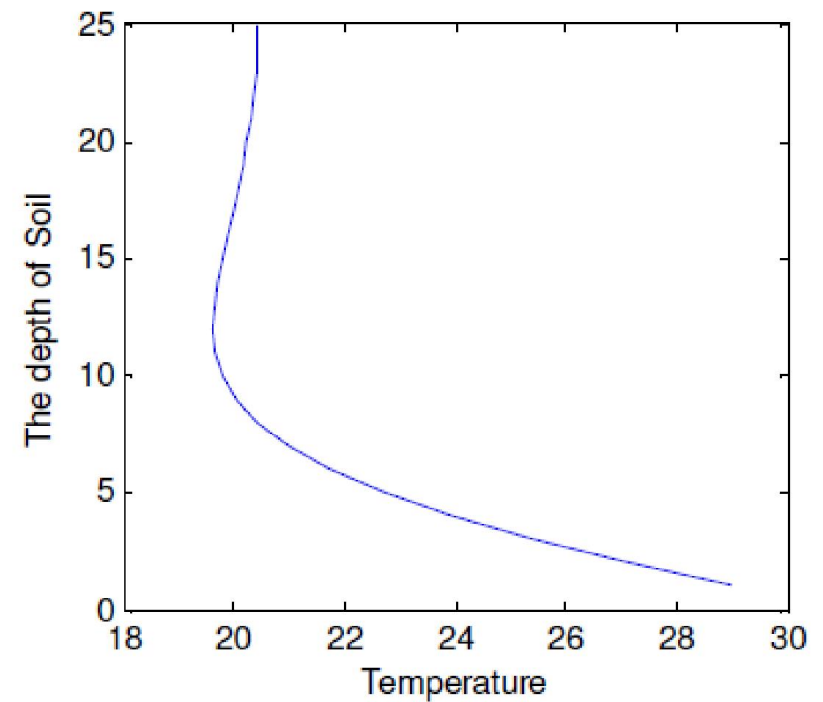
Where:

- + T : temperature  $^{\circ}\text{C}$
- + t : time day
- + z : height in the soil column m
- + C : volumetric heat capacity  $\text{J}/^{\circ}\text{C} * \text{day}$
- +  $\lambda$  : heat conductivity  $\text{J}/\text{m}^3 * ^{\circ}\text{C} * \text{day}$

# Kết quả VD1



*Figure 1: The soil temperature changes according to the surface temperature*



*Figure 2: The temperature at top of soil changes faster than that at bottom of soil*

## VD2: Mô hình dự báo mực nước sông, suối

$$\frac{\partial S}{\partial t} = I - D - E$$

$$I = a * P$$

$$D = b * (S - c)$$

$$E = \frac{d * E_0 * S}{c}$$

$S$  : Canopy water storage

$t$  : time

$D$  : Drainage rate

$E$  : Evaporation

$I$  : Interception rate

$a$  : Interception efficiency

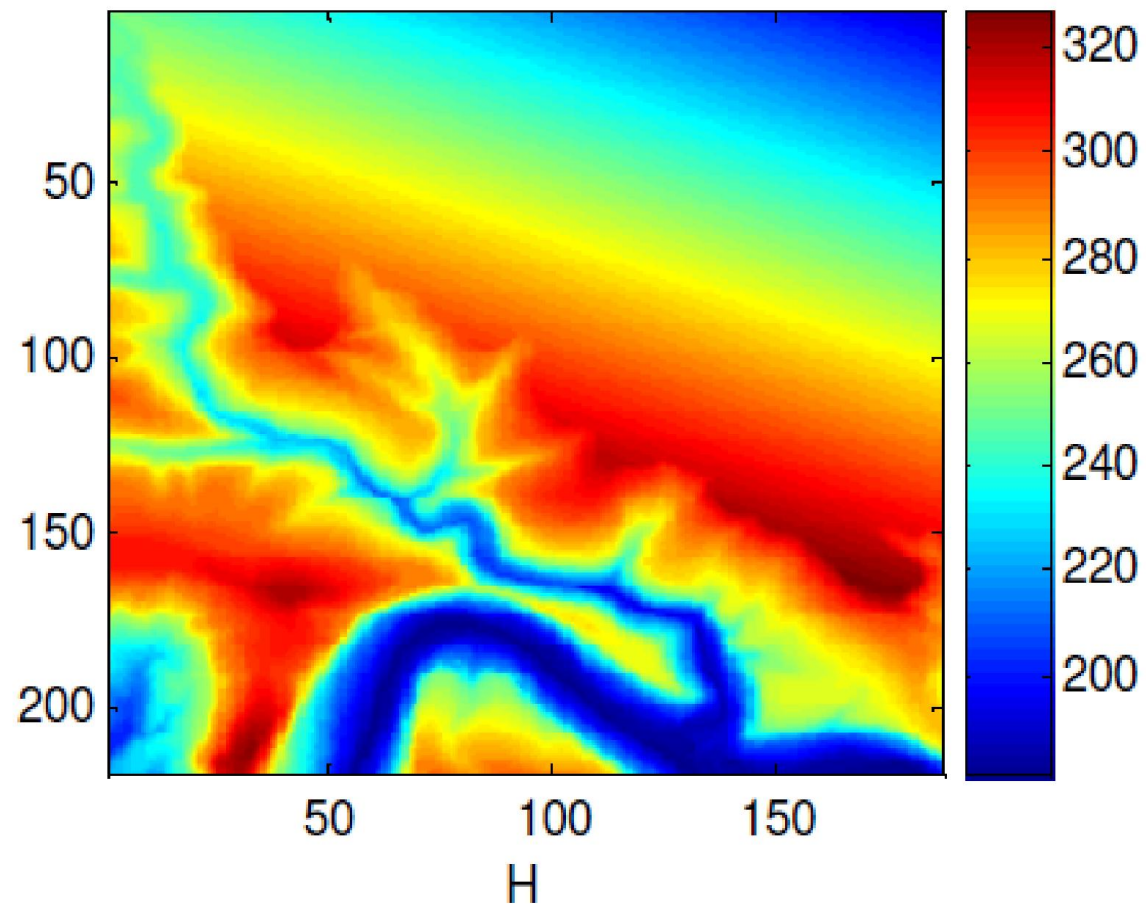
$b$  : Drainage parameter

$c$  : Canopy water storage capacity

$d$  : Evaporation efficiency parameter

$E_0$  : Measured boundary condition

# Kết quả VD2



*Fig 14: The height of  $H$  after 50 days*

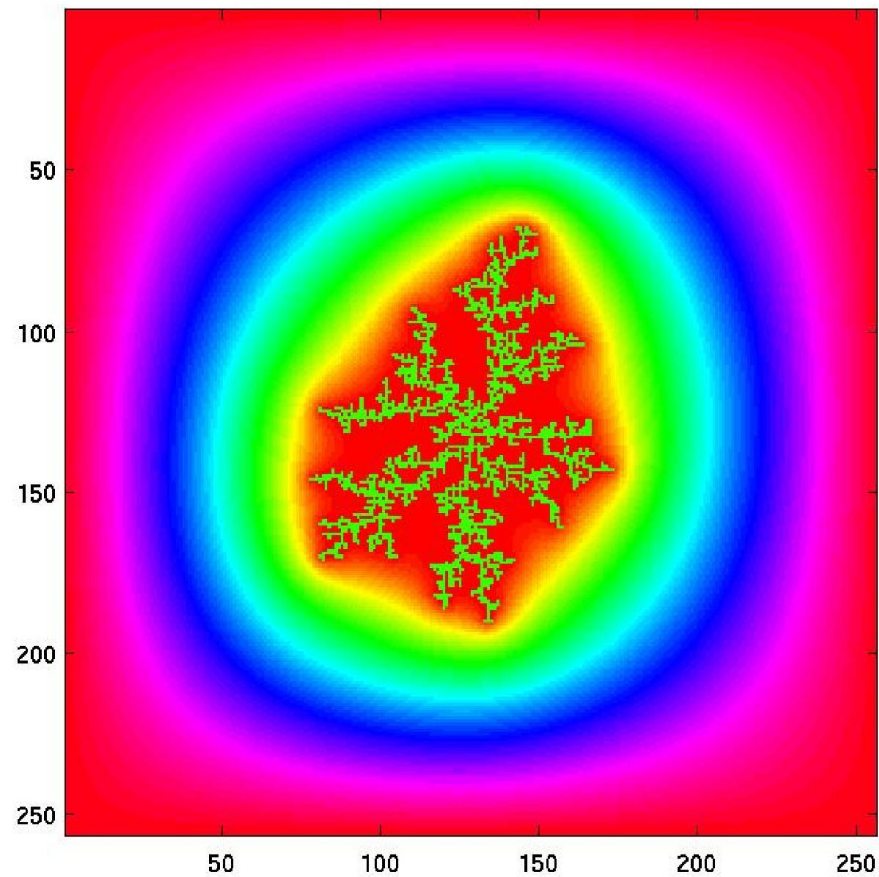
## VD3: Mô hình phát triển của vi khuẩn

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c$$

$$c_{i,j}^{(k+1)} = \frac{\omega}{4} [c_{i+1,j}^{(k)} + c_{i-1,j}^{(k+1)} + c_{i,j+1}^{(k)} + c_{i,j-1}^{(k+1)}] + (1-\omega)c_{i,j}^{(k)}$$



# Kết quả của VD3



# VD4: Mô hình dòng chảy chất lỏng

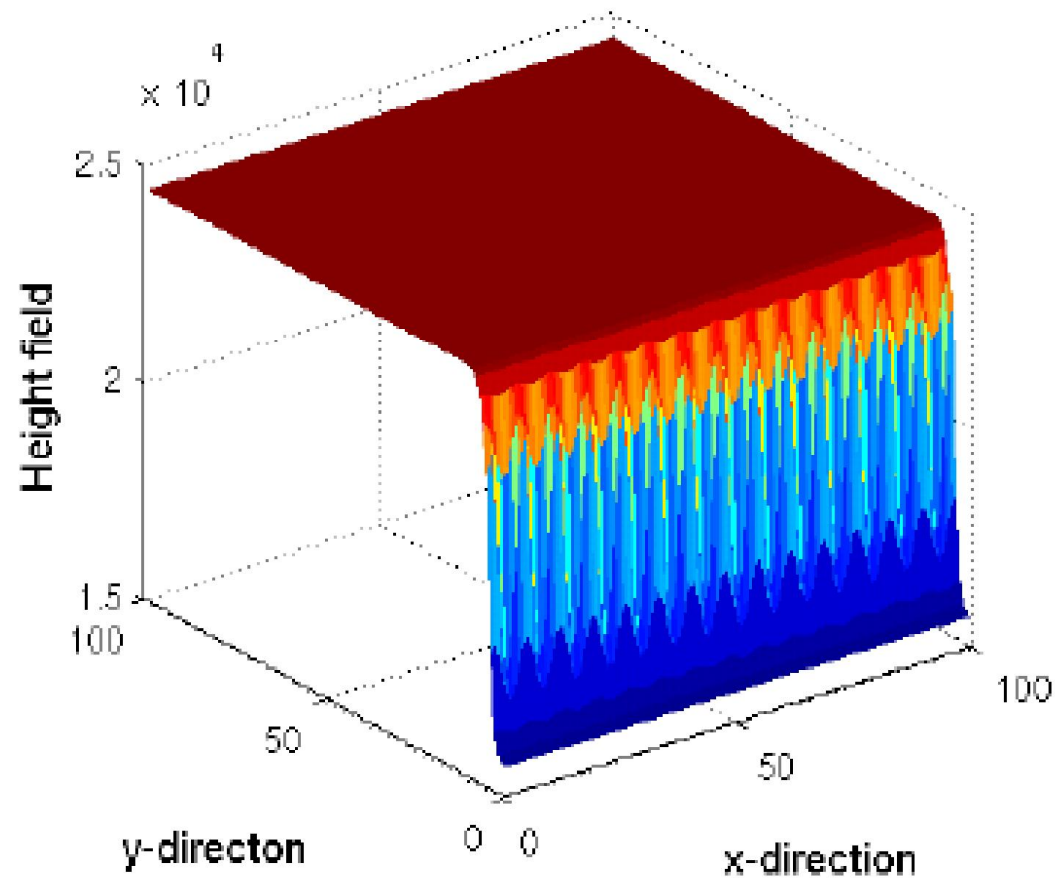
$$\frac{\partial U}{\partial t} = fV - UU_x - VU_y - gH_x,$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -fU - UV_x - VV_y - gH_y,$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -(UH)_x - (VH)_y,$$

$$\begin{aligned} HTcol_{i,j,k,j,k} := & \left( \begin{aligned} & 7.95454545454545E - 7 * \\ & \left( \begin{aligned} & 1/2 * \left( H_{i+1,j} * (1 - Gp_{3e}) + H_{i+1,j+1} * (Gp_{3e} + 1) \right) \\ & - 1/2 * \left( H_{i,j} * (1 - Gp_{3e}) + H_{i,j+1} * (Gp_{3e} + 1) \right) \end{aligned} \right) \\ & * \left( \begin{aligned} & 1/2 * (1 - Gp_{3e}) * (U_{i,j} * (1 - Gp_{3e}) + U_{i,j+1} * (Gp_{3e} + 1)) \\ & + 1/2 * (Gp_{3e} + 1) * (U_{i+1,j} * (1 - Gp_{3e}) + U_{i+1,j+1} * (Gp_{3e} + 1)) \end{aligned} \right) \end{aligned} \right) \\ & - \left( \begin{aligned} & 1/4 * \left( \begin{aligned} & 1.59090909090909E - 6 * (1 - Gp_{3e}) * (H_{i,j+1} - H_{i,j}) + \\ & 1.59090909090909E - 6 * (Gp_{3e} + 1) * (H_{i+1,j+1} - H_{i+1,j}) \end{aligned} \right) \\ & * \left( \begin{aligned} & 1/2 * (1 - Gp_{3e}) * (V_{i,j} * (1 - Gp_{3e}) + V_{i,j+1} * (Gp_{3e} + 1)) \\ & + 1/2 * (Gp_{3e} + 1) * (V_{i+1,j} * (1 - Gp_{3e}) + V_{i+1,j+1} * (Gp_{3e} + 1)) \end{aligned} \right) \end{aligned} \right) \\ & - \left( \begin{aligned} & 1/4 * \left( \begin{aligned} & 1.59090909090909E - 6 * \\ & \left( (U_{i+1,j} * (1 - Gp_{3e}) + U_{i+1,j+1} * (Gp_{3e} + 1)) - \right. \right. \\ & \left. \left. (U_{i,j} * (1 - Gp_{3e}) + U_{i,j+1} * (Gp_{3e} + 1)) \right) \right) + 1/4 * \\ & \left( \begin{aligned} & 1.59090909090909E - 6 * \\ & \left( (1 - Gp_{3e}) * (V_{i,j+1} - V_{i,j}) + (Gp_{3e} + 1) * (V_{i+1,j+1} - V_{i+1,j}) \right) \end{aligned} \right) \\ & * \left( \begin{aligned} & 1/2 * (1 - Gp_{3e}) * (H_{i,j} * (1 - Gp_{3e}) + H_{i,j+1} * (Gp_{3e} + 1)) \\ & + 1/2 * (Gp_{3e} + 1) * (H_{i+1,j} * (1 - Gp_{3e}) + H_{i+1,j+1} * (Gp_{3e} + 1)) \end{aligned} \right) \end{aligned} \right) \end{aligned} \right) \\ HT_{i,j} := & \left( \begin{aligned} & 1.571428571428E * Gw_{3e} * (1 - Gp_{3e}) * \\ & \left( \begin{aligned} & \left( \begin{aligned} & 1.571428571428E * (HTcol_{i,j,k,j,k} * Gw_{3e} * (1 - Gp_{3e}) \\ & + HTcol_{1-i,1-j,k,j,k} * Gw_{3e} * (Gp_{3e} + 1)) \end{aligned} \right) \text{ if } i = 1 \\ & \left( \begin{aligned} & 1.571428571428E * (HTcol_{i,j,k,j,k} * Gw_{3e} * (1 - Gp_{3e}) \\ & + HTcol_{1-i,1-j,k,j,k} * Gw_{3e} * (Gp_{3e} + 1)) \end{aligned} \right) \end{aligned} \right) \text{ if } j = 1 \\ & 1.571428571428E * Gw_{3e} * (1 - Gp_{3e}) * \\ & \left( \begin{aligned} & \left( \begin{aligned} & 1.571428571428E * (HTcol_{i,j,k,j,k} * Gw_{3e} * (1 - Gp_{3e}) \\ & + HTcol_{i-1,j,k,j,k} * Gw_{3e} * (Gp_{3e} + 1)) \end{aligned} \right) \text{ if } i = 1 \\ & \left( \begin{aligned} & 1.571428571428E * (HTcol_{i,j,k,j,k} * Gw_{3e} * (1 - Gp_{3e}) \\ & + HTcol_{i-1,j,k,j,k} * Gw_{3e} * (Gp_{3e} + 1)) \end{aligned} \right) \end{aligned} \right) \\ & + 1.571428571428E * Gw_{3e} * (Gp_{3e} + 1) * \\ & \left( \begin{aligned} & \left( \begin{aligned} & 1.571428571428E * (HTcol_{i,j,k,j,k} * Gw_{3e} * (1 - Gp_{3e}) \\ & + HTcol_{i-1,j,k,j,k} * Gw_{3e} * (Gp_{3e} + 1)) \end{aligned} \right) \text{ if } i = 1 \\ & \left( \begin{aligned} & (HTcol_{i,j,k,j,k} * Gw_{3e} * (1 - Gp_{3e}) \\ & + HTcol_{i-1,j,k,j,k} * Gw_{3e} * (Gp_{3e} + 1)) \end{aligned} \right) \end{aligned} \right) \end{aligned} \right) \end{aligned} \right) \end{aligned}$$

# Kết quả của VD4



# Equations of motion (ECWMF model)

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{1}{a \cos^2 \theta} \left\{ U \frac{\partial U}{\partial \lambda} + v \cos \theta \frac{\partial U}{\partial \theta} \right\} + \dot{\eta} \frac{\partial U}{\partial \eta}$$

East-west wind

$$(-f v) + \frac{1}{a} \left\{ \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} + R_{\text{dry}} T_v \frac{\partial}{\partial \lambda} (\ln p) \right\} = \underline{P_U + K_U}$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \frac{1}{a \cos^2 \theta} \left\{ U \frac{\partial V}{\partial \lambda} + V \cos \theta \frac{\partial V}{\partial \theta} + \sin \theta (U^2 + V^2) \right\} + \dot{\eta} \frac{\partial V}{\partial \eta}$$

North-south wind

$$+ f U + \frac{\cos \theta}{a} \left\{ \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + R_{\text{dry}} T_v \frac{\partial}{\partial \theta} (\ln p) \right\} = \underline{P_V + K_V}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{a \cos^2 \theta} \left\{ U \frac{\partial T}{\partial \lambda} + V \cos \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right\} + \dot{\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} - \frac{\kappa T_v \omega}{(1 + (\delta - 1) q) p} = \underline{P_T + K_T}$$

Temperature

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{a \cos^2 \theta} \left\{ U \frac{\partial q}{\partial \lambda} + V \cos \theta \frac{\partial q}{\partial \theta} \right\} = \eta \frac{\partial q}{\partial \eta} = \underline{P_q + K_q}$$

Humidity

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial p}{\partial \eta} \right) + \nabla \cdot \left( \mathbf{v}_H \frac{\partial p}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \dot{\eta} \frac{\partial p}{\partial \eta} \right) = 0$$

Continuity of mass

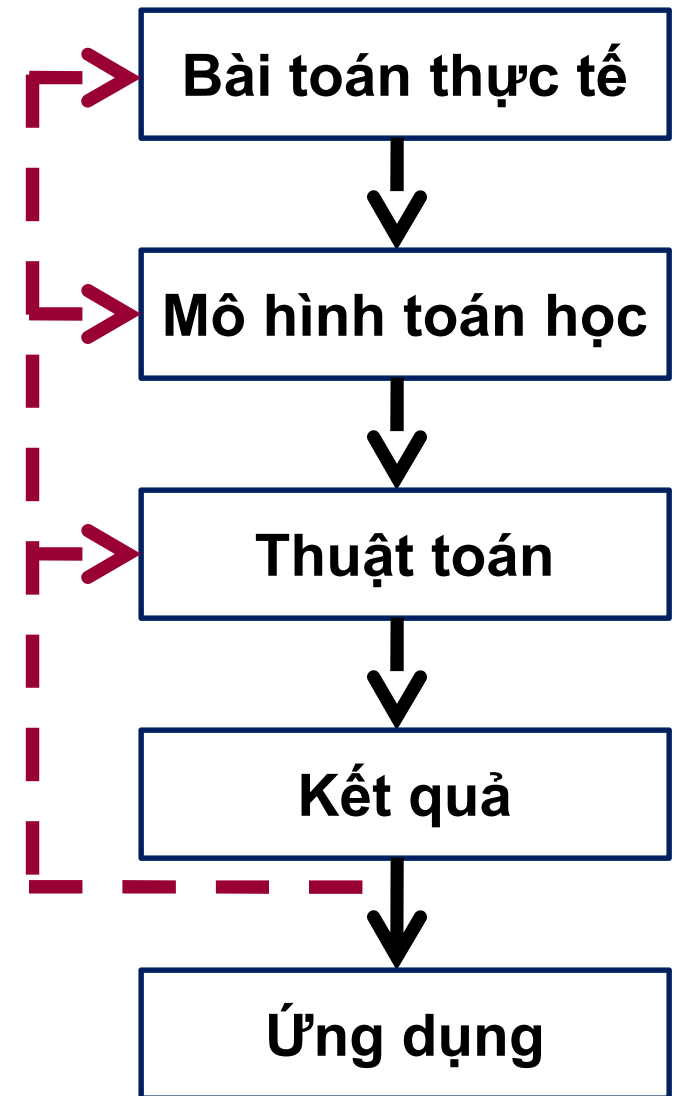
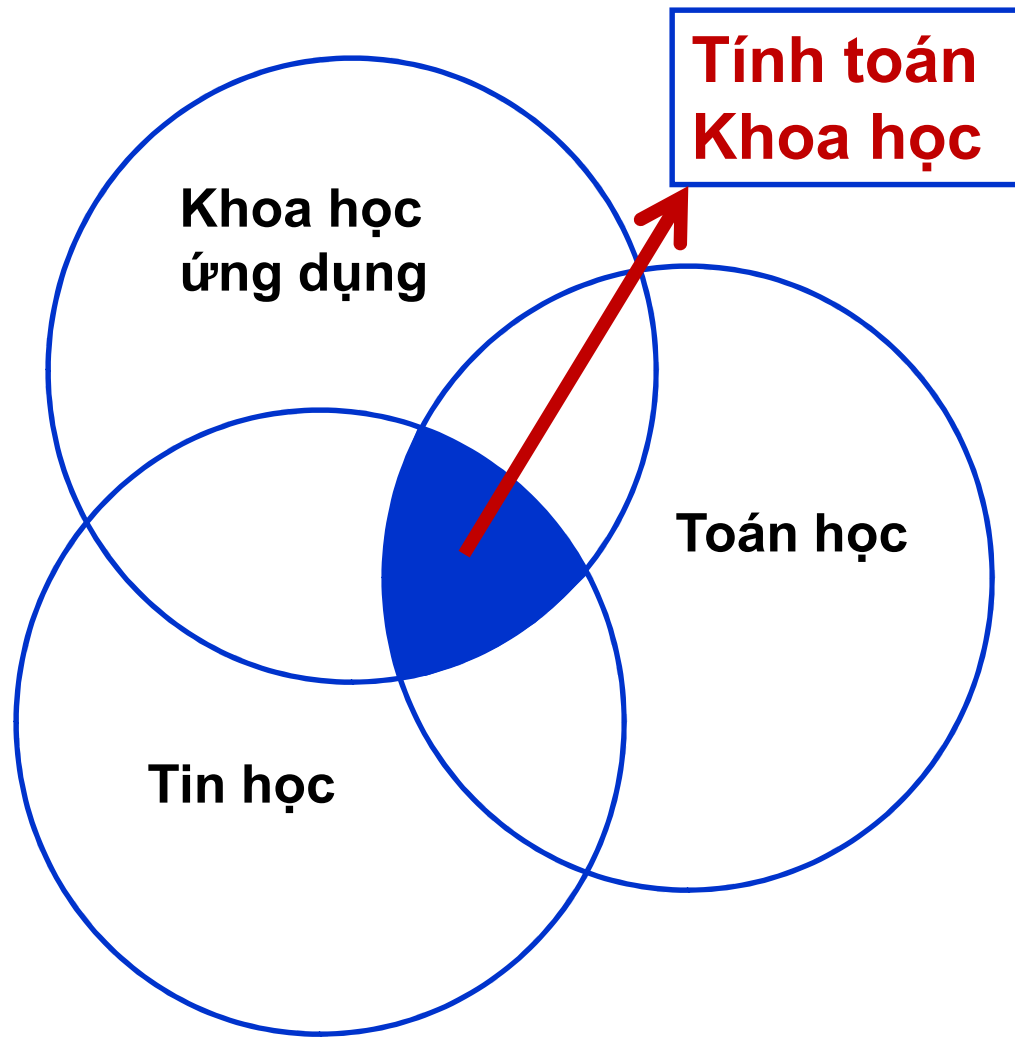
$$\frac{\partial p_{\text{surf}}}{\partial t} = - \int_0^1 \nabla \cdot \left( \mathbf{v}_H \frac{\partial p}{\partial \eta} \right) d\eta$$

Surface pressure

# Tính toán khoa học?

- TTKH liên quan đến việc sử dụng máy tính và các phương pháp số một cách hiệu quả, tận dụng cấu hình của các máy tính tiên tiến để giải quyết các bài toán kích thước lớn trong khoa học và kỹ thuật
- TTKH là tập hợp tất cả các công cụ, kỹ thuật và lý thuyết cần thiết để phát triển và giải quyết các mô hình toán học trong khoa học và kỹ thuật trên máy tính

# Tính toán khoa học?



# Vai trò của tính toán khoa học

- **Together with theory and experimentation, computational science now constitutes the third pillar of scientific inquiry, enabling researchers to build and test models of complex phenomena**

(Report to the President, Computational Science: Ensuring America's Competitiveness, USA, June 2005).

# Sai số trong tính toán khoa học

- Sai số mô hình
- Sai số trong quá trình tính toán
  - Sai số rút gọn
  - Sai số làm tròn
- Sai số dữ liệu đầu vào
- Ví dụ:
  - Diện tích bề mặt trái đất  $= 4\pi R^2$
  - Sai số:
    - Trái đất không phải hình cầu tuyệt đối
    - $R = 6370, \dots \text{km}$
    - $\pi = 3,14 \dots$



# Cách tính sai số

- Giả sử  $x^*$  là xấp xỉ của số thực  $x$ :
  - Sai số tuyệt đối:  $|x^* - x|$
  - Sai số tương đối:  $\frac{|x^* - x|}{|x|}$ ,  $x \neq 0$

# Tác động của sai số làm tròn đối với các phép toán số học

- Gọi  $fl(x)$  và  $fl(y)$  là biểu dưới dạng dấu phẩy động tương ứng của  $x$  và  $y$ , khi đó ta có:

$$fl(fl(x) \pm fl(y)) = (fl(x) \pm fl(y)) * (1 + \epsilon_1)$$

$$fl(fl(x) * fl(y)) = (fl(x) * fl(y)) * (1 + \epsilon_2)$$

$$fl(fl(x) : fl(y)) = (fl(x) : fl(y)) * (1 + \epsilon_3)$$

trong đó:  $|\epsilon_i| \leq \epsilon_m$

- $\Rightarrow$  sai số tương đối vẫn nhỏ

# Sai số làm tròn tích lũy (1)

- Nguồn gốc:
  - Khi một thuật toán phải thực hiện nhiều phép toán, sai số của mỗi phép toán nhỏ nhưng sai số của thuật toán có thể lớn. Ta phải quan tâm xem sai số của từng phép toán tích lũy trong thuật toán như thế nào.

## Sai số làm tròn tích lũy (2)

- Sai số đột biến của phép trừ:

- Giả sử giá trị gần đúng của  $a$ ,  $b$  được biểu diễn như sau:

$$\hat{a} = a (1 + \Delta a), \quad \hat{b} = b (1 + \Delta b),$$

trong đó  $\Delta a$ ,  $\Delta b$  là các sai số tương đối thỏa mãn:

$$|\Delta a| \leq \varepsilon, \quad |\Delta b| \leq \varepsilon$$

- Xét sai số tương đối của phép trừ gần đúng:  $x=a-b$ :

$$\hat{x} = \hat{a} - \hat{b} = a(1 + \Delta a) - b(1 + \Delta b) = (a - b) + (a\Delta a - b\Delta b)$$

- Từ đó sai số tương đối là:

$$\frac{|\hat{x} - x|}{|x|} = \frac{|a\Delta a - b\Delta b|}{|a - b|} \leq \varepsilon \frac{|a| + |b|}{|a| - |b|}$$

Sai số này rất lớn nếu  $a \sim b$ .

# Hiện tượng tràn số

- Hiện tượng tràn số lớn: xảy ra khi số thu được lớn hơn số lớn nhất mà hệ dấu phẩy động có thể biểu diễn được:  $e > e_{\max}$
- Hiện tượng tràn số nhỏ: xảy ra khi số thu được nhỏ hơn số nhỏ nhất mà hệ dấu phẩy động có thể biểu diễn được:  $e < e_{\min}$

# Sự ổn định số

- Khái niệm ổn định số liên quan đến độ chính xác của thuật toán khi có sai số làm tròn.
- Một thuật toán được gọi là không ổn định nếu sai số làm tròn có thể dẫn tới sai số lớn trong kết quả.

# Ảnh hưởng của sai số đến kết quả của bài toán

- Bài toán có điều kiện tồi
- Bài toán có điều kiện tốt

# Nội dung

- Nhập môn Matlab (8T)
- Hệ phương trình tuyến tính (4T)
- Đường cong khớp (4T)
- Giải phương trình phi tuyến (4T)
- Tính gần đúng đạo hàm và tích phân (4T)
- Phương trình vi phân (4)
- Các phương pháp cực tiểu hóa không ràng buộc (4)
- Quy hoạch tuyến tính (8T)
- Bài tập



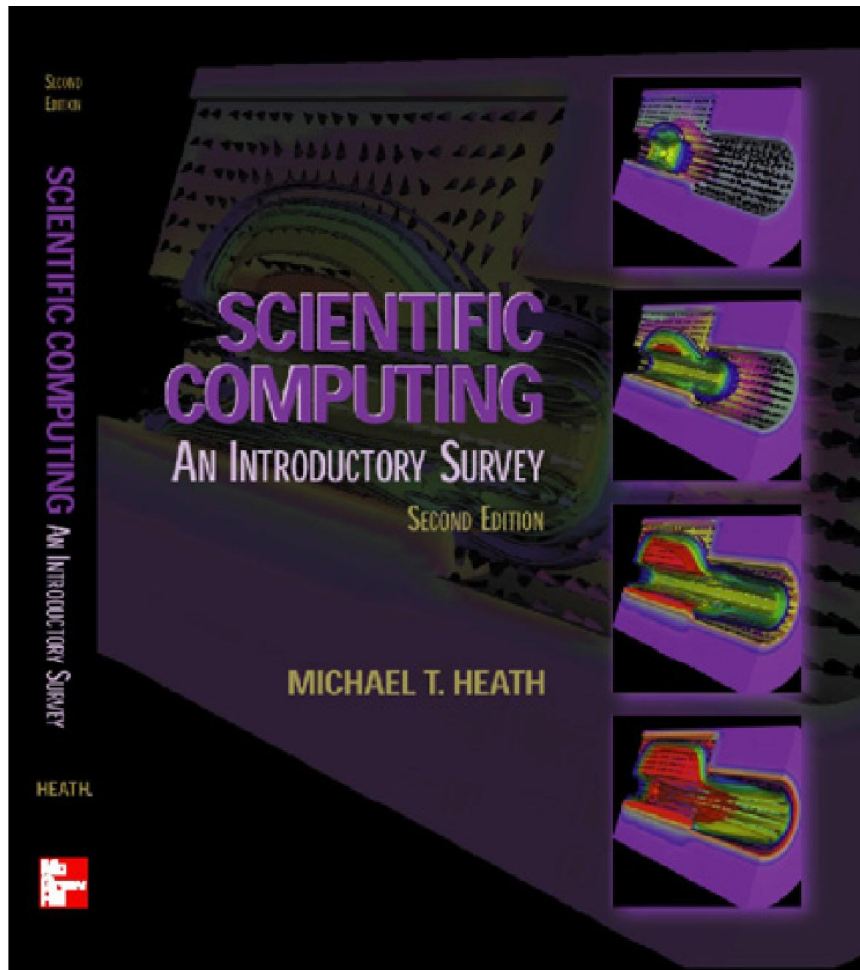
Nội dung giảng dạy có sử dụng tài liệu/slide của PGS Nguyễn Đức Nghĩa và TS Trịnh Anh Phúc

# Tài liệu tham khảo

- Tạ Văn Đĩnh. *Phương pháp tính*. NXB Giáo dục, 1995.
- Phạm Kỳ Anh. *Giải tích số*. NXB Đại học Quốc gia Hà nội, 1996.
- Lê Trọng Vinh. *Giải tích số*. NXB Khoa học Kỹ thuật, Hà nội, 2000.
- Nguyễn Đức Nghĩa. *Tối ưu hoá (Quy hoạch tuyến tính và rời rạc)*. NXB Giáo dục, 1996.

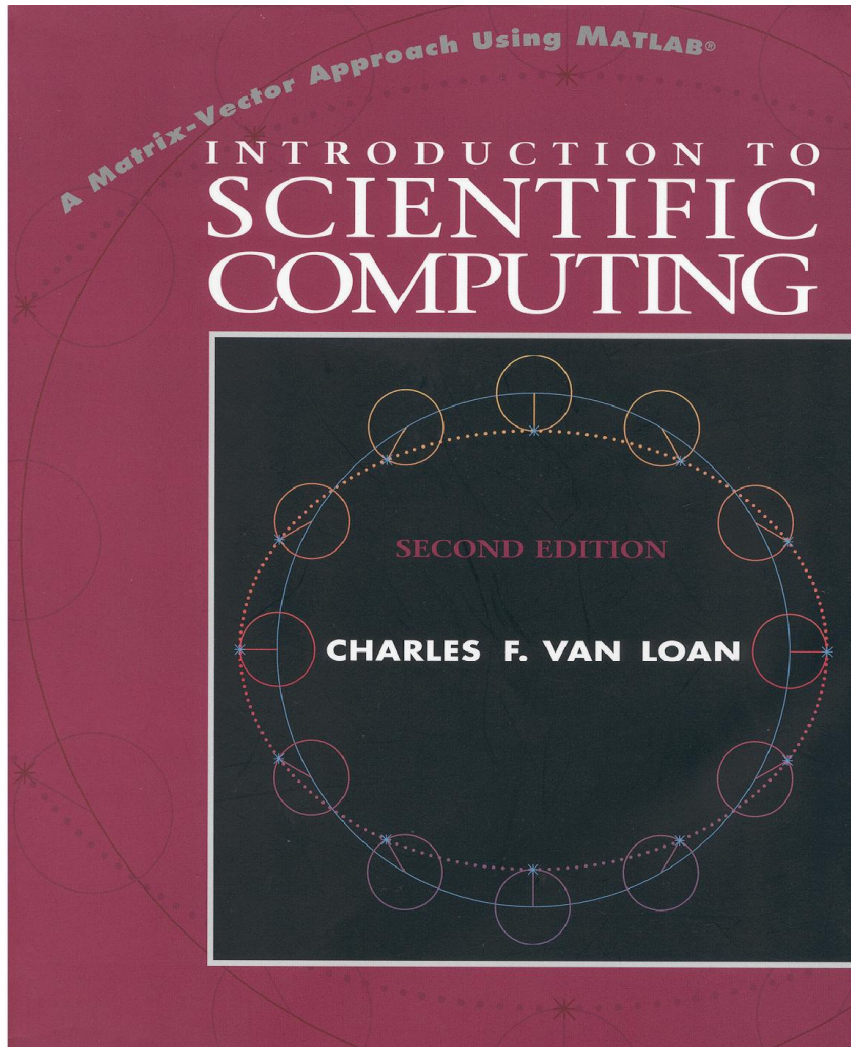
# Tài liệu tham khảo

5. Michael Heath. *Scientific Computing: An introductory survey*. McGraw-Hill Inc. 2001.
6. Charles F. Van Loan, *Introduction to Scientific Computing. A Matrix-Vector Approach Using Matlab*. 2nd Edition. Prentice Hall, 2000.



## Michael Heath

Director of Computational Science and  
Engineering at the University of Illinois at  
Urbana-Champaign

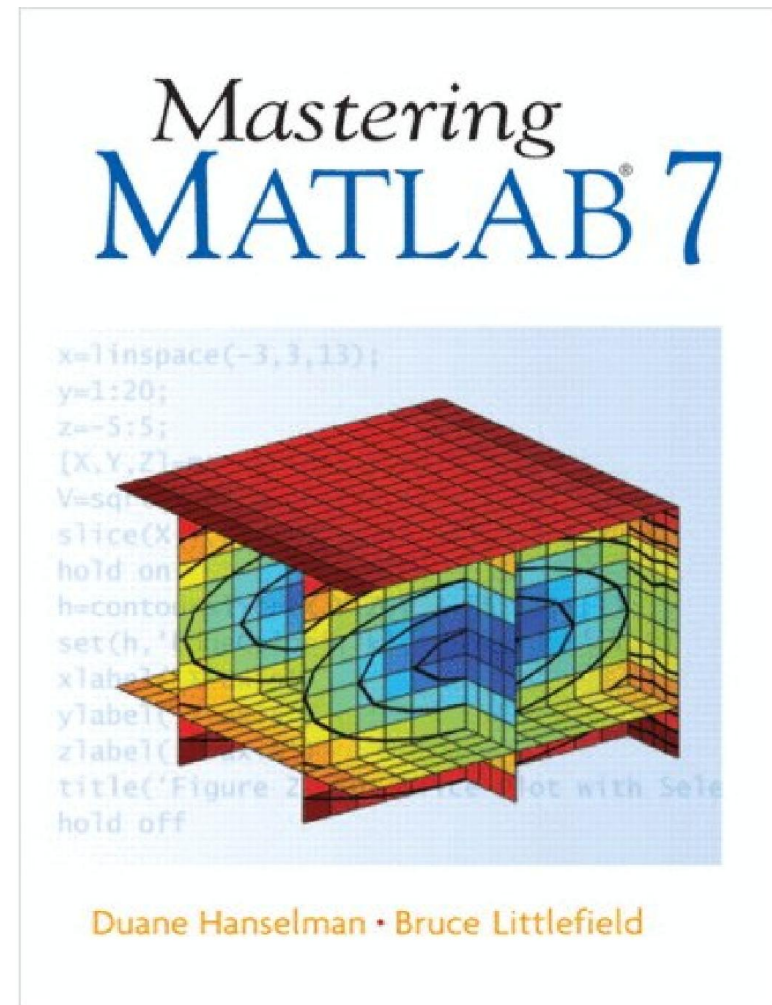


**Charles F. Van Loan**

Joseph C. Ford Professor of  
Engineering Department of  
Computer Science, Cornell Univ.

# Tài liệu tham khảo

7. Duane Hanselman, Bruce Littlefield.  
*Mastering MATLAB 7*.  
Pearson/Prentice Hall,  
2005, 852 Pages.
8. K. Sigmon. *MATLAB  
Primer*. Univ. Florida,  
1996.





# Tài liệu tham khảo

9. Gene Golub and Charles Van Loan. *Matrix computations*. John Hopkins University Press 1996.
10. Dammed J.W. *Applied Numerical Linear Algebra*, 1996.
11. Iserles. *A First Course in Numerical Analysis of Differential Equations*, Cambridge University Press, 1996.
12. C. Evans, *Partial Differential Equations*, AMS, 1998.
13. G. W. Stewart, *Introduction to Matrix Computations*, Academic Press, 1998
14. Gill, P.E., Murray, W. and Wright, M. H., *Numerical Linear Algebra and Optimization*, Volume 1, Addison-Wesley, Redwood City, California, 1991.
15. Stephen G. Nash, Ariela Sofer, *Linear and Nonlinear Programming*. McGraw-Hill, 1998.