

# Chương 1

## Các phương pháp nội suy

### 1.1 Mở đầu & Cơ sở lý thuyết

Chúng ta được biết các giá trị của một hàm số ở những điểm khác nhau  $x_0, x_1, \dots, x_n$ . Chúng ta mong muốn tính được giá trị xấp xỉ của hàm tại các điểm  $x$  mới nằm giữa các điểm này mà các giá trị của hàm số được đưa ra. Quá trình này được gọi là *nội suy*.

Chúng ta nên chú ý đến phần này vì nội suy tạo thành nền móng cho cả hai phần tính gần đúng đạo hàm và tính gần đúng tích phân. Thật vậy, phép nội suy cho phép chúng ta phát triển các công thức cho tích phân và đạo hàm bằng số.

Với hàm  $y = f(x)$ , ta kí hiệu các giá trị đã biết của  $f$  như sau

$$f_k = f(x_k) \mid k \in [0, n]$$

hay một cách biểu diễn khác ở dạng cặp

$$(x_k, f_k)$$

Các giá trị hàm số này được lấy từ đâu?

- Nó có thể tính được từ một hàm “toán học”, chẳng hạn hàm logarithm hoặc hàm Bessel, hoặc
- Nó có thể là số liệu đo được hoặc tự động ghi lại trong một thí nghiệm nào đó, chẳng hạn chất lượng không khí của Hà Nội hoặc đo thành phần khí thải của ô tô hoặc xe máy khi đi với tốc độ khác nhau

Ý tưởng của nội suy là tìm đa thức  $p_n(x)$  có bậc là  $n$  (hoặc nhỏ hơn) thỏa mãn:

$$p_n(x_k) = f_k \quad \forall k \in [0, n] \quad (1.1)$$

Chúng ta sẽ gọi  $p_n$  là *đa thức nội suy* và  $x_0, x_1, \dots, x_n$  là các điểm mốc. Nếu  $f$  là hàm toán học thì ta gọi  $p_n(x)$  là *xấp xỉ* (hoặc là xấp xỉ đa thức) của hàm  $f$ . Chúng ta sẽ dùng  $p_n$  để tính giá trị của hàm  $f$  tại các điểm  $x$  khác điểm mốc nằm trong hoặc ngoài khoảng  $[x_0, x_n]$ .

Lý do đa thức rất thuận tiện để xấp xỉ vì chúng ta có thể dễ dàng lấy đạo hàm và tích phân chúng, và kết quả cũng là một đa thức. Hơn nữa, *đa thức có thể xấp xỉ hàm liên tục với bất kỳ độ chính xác tùy ý*. Kết quả này được gọi là *định lý xấp xỉ Weierstrass*.

### Định lý 1.1: Định lý xấp xỉ Weierstrass

Với mọi hàm  $f$  xác định trên  $J = [a, b]$  và một sai số  $\beta > 0$  cho trước, luôn tồn tại đa thức  $p_n(x)$  (có bậc  $n$  đủ cao) sao cho:

$$|f(x) - p_n(x)| < \beta \forall x \in J$$

Ta không đi vào chứng minh định lý trên. Ta chú ý đến hai tính chất quan trọng của các đa thức nội suy  $p_n$ :

- $p_n$  tồn tại (đã được khẳng định bởi định lý Weierstrass)
- $p_n$  duy nhất

Ta có thể chứng minh tính duy nhất của  $p_n$  như sau:

*Chứng minh tính duy nhất của đa thức nội suy.*

Thật vậy, giả sử có đa thức  $q_n$  khác cũng thỏa mãn:

$$\begin{aligned} q_n(x_k) &= x \forall k \in [0, n] \\ \iff r(x) &= p_n(x_k) - q_n(x_k) = 0 \forall k \in [0, n] \end{aligned}$$

Nói cách khác,  $r$  có đúng  $n + 1$  nghiệm. Nhưng  $r(x)$  là đa thức bậc tối đa là  $n$ , do đó nó có tối đa  $n$  nghiệm, dẫn đến mâu thuẫn.

Vậy ta kết luận đa thức nội suy  $p_n$  là duy nhất.

đpcm.

Sau đây, ta xem xét một số phương pháp tìm  $p_n$ . Theo như tính duy nhất đã chứng minh ở trên, với cùng một số liệu, các phương pháp khác nhau cần phải cho ra cùng một đa thức. Hơn nữa, các đa thức có thể được biểu diễn dưới các dạng khác nhau do các mục tiêu khác nhau.

## 1.2 Phương pháp nội suy Lagrange

### 1.2.1 Phương pháp nội suy Lagrange

Sau đây ta trình bày việc xây dựng  $p_n$  bằng *phương pháp nội suy Lagrange*.

**Phương pháp 1.1: Phương pháp nội suy Lagrange**

Phương pháp gồm hai bước:

1. Tạo các đa thức  $L_k$  với bậc tối đa là  $n$  theo công thức sau:

$$\begin{aligned} L_k(x) &= \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\dots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\dots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\dots(x_k-x_n)} \\ &= \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{x-x_i}{x_k-x_i} \end{aligned}$$

Ý tưởng ở đây là:

- $L_k(x_k) = 1$
- $L_k(x_j) = 0 \forall j \neq k \in [0, n]$

2. Viết  $p_n$ :

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n L_k(x) \cdot f_k$$

Ý tưởng ở đây là với mọi  $x_k$ ,  $p_n$  rút gọn còn  $f_k$ , do cách xây dựng  $L_k$  ở trên.

$p_n$  ở dạng này gọi là *đa thức nội suy Lagrange bậc  $n$* .

**1.2.2 Đánh giá sai số**

Ta có định lý sau về sai số của phương pháp nội suy Lagrange, hay nói cách khác, của *mọi* phương pháp nội suy đa thức:

**Định lý 1.2: Sai số nội suy đa thức**

Nếu  $f$  khả vi liên tục đến bậc  $n+1$ , thì sai số của mọi phương pháp nội suy đa thức xấp xỉ  $f$  được tính theo công thức sau:

$$\epsilon_n(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(t)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x-x_i) \quad (1.2)$$

trong đó,  $t$  là một số nào đó trong khoảng giữa  $x_k$  nhỏ nhất,  $x_k$  lớn nhất, và  $x$ .

Ý tưởng của công thức trên đến từ quan sát rằng nếu  $f$  cũng là đa thức, thì  $f$  chính là  $p_n$ , dẫn đến sai số bằng 0. Đồng thời,  $f$  lúc này lại có đạo hàm bậc  $n+1$  bằng 0. Từ hai điều trên, ta kì vọng rằng sai số sẽ liên quan đến đạo hàm bậc  $n+1$  của  $f$ .

### 1.3 Phương pháp nội suy Newton

Với bộ dữ liệu đã cho, ta đã chứng minh đa thức nội suy  $p_n$  là duy nhất. Tuy nhiên, với các yêu cầu khác nhau, ta có thể dùng  $p_n(x)$  ở các dạng thức khác nhau. Đa thức nội suy dạng Lagrange thuận lợi cho việc tính gần đúng giá trị đạo hàm và tích phân số.

Một trường hợp riêng, nhưng rất quan trọng là *đa thức dạng Newton*, dạng thức này thuận lợi trong việc giải gần đúng phương trình vi phân với giá trị ban đầu.

Hơn nữa, xây dựng đa thức dạng Newton yêu cầu phải tính toán ít hơn đa thức dạng Lagrange, đặc biệt khi  $n$  tăng để đạt được độ chính xác cần thiết. Khi đó, đa thức dạng Newton sử dụng tất cả các kết quả tính toán từ trước đó và cộng thêm một số hạng khác có thể không được tính từ đa thức dạng Lagrange. Số hạng này nhận được từ việc ứng dụng Nguyên lý sai số (Được sử dụng trong Ví dụ 3 của đa thức dạng Lagrange).

Trong hai phần sau, ta sẽ từ từ xây dựng phương pháp nội suy Newton. Phần đầu là dạng tổng quát (tỉ sai phân), phần sau là một trường hợp đặc biệt hay dùng (sai phân tiến).

#### 1.3.1 Công thức tỉ sai phân

Giả sử  $p_{n-1}(x)$  là đa thức Newton bậc  $(n-1)$  (dạng của nó ta xác định sau). Khi đó:

$$p_{n-1}(x_k) = f_k \forall k \in [0, n-1]$$

Từ đó, ta có thể viết đa thức Newton bậc  $n$  như sau:

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + g_n(x) \quad (1.3)$$

Do  $p_n$  cũng là một đa thức nội suy, ta có

$$p_n(x_k) = f_k \forall k \in [0, n]$$

từ đó ta có một số giá trị của  $g_n$ :

$$g_n(x_k) = 0 \forall k \in [0, n-1]$$

Theo (1.3), ta thấy hiển nhiên  $g_n$  có bậc  $n$ .

Từ hai điều trên, ta suy ra được dạng của  $g_n$

$$g_n(x) = a_n \prod_{i=0}^{n-1} (x - x_i)$$

Phần việc còn lại là đi tìm  $a_n$ . Ta dễ dàng tính được  $a_n$  khi xét  $x = x_n$ :

$$a_n = \frac{f_n - p_{n-1}(x_n)}{\prod_{i=0}^{n-1} (x_n - x_i)} \quad (1.4)$$

Tổng quát hóa, ta có công thức cho  $a_k$  như sau:

$$a_k = f[x_0, \dots, x_k] = \frac{f[x_1, \dots, x_k] - f[x_0, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_0} \quad \forall k > 0$$

với

$$a_1 = f[x_0, x_1] = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}$$

Công thức đệ quy trên được gọi là *tỉ sai phân thứ k* ( $k^{th}$  divided difference). Tổng hợp lại, ta có công thức tỉ sai phân của Newton:

$$\begin{aligned} p_n(x) &= f_0 + a_1 \prod_{i=0}^0 (x - x_i) + a_2 \prod_{i=0}^1 (x - x_i) + \dots + a_n \prod_{i=0}^{n-1} (x - x_i) \\ &= f_0 + \sum_{j=1}^n \left[ a_j \prod_{i=0}^{j-1} (x - x_i) \right] \end{aligned} \quad (1.5)$$

Khi làm bài tập, ta thường dùng công thức (1.4), như trình bày trong ví dụ sau:

### 1.3.2 Công thức sai phân tiến

*Sai phân tiến* (forward difference) là một trường hợp đặc biệt của công thức tỉ sai phân, trong đó các mốc cách đều. Ta sẽ thấy các công thức được đơn giản đi đáng kể.

Trước hết ta nêu ra dạng của  $x$ :

$$x_n = x_0 + nh$$

Ta định nghĩa công thức cho  $\Delta^1$ , tức *sai phân tiến thứ nhất* ( $1^{st}$  forward difference) của  $f$  tại  $x_j$  như sau:

$$\Delta^1 f_j = f_{j+1} - f_j$$

Ta có thể thấy chữ “*tiến*” ở đây hiểu theo nghĩa là lấy  $f_{j+1}$  trừ đi  $f_j$ .

Ta tiếp tục có sai phân tiến thứ hai, cũng tại  $x_j$ :

$$\Delta^2 f_j = \Delta^1 f_{j+1} - \Delta^1 f_j$$

Tổng quát, công thức sai phân tiến thứ  $k$  tại  $x_j$  được định nghĩa đệ quy như sau:

$$\Delta^k f_j = \Delta^{k-1} f_{j+1} - \Delta^{k-1} f_j \quad (1.6)$$

Với cách định nghĩa sai phân tiến như trên, ta có thể chứng minh được, bằng quy nạp:

$$a_k = f[x_0, \dots, x_k] = \frac{1}{k!h^k} \Delta^k f_0$$

Áp dụng công thức trên vào (1.5), ta có:

$$p_n(x) = \sum_{s=0}^n \binom{r}{s} \Delta^s f_0 \quad (1.7)$$

với  $x = x_0 + rh$ .

Đồng thời, (1.2) cũng được đơn giản hóa:

$$\epsilon_n(x) = \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} r(r-1) \dots (r-n) f^{n+1}(t)$$

### 1.3.3 Công thức sai phân lùi

Tương tự như sai phân tiến, *sai phân lùi (backward difference)* cũng chỉ áp dụng cho trường hợp mốc cách đều, chỉ khác biệt ở chỉ số của hai toán hạng trong phép trừ định nghĩa.

Ta có công thức cho sai phân lùi thứ  $k$  như sau:

$$\nabla^k f_j = \nabla^{k-1} f_j - \nabla^{k-1} f_{j-1} \quad (1.8)$$

Ta cập nhật (1.5) như sau:

$$p_n(x) = \sum_{s=0}^n \binom{r+s-1}{s} \nabla^s f_0 \quad (1.9)$$

với  $x = x_0 + rh$ .

## 1.4 Phương pháp nội suy Spline bậc 3

Bây giờ nếu  $n$  của đa thức nội suy  $p_n$  lớn, có thể có sự dao động lớn với  $x$  ở giữa các điểm mốc. Do đó chúng ta gặp phải sự không ổn định của đa thức nội suy. Hình sau cho thấy một ví dụ nổi tiếng của C. Runge, trong đó sai số tối đa có thể tăng lên rất cao (với các nút được giữ bằng nhau và số của chúng tăng lên).

Những dao động không mong muốn này được tránh bằng *phương pháp spline* do I. J. Schoenberg tìm ra năm 1946 (Quarterly of Applied Mathematics 4, trang 45-99, 112-141). Phương pháp này được sử dụng rộng rãi trong thực tế. Nó cũng đặt nền móng cho các hệ thống CAD (computer-aided design) hiện đại.

### 1.4.1 Điều kiện tồn tại và duy nhất của nội suy spline bậc 3

Ý tưởng toán học của phương pháp là như sau: thay vì dùng một đa thức bậc cao trên toàn khoảng  $[a, b]$ , có giá trị trùng với giá trị hàm số tại các điểm nút

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$$

ta sẽ dùng  $n$  đa thức bậc thấp  $q$ , ví dụ như bậc 3; mỗi đa thức xác trên một khoảng con nằm giữa 2 điểm mốc:

$$q_k(x) \text{ xác định trên } [x_k, x_{k+1}], k \in [0, n-1]$$

Từ đó chúng ta tạo ra hàm nội suy được gọi là *hàm spline*  $g(x)$  bằng cách ghép các đa thức này lại với nhau tạo thành hàm số liên tục duy nhất đi qua các điểm đã cho, nghĩa là

$$g(x_k) = f(x_k) = f_k \forall k \in [0, n] \quad (1.10)$$

Chú ý rằng,  $g(x) = q_k(x)$  trên  $[x_k, x_{k+1}]$ . Ta nói *nội suy spline là nội suy từng khúc (piecewise)*.

Đa thức bậc nhất là nội suy spline đơn giản nhất. Tuy nhiên, đa thức nội suy bậc nhất không trơn tại các điểm mốc, do đó ít có giá trị thực tế. Hiện nay, *đa thức spline bậc 3 (cubic spline)* là một trong những dạng nội suy được dùng nhiều nhất.

Theo định nghĩa, spline bậc 3  $g(x)$  là hàm liên tục trên khoảng  $[a, b]$ , có đạo hàm bậc nhất và bậc hai liên tục và thỏa mãn điều kiện (1.10); hơn nữa, giữa các điểm mốc  $g(x)$  được cho bởi đa thức  $q$  bậc ba hoặc nhỏ hơn.

Ta khẳng định rằng có đa thức spline bậc 3 như vậy. Và nếu ta thêm điều kiện

$$g'(x_0) = k_0 \text{ và } g'(x_n) = k_n \quad (1.11)$$

với  $k_0$  và  $k_n$  cho trước (tức cho trước hệ số góc ở hai nút), ta có thể khẳng định rằng spline bậc ba thỏa mãn là duy nhất.

**Định lý 1.3: Điều kiện tồn tại và duy nhất của đa thức spline bậc 3**

Cho  $x_j, f_j$  với  $f(x_j) = f_j, j \in [0, n]$ . Cho hai số bất kì  $k_0$  và  $k_n$ . Có một và chỉ một đa thức spline bậc 3  $g(x)$  ứng với bộ  $x_j, f_j$ , và thỏa mãn cả (1.10) và (1.11).

### 1.4.2 Tìm đa thức spline