CHƯƠNG 3
PHÉP NỘI SUY VÀ HỒI QUY

MỤC ĐÍCH, YÊU CẦU

Sau khi học xong chương 3, yêu cầu sinh viên:

1. Hiểu được thế nào là bài toán nội suy và hồi quy.
2. Nắm được các phương pháp nội suy đa thức, biết cách tìm các đa thức nội suy theo các phương pháp đó.
3. Biết được khớp đường cong - Nội suy Spline là gì?
4. Nắm và giải được các bài toán bằng phương pháp bình phương tối thiểu
5. Biết cách đánh giá sai số của từng phương pháp.

3.1. MỞ ĐẦU

Thông thường trong một số lĩnh vực như kinh tế chẳng hạn, các đại lượng khảo sát thường không được cho dưới dạng hàm liên tục, mà là bảng các giá trị rời rạc. Các phương pháp giải tích toán học thường tính toán với các hàm cho bởi các công thức, do đó không thể áp dụng trực tiếp để nghiên cứu các hàm cho dưới dạng rời rạc như thế này. Cũng có khi ta biết rằng đại lượng y là một hàm của đại lượng x, tức là $y = f(x)$, nhưng ta không biết biểu thức hàm f(x) mà chỉ biết một số giá trị y_i tương ứng với các giá trị của x tại các điểm x_i như trong bảng sau:

x	x_0	x_1	x_2	...	x_{n-1}	x_n
y	y_0	y_1	y_2	...	y_{n-1}	y_n

Thông thường thì $x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n$ và các điểm này có thể phân bố cách đều hoặc không. Mặc dầu ta chỉ biết các giá trị của y tại các điểm mốc x_i, nhưng trong nhiều trường hợp ta cần tính toán với các giá trị y tại các vị trí khác của x. Một câu hỏi đặt ra là: cho một điểm x không thuộc các điểm x_i cho ở trên, làm thế nào chúng ta có thể tính được giá trị y tương ứng với nó, sao cho chúng ta có thể tận dụng tối đa các thông tin đã có?

Bài toán nội suy là bài toán tìm giá trị gần đúng của y tại các điểm nằm giữa các giá trị x không có trong bảng trên. Nếu cần tìm các giá trị gần đúng của y tại các điểm x nằm ngoài khoảng $[x_0,x_n]$ thì bài toán được gọi là bài toán ngoại suy. Một bộ n+1 cặp các giá trị đã biết của x và y: $(x_0,y_0), (x_1,y_1), \ldots, (x_n,y_n)$ được gọi là một mẫu quan sát, còn $x_0, x_1, \ldots, x_n$ được gọi là các điểm quan sát và $y_0, y_1, \ldots, y_n$ là các kết quả quan sát.

Vì bài toán của chúng ta không chỉ giải quyết với một giá trị x cụ thể, mà là cả một miềm giá trị nào đó của x. Do đó câu hỏi trên cũng tương đương với vấn đề sau: hãy tìm một hàm g(x) sao cho miền giá trị của nó chứa các điểm $(x_0, x_1, ..., x_n)$ và hàm này xấp xỉ tốt nhất tập số liệu đã có là các cặp $(x_0,y_0), (x_1,y_1), ..., (x_n,y_n)$ theo một nghĩa nào đó. Chúng ta thấy ngay là tập số liệu là hữu hạn, còn tập các giá trị cần ước lượng là vô hạn, nên sẽ có vô số hàm g(x) nếu chúng ta không đưa ra một số ràng buộc nào đó về g(x). Điều đầu tiên chúng ta quan tâm là nên chọn dạng hàm g(x) như thế nào.

Một cách tự nhiên, ta có thể đặt điều kiện về hàm g(x) như sau:

- $g(x_i)$ $i=0,1,2,...,n$ gần các điểm y_i nhất theo một nghĩa nào đó.
- g(x) là duy nhất theo một số điều kiện nào đó.
- Hàm g(x) liên tục, không có điểm gấp khúc và ít thay đổi trong từng đoạn $[x_i,x_{i+1}]$.

Các định lý về xấp xỉ sau đây của Weierstrass sẽ cho chúng ta gợi ý về dạng hàm của g(x).

Định lý Weierstrass 1 về xấp xỉ hàm.

Cho f (x) là một hàm thực liên tục xác định trên khoảng [a,b]. Khi đó với mọi $\varepsilon>0$ tồn tại một đa thức p(x) bậc m với các hệ số thực sao cho với mọi giá trị $x\in[a,b]$ ta có $|f(x) - p(x)|<\varepsilon$.

Định lý Weierstrass 2 về xấp xỉ hàm.

Cho f (x) là một hàm thực liên tục xác định trên khoảng $[-\pi,\pi]$ và $f(-\pi) = f(\pi)$. Khi đó với mọi $\varepsilon>0$ tồn tại một đa thức lượng giác

$$q_m(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{j=1}^{m}[a_j \cos(jx) + b_j \sin(jx)]$$

với các hệ số thực sao cho với mọi giá trị $x\in[-\pi,\pi]$ ta có $|f(x) - q(x)|<\varepsilon$.

Từ các định lý trên đây ta thấy rằng chọn ***đa thức*** là thích hợp cho dạng hàm g(x). Đa thức là hàm quen thuộc và ta đã biết nhiều tính chất của nó.

Người ta thường dùng các phương pháp xấp xỉ sau để xác định đa thức p(x):

1. Nếu ta biết rằng các cặp giá trị $(x_0,y_0), (x_1,y_1), ..., (x_n,y_n)$ là thể hiện của một hàm f(x) nào đó, tức là ta biết rằng $y=f(x)$ và như vậy tại các điểm x_i, $i=0,1,...,n$ $y_i = f(x_i)$. Trong trường hợp này ta đòi hỏi đa thức p(x) phải đi qua các điểm (x_i,y_i), $i=0,1,...,n$.

   Bài toán nội suy bây giờ có thể phát biểu cụ thể hơn như sau:

   Cho một mẫu quan sát gồm n+1 cặp các giá trị đã biết của x và y : $(x_0,y_0), (x_1,y_1), . . .,(x_n,y_n)$. Hãy xây dựng một đa thức bậc $m \le n$

$$p_m(x) = a_0 + a_1x^1 + . . . a_{m-1}x^{m-1} + a_mx^m \qquad (3.1)$$

   sao cho $p_m(x_i) = y_i$, $i = 0, 1,..., n$ (3.2)

   Người ta gọi bài toán trên đây là bài toán ***nội suy đa thức***, và đa thức $p_m(x)$ được gọi là ***đa thức nội suy***.

   Trong một số ứng dụng vật lý ta gặp các hiện tượng có tính chất tuần hoàn. Khi đó đa thức lượng giác tỏ ra thích hợp hơn trong bài toán nội suy. Và trong bài toán trên đa thức $p_m(x)$ được thay bằng đa thức lượng giác

$$q_m(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{j=1}^{m} [a_j \cos(jx) + b_j \sin(jx)]$$

2. Nội suy trong trường hợp số đo không hoàn toàn chính xác:

Trong thực tế các giá trị y_i tại các điểm quan sát lại thường chỉ là các giá trị gần đúng của các giá trị thật. Nói cách khác thực ra ta chỉ có $y_i \approx f(x_i)$ mà thôi. Trong trường hợp này nếu ta áp đặt điều kiện về đa thức nội suy phải thỏa mãn $p_m(x_i) = y_i$ thì không hợp lý. Thay vì tìm một đa thức thỏa mãn điều kiện này, ta tìm đa thức $p_m(x) = a_0 + a_1x^1 + \ldots a_{m-1}x^{m-1} + a_mx^m$, tức là xác định các hệ số $a_0, a_1, \ldots, a_m$ sao cho tổng bình phương sai số là bé nhất, tức là

$$e = \sum_{i=0}^{n} (y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j)^2$$

là bé nhất. Phương pháp nội suy theo tiêu chuẩn này được gọi là *phương pháp bình phương bé nhất* hay là *phương pháp bình phương cực tiểu.*

Ngoài hai phương pháp thông dụng trên, người ta còn dùng phương pháp xấp xỉ Csebisev dựa trên tiêu chuẩn:

$$\max_{0 \le i \le n} |y_i - p(x_i)|$$

cực tiểu.

3.2. NỘI SUY ĐA THỨC

3.2.1. Sự duy nhất của đa thức nội suy

Ta có định lý sau đây:

Định lý. Có duy nhất một đa thức có bậc không quá n và đi qua n+1 điểm cho trước (x_0,y_0), $(x_1,y_1), \ldots, (x_n,y_n)$.

Chứng minh. Ta xét đa thức có dạng (3.1) trên đây và thỏa mãn (3.2). Kết hợp (3.1) và (3.2) ta có

$$\begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ . \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ . & . & . & \ldots & . \\ 1 & x_n & x_n^2 & x_n^2 & x_n^n \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ . \\ a_n \end{pmatrix} \tag{3.3}$$

Hay có thể biểu diễn gọn hơn dưới dạng ma trận

$$Y = V a$$

Trong đó

$$V = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ . & . & . & \ldots & . \\ 1 & x_n & x_n^2 & x_n^2 & x_n^n \end{bmatrix}$$

chính là ma trận Vandermon, ta có

$$\det V = \prod_{0 \le i < j \le n} (x_j - x_i)$$

Vì ta đã giả thiết các điểm x_i và x_j khác nhau, do đó ma trận này khác 0 nên hệ phương trình (3.3) có nghiệm duy nhất cho các a_i, và như vậy đa thức $p_n(x)$ được xác định duy nhất. (Nếu khi giải phương trình (3.3) mà ta nhận được $a_n \neq 0$ thì đa thức này có bậc là n).

3.2.2. Tính giá trị đa thức bằng phương pháp Horner

Trong bài toán nội suy đa thức ta sẽ phải thường xuyên tính giá trị của đa thức $p_m(x) = a_0 + a_1x^1 + \ldots a_{m-1}x^{m-1} + a_mx^m$ tại điểm x. Nếu tính trực tiếp ta phải thực hiện khá nhiều phép tính, và khi tính các giá trị mũ của x có thể ta gặp các giá trị lớn, cho dù trong thực tế các thành phần của đa thức triệt tiêu lẫn nhau và giá trị của đa thức không lớn. Horner đưa ra cách tính sau loại trừ được các nhược điểm trên.

Ta viết lại đa thức $p_m(x)$ dưới một dạng khác:

$$p_m(x) = a_mx^m + a_{m-1}x^{m-1} + \ldots + a_1x^1 + a_0 = (\ldots((a_mx + a_{m-1})x + a_{m-2})x + \ldots + a_1)x + a_0$$

Từ đây ta có cách tính $p_m(x)$ trên máy tính như sau:

Đặt $P_m = a_m$

$P_{m-1} = P_mx + a_{m-1}$

...

$P_i = P_{i-1}x + a_i$

Khi tính toán ta không cần lưu trữ tất c các giá trị của Pi, mà chỉ cần lưu trữ các giá trị của Pi trong một vị trí bộ nhớ. Thuật toán trên trở thành:

Đặt $P = a_m$

Cho i chạy từ m-1 đến 0, tức là i=m-1,m-2,...,0

Đặt $P = Px + a_i$

P cuối cùng tính được chính là giá trị của đa thức tại x.

3.2.3. Sai số của đa thức nội suy

Định lý Rolle: Cho f(x) là hàm số thực liên tục trên khoảng đóng [a,b] và khả vi trên khoảng mở (a,b) và f(a) = f(b). Khi đó tồn tại điểm $\xi \in (a,b)$ sao cho $f'(\xi) = 0$.

Định lý: Giả sử hàm f(x) có đạo hàm liên tục đến cấp n+1 trên đoạn [a,b] và $p_m(x)$ là đa thức nội suy, tức là:$p_m(x_i) = f(x_i) = y_i$, i = 0, 1,..., n. Với các mốc nội suy là $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$.

Đặt $\omega_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i)$ và $R(x) = f(x) - p_m(x)$

Khi đó với $\forall\, x \in [a,b]$ tồn tại $\eta \in [a,b]$ (phụ thuộc vào x) sao cho

$$R(x) = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\,\omega_{n+1}(x) \qquad (3.4)$$

Hệ quả. Gọi $M = \sup_{a \le x \le b} |f^{(n+1)}(x)|$ khi đó ta có

$$|R(x)| \le |f(x) - p_m(x)| \le \frac{M}{(n+1)!} |\omega_{n+1}(x)| \qquad (3.5)$$

đây là công thức đánh giá sai số của đa thức nội suy.

Ta có thể áp dụng hệ quả (3.5) để đánh giá sai số đa thức nội suy.

Ví dụ. Cho bảng giá trị của hàm số y = sinx

x	0	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{2}$
y	0	0.707	1

Hãy đánh giá sai số khi dùng đa thức nội suy để tính gần đúng $\sin\frac{\pi}{3}$.

Giải. Bài ra không đặt vấn đề tính xấp xỉ $\mathbf{sin}\,\frac{\pi}{3}$ mà chỉ yêu cầu tính sai số.

Ta có $n = 2$ và như vậy $M = \sup_{a \le x \le b} |\sin^{(n+1)}(x)| = 1$, do đó

$$|R_2(\frac{\pi}{3})| \le \frac{1}{3!}\frac{\pi}{3}\frac{\pi}{12}\frac{\pi}{6} = 0.024$$

Sau đây ta sẽ xét một số phương pháp tìm đa thức nội suy dựa vào các điểm mốc cách đều và không cách đều.

3.2.4. Phương pháp nội suy Lagrange

Giả sử ta có các điểm quan sát $x_0, x_1, \dots x_n$ với khoảng chia đều hoặc không đều và một dãy các giá trị quan sát $y_0, y_1, \dots y_n$.

Ý tưởng đơn giản đầu tiên là tìm một đa thức nội suy có bậc n (chính xác hơn là có bậc không quá n) sao cho trong đó các cặp (x_i,y_i) $i = 0,1, \dots, n$ có vai trò bình đẳng. Thí dụ ta tìm $p_n(x)$ có dạng:

$$p_n(x) = H_0(x) + H_1(x) + \dots + H_n(x)$$

Các hàm $H_i(x)$ đều có bậc không quá n và $H_i(x_i) = y_i$, $H_{ki}(x_j) = 0$ khi $j \neq i$. Để $H_i(x_j) = 0$ khi $j \neq i$ thì $H_i(x)$ có dạng:

$$H_i(x) = K(x)(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)$$

Từ điều kiện $H_i(x_i) = y_i$ ta có

$$K(x)(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n) = y_i$$

Suy ra

$$K(x) = y_i\frac{(x - x_1)(x - x_2)\dots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\dots(x - x_n)}{(x_i - x_1)(x_i - x_2)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_n)}$$

Nếu ta ký hiệu $L_i(x) = \dfrac{(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\ldots(x - x_n)}{(x_i - x_1)(x_i - x_2)\ldots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\ldots(x_i - x_n)}$

Ta nhận thấy đa thức $L_i(x)$ có tính chất

$$L_i(x_j) = \begin{cases} 1 & j = i \\ 0 & j \neq i \end{cases}$$

và đa thức $p_n(x)$ có dạng

$$p_n(x) = y_0L_0(x) + y_1L_1(x) + \ldots + y_nL_n(x) \qquad (3.6)$$

Như vậy ta có

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)\ldots(x_0 - x_n)}$$

$$L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)\ldots(x - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)\ldots(x_1 - x_n)}$$

. . .

$$L_i(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\ldots(x - x_n)}{(x_i - x_1)(x_i - x_2)\ldots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\ldots(x_i - x_n)}$$

. . .

$$L_n(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_2)\ldots(x_n - x_{n-1})}$$

Đa thức nôi suy được xây dựng theo cách trên đây được gọi là đa thức nội suy Lagrange.

Ví dụ1 :Với hàm số y=sin(x/2) tại các nút giá trị sau:

I	x_i	y_i
0	0	0.000
1	1.5	0.682
2	2	0.841

Hãy xác định đa thức nội suy Lagrange đi qua các điểm trên? Hãy tính giá trị gần đúng của hàm số tại điểm x=1? Hãy đánh giá sai số lý thuyết tại x=1

Theo phần lý thuyết trên đa thức nội suy Lagrange đi qua các điểm (x_i,y_i) được xác định như sau

$$P(x)=\sum_{i=0}^{n} y_iL_i$$

$$\text{Với } L_i=\left(\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} (x-x_j)\right)/\left(\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} (x_i-x_j)\right)$$

Ta có:

$L0(x)=(x-1.5)(x-2)/3$

$L1(x)=-4/3x(x-2)$

$L2(x)=x(x-1.5)$

Vậy $P(x)= y_0L_{0(x)}+y_1L_{1(x)}+y_2L_{2(x)}=0- 0.682*4/3x(x-2) + 0.841*x(x-1.5)$

Vậy $P(1)=0- 0.682*4/3(1-2) + 0.841(1-1.5)$

$P(1)=0.4888$

* Đánh giá sai số lý thuyết:

$R(x)=(f(3)(\eta)/3!)*x(x-1.5)(x-2).$

$f(x)=\sin(x/2)$. vËy $f^{(3)}(x)=(-1/2^{(3)})\cos(x/2)$

Ta có $|f^{(3)}(x)|\leq 1/8$

Vậy $R(1)\leq(f^{(3)}(x)/3!)*(1-1.5)(1-2)\approx 0.01042$.

Ví dụ 2.Với hàm số y=sin(x/3) tại các nút giá trị sau:

I	x_i	y_i
0	0	0.000
1	1.5	0.479
2	2	0.618

Hãy xác định đa thức nội suy Lagrange đi qua các điểm trên? Hãy tính giá trị gần đúng của hàm số tại điểm x=1? Hãy đánh giá sai số lý thuyết tại x=1

Theo phần lý thuyết trên đa thức nội suy Lagrange đi qua các điểm (x_i,y_i) được xác định như sau

$$P(x)=\sum_{i=0}^{n} y_iL_i$$

Với $$L_i=\left(\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} (x-x_j)\right)/\left(\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} (x_i-x_j)\right)$$

Ta có:

$L_0(x)=(x-1.5)(x-2)/3$

$L1(x)=-4/3x(x-2)$

$L2(x)=x(x-1.5)$

Vậy $P(x)= y_0L_{0(x)}+y_1L_{1(x)}+y_2L_{2(x)}=0- 0.479*4/3x(x-2) + 0.618*x(x-1.5)$

Vậy $P(1)=0- 0.479*4/3(1-2) + 0.618(1-1.5)$

$P(1)\approx 0.3297$

* Đánh giá sai số lý thuyết:

$R(x)=(f(3)(\eta)/3!)*x(x-1.5)(x-2).$

$f(x)=\sin(x/3)$. vậy $f^{(3)}(x)=(-1/3^{(3)})\cos(x/3)$

Ta có $|f^{(3)}(x)|\leq 1/27$

Vậy $R(1)\leq(|f^{(3)}(x)|/3!)*(1-1.5)(1-2)\approx((1/27)/6)*0.5=0.00386$

3.2.5. Sai phân

Cách xây dựng đa thức nội suy Lagrange khá đơn giản về mặt ý tưởng. Tuy nhiên nhược điểm của nó là mỗi lần bổ sung thêm một số điểm quan sát mới ta lại phải tính lại từ đầu. Người ta tìm cách xây dựng một đa thức nội suy sao cho khi bổ sung các điểm quan sát thì ta không phải tính lại phần đa thức đã có. Thí dụ từ các điểm quan sát (x_0,y_0), (x_1,y_1),..., (x_k,y_k) ta tính được đa thức $p_k(x)$. Khi bổ sung thêm các điểm (x_{k+1},y_{k+1}),..., (x_n,y_n) thì đa thức nội suy tương ứng với mẫu quan sát (x_0,y_0),..., (x_n,y_n) sẽ có dạng $p_n(x) = p_k(x) + u(x)$.

Để thực hiện và trình bày điều này một cách rõ ràng, sáng sủa, trước hết ta cần đến khái niệm sai phân như sau:

a. Định nghĩa:

Cho f(x) là hàm của x và $h = \Delta x$ là một hằng số không đổi biểu thị cho khoảng thay đổi trên biến x và được gọi là số gia của x. Khi đó số gia tương ứng trên f(x):

$$\Delta f(x) = f(x+\Delta x) - f(x) \qquad (3.7)$$

được gọi là ***sai phân tiến*** cấp một tại điểm x của f(x) tương ứng với h. Gia số được tính bởi

$$\nabla f(x) = f(x) - f(x-\Delta x) \qquad (3.8)$$

được gọi là ***sai phân lùi*** cấp một tại điểm x của f(x) tương ứng với h.

Vì sai phân tiến g(x) của một hàm lại là một hàm của x do đó ta lại có thể định nghĩa sai phân tiến của g(x). Khi đó ta gọi sai phân tiến cấp một của g(x) là sai phân tiến cấp 2 của f(x), và cứ như vậy ta có thể định nghĩa sai phân tiến cấp k của một hàm f(x).

Với sai phân lùi ta cũng có lập luận và định nghĩa tương tự.

b. Sai phân tiến

Giả sử các điểm $x_0, x_1, \ldots x_n$ thoả mãn điều kiện

$$x_{i+1} - x_i = h$$

$$y_i = f(x_i),\ \ i = 0, 1, \ldots \tag{3.9}$$

Ta có thể thấy rằng sai phân tiến

$$\Delta^2 y_i = \Delta(\Delta y_i) = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i = y_{i+2} - y_{i+1} - (y_{i+1} - y_i) = y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i$$

Tổng quát ta có thể chứng minh rằng

$$\Delta^k y_i = \sum_{j=0}^{k} (-1)^j C_k^j\, y_{i+(k-j)} \tag{3.10}$$

Bảng các sai phân tiến

x	**y**	**Δy**	**Δ^2y**	**Δ^3y**	**Δ^4y**
x_0	y_0	Δy_0	$\Delta^2 y_0$	$\Delta^3 y_0$	$\Delta^4 y_0$
x_1	y_1	Δy_1	$\Delta^2 y_1$	$\Delta^3 y_1$	$\Delta^4 y_1$
x_2	y_2	Δy_2	$\Delta^2 y_2$	$\Delta^3 y_2$	$\Delta^4 y_2$
x_3	y_3	Δy_3	$\Delta^2 y_3$	$\Delta^3 y_3$	$\Delta^4 y_3$
x_4	y_4	Δy_4	$\Delta^2 y_4$	$\Delta^3 y_4$	$\Delta^4 y_4$
.	.	.	.	.	.
					$\Delta^4 y_{n-5}$
				$\Delta^3 y_{n-4}$	$\Delta^4 y_{n-4}$
			$\Delta^2 y_{n-3}$	$\Delta^3 y_{n-3}$	
.	.	Δy_{n-2}	$\Delta^2 y_{n-2}$		
x_{n-1}	y_{n-1}	Δy_{n-1}			
x_n	y_n				

c. Sai phân lùi

Với sai phân lùi ta có

$$\nabla^2 y_i = \nabla (\nabla y_i) = \nabla y_i - \nabla y_{i-1} = y_i - y_{i-1} - (y_{i-1} - y_{i-2}) = y_i - 2y_{i-1} + y_{i-2}$$

Tổng quát ta có thể chứng minh rằng

$$\nabla^k y_i = \sum_{j=0}^{k} (-1)^j C_k^j\, y_{i-j} \tag{3.11}$$

Bảng các sai phân lùi:

x	y	∇y	$\nabla^2 y$	$\nabla^3 y$	$\nabla^4 y$
x_0	y_0				
x_1	y_1	∇y_1			
.	.	∇y_2	$\nabla^2 y_2$		
			$\nabla^2 y_3$	$\nabla^3 y_3$	
				$\nabla^3 y_4$	$\nabla^4 y_4$
					$\nabla^4 y_5$
.	.	.	.	.	.
x_{n-4}	y_{n-4}	∇y_{n-4}	$\nabla^2 y_{n-4}$	$\nabla^3 y_{n-4}$	$\nabla^4 y_{n-4}$
x_{n-3}	y_{n-3}	∇y_{n-3}	$\nabla^2 y_{n-3}$	$\nabla^3 y_{n-3}$	$\nabla^4 y_{n-3}$
x_{n-2}	y_{n-2}	∇y_{n-2}	$\nabla^2 y_{n-2}$	$\nabla^3 y_{n-2}$	$\nabla^4 y_{n-2}$
x_{n-1}	y_{n-1}	∇y_{n-1}	$\nabla^2 y_{n-1}$	$\nabla^3 y_{n-1}$	$\nabla^4 y_{n-1}$
x_n	y_n	∇y_n	$\nabla^2 y_n$	$\nabla^3 y_n$	$\nabla^4 y_n$

3.2.6. Phương pháp sai phân Newton

a. Ý tưởng của phương pháp

Ta sẽ tìm một đa thức nội suy có bậc n (chính xác hơn là có bậc không quá n) sao cho trong đó các cặp (x_i,y_i) $i = 0,1, ..., n$, sao cho mỗi lần bổ sung thêm số liệu (thí dụ về cuối của mẫu quan sát) thì ta vẫn tận dụng được đa thức nội suy đã tính trước đó. Chính xác hơn, ta sẽ tìm đa thức nội suy $p_n(x)$ có dạng

$$p_n(x) = D_0(x) + D_1(x) + \ldots + D_n(x)$$

sao cho đa thức $p_i(x) = D_0(x) + D_1(x) + \ldots + D_i(x)$ là đa thức nội suy của mẫu:

$$(x_0,y_0), (x_1,y_1), \ldots, (x_i,y_i). \qquad (3.12)$$

Từ những điều kiện trên đây ta thấy $D_i(x)$ là đa thức bậc cao nhất là i, và các hệ số của nó chỉ phụ thuộc vào mẫu con $(x_0,y_0), (x_1,y_1), \ldots, (x_i,y_i)$.

Vì $D_0(x)$ là đa thức nội suy đi qua một điểm duy nhất (x_0,y_0), do đó đây là đa thức bậc 0, $D_0(x)=a_0$, trong đó a_0 là hằng số và ta có thể suy ra là $a_0 = y_0$.

Với i không âm, do $p_i(x)$ là đa thức nội suy của mẫu $(x_0,y_0), (x_1,y_1), \ldots, (x_i,y_i)$, ta có:

$$p_i(x_j) = D_0(x_j) + D_1(x_j) + \ldots + D_i(x_j) = y_j \quad j = 0,1, ...,i$$

Nhưng $p_n(x)$ là đa thức nội suy của mẫu $(x_0,y_0), (x_1,y_1), \ldots, (x_n,y_n)$ nên ta cũng có

$$p_n(x_j) = D_0(x_j) + D_1(x_j) + \ldots + D_i(x_j) + D_{i+1}(x_j) + \ldots + D_n(x_j) = y_j \quad j = 0,1, ...,i$$

Kết hợp hai đẳng thức trên ta suy ra:

$$D_k(x_j) = 0, \text{ với } k = i+1, i+2,..., n;\ j = 0,1,2,...,i$$

Hay $x_0, x_1, ..., x_i$ là nghiệm của các đa thức $D_k(x)$, $k = i+1, i+2, ..., n$. Nghĩa là các đa thức $D_k(x)$ có dạng

$$D_k(x) = R(x)(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_i),\ k = i+1, i+2, ..., n$$

Với $k = i+1$ thì đa thức $D_k(x)$ có bậc không cao hơn $i+1$, do đó nó có dạng

$$D_{i+1}(x) = a_{i+1}(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_i)$$

trong đó a_{i+1} là hằng số phụ thuộc vào mẫu $(x_0,y_0), (x_1,y_1), \ldots, (x_{i+1},y_{i+1})$.

Như vậy đa thức nội suy được xây dựng thỏa mãn (3.12) có dạng

$$p_n(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \ldots + a_i(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1}) + \ldots + a_n(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{n-1}) \qquad (3.13)$$

Trong đó a_i là hằng số phụ thuộc vào mẫu quan sát $(x_0,y_0), (x_1,y_1), \ldots, (x_i,y_i)$.

b. Phương pháp sai phân tiến Newton với khoảng chia đều

Giả sử các điểm $x_0, x_1, \ldots x_n$ thoả mãn điều kiện

$$xi+1 - xi = h$$

$$y_i = f(x_i),\ i = 0, 1, \ldots$$

Ta giả thiết rằng:

$$\Delta^k y_i \neq 0,\ k = 1,2, \ldots, m;\ m \leq n$$

$$\Delta^k y_i = 0,\ k > m$$

Khi đó ta có thể chọn đa thức nội suy có bậc m $p_m(x)$ theo phương pháp Newton tiến như sau:

$$p_m(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \ldots + a_i(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1}) + \ldots + a_m(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{m-1}) \qquad (3.14)$$

Và ta có thể dùng đa thức này để nội suy các giá trị trong khoảng $[x_0,x_m]$.

Xác định các hệ số a_i

Thay lần lượt các giá trị $x = x_i$, $i = 0,1,2,\ldots,m$ vào (3.14) ta được

$$p_m(x_0) = y_0 = a_0$$

Vậy $a_0 = y_0$

$$p_m(x_1) = y_1 = a_0 + a_1(x_1 - x_0) = y_0 + a_1 h$$

Vậy $a_1 = \dfrac{y_1 - y_0}{h} = \dfrac{\Delta y_0}{h}$

$$p_m(x_2) = y_2 = a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_0 + a_1 h = $$
$$= y_0 + 2(y_1 - y_0) + a_2\, 2h^2$$

Do đó $a_2\, 2h^2 = y_2 - 2y_1 + y_0 = \Delta^2 y_0$

Vậy $a_2 = \dfrac{\Delta^2 y_0}{2h^2}$

Tương tự với trường hợp tổng quát ta có

$$a_i = \frac{\Delta^i y_0}{i!\,h^i},\ i \leq m$$

Thay các a_i vào (3.14) ta có

$$p_m(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x-x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2h^2}(x-x_0)(x-x_1) + \ldots + \frac{\Delta^i y_0}{i!h^i}(x-x_0)(x-x_1)\ldots$$

$$+ (x-x_{i-1}) + \ldots + \frac{\Delta^m y_0}{m!h^m}(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{m-1}) \qquad (3.15)$$

Ta có thể biểu diễn (3.15) dưới một dạng khác bằng phép biến đổi

$$t = \frac{x - x_0}{h} \rightarrow x = x_0 + th$$

$$p_m(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x-x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2h^2}(x-x_0)(x-x_1) + \ldots$$

$$+ \frac{\Delta^i y_0}{i!h^i}(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1}) + \ldots + \frac{\Delta^m y_0}{m!h^m}(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{m-1})$$

$$p_m(x) = p_m(x_0 + th) = y_0 + (\Delta y_0)t + \frac{\Delta^2 y_0}{2}t(t-1) + \ldots$$

$$+ \frac{\Delta^i y_0}{i!}t(t-1)\ldots(t-i+1) + \ldots + \frac{\Delta^m y_0}{m!}t(t-1)\ldots(t-m+1) \quad (3.15b)$$

Ví dụ. Cho bảng sai phân sau:

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
2	23	70	96	48
4	93	166	144	48
6	259	310	192	48
8	569	502	240	48
10	1071	742	288	
12	1813	1030		
14	2843			

Ta thấy các sai phân bậc nhỏ hơn 4 khác không nhưng sai phân bậc bốn đều bằng không, do đó chúng ta chỉ xây dựng được đa thức bậc cao nhất là 3. Chọn x_0=4, x_1=6, x_2 = 8, ta được đa thức bậc ba là

$$p_3(x) = 93 + 83(x-4) + 18(x-4)(x-6) + (x-4)(x-6)(x-8)$$

Muốn tính giá trị của hàm f(x) tại các điểm x thuộc khoảng [4,8] ta chỉ cần thay giá trị x vào đa thức vừa lập được và tính giá trị của đa thức. Chẳng hạn với x = 4.2 ta có:

$$p_3(4.2) = 93 + 83(4.2-4) + 18(4.2-4)(4.2-6) + (4.2-4)(4.2-6)(4.2-8) = 104.48$$

Nhận xét về phương pháp sai phân tiến Newton:

Công thức nội suy Newton tiến thường được dùng để nội suy các giá trị của hàm f(x) ở vùng đầu bảng. Để nội suy các giá trị ở cuối bảng người ta thường dùng phương pháp sai phân lùi.

c. Phương pháp Newton với khoảng chia không đều

Trong thực tế các điểm $x_0, x_1, \dots x_n$ có thể không cách đều. Lúc này khoảng cách $x_{i+1} - x_i = h_i$ không phải là hằng số. Trong trường hợp này ta cũng xây dựng được đa thức nội suy Newton có dạng như (3.14) như trường hợp cách đều, nhưng cách tính toán các hệ số có khác. Ta đưa ra các ký hiệu sau, có thể xem là dạng tổng quát hóa của sai phân tiến.

Với số số nguyên $p \geq 0$ bất kỳ ta định nghĩa ***tỷ sai phân cấp 1*** là đại lượng

$$y[x_{p+1},x_p] = \frac{y_{p+1} - y_p}{x_{p+1} - x_p}$$

Ví dụ: $y[x_1,x_0] = \dfrac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}$

Tỷ sai phân cấp 2

$$y[x_{p+2},x_{p+1},x_p] = \frac{y[x_{p+2}, x_{p+1}] - y[x_{p+1}, x_p]}{x_{p+2} - x_p}$$

Ví dụ: $y[x_2,x_1,x_0] = \dfrac{y[x_2, x_1] - y[x_1, x_0]}{x_2 - x_0}$

. . .

Tỷ sai phân cấp k:

$$y[x_{p+k},\dots, x_{p+1}, x_p] = \frac{y[x_{p+k},\dots, x_{p+2}, x_{p+1}] - y[x_{p+k-1},\dots, x_{p+1}, x_p]}{x_{p+k} - x_p}$$

Ví dụ: $y[x_k,\dots, x_1, x_0] = \dfrac{y[x_k,\dots, x_2, x_1] - y[x_{k-1},\dots, x_1, x_0]}{x_k - x_0}$

Bây giờ ta xét đa thức nội suy

$$p_m(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \dots + a_i(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1}) + \dots + a_m(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{m-1}) \quad (3.16)$$

Thay lần lượt cácgiá trị $x = x_i$, i=0,1,...,n vào (3.16)

Ta có:

$$a_0 = y_0$$

$$y_1 - y_0 = a_1(x_1 - x_0) \Rightarrow a_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = y[x_1,x_0].$$

$$y_2 - y_0 = a_1(x_2-x_0) + a_2(x_2-x_0)(x_2-x_1) = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x_2 - x_0) + a_2(x_2-x_0)(x_2-x_1)$$

$$a_2(x_2-x_0)(x_2-x_1) = (y_2 - y_0) - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x_2 - x_0)$$

$$a_2 = \frac{y_2 - y_0}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} - \frac{y_1 - y_0}{(x_1 - x_0)(x_2 - x_1)} =$$

$$= \frac{(y_2 - y_1 + y_1 - y_0)(x_1 - x_0) - (y_1 - y_0)(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_1 - x_0)(x_2 - x_1)} \qquad (3.17)$$

Xét tử số ta có

$(y_2 - y_1 + y_1 - y_0)(x_1 - x_0) - (y_1 - y_0)(x_2 - x_1 + x_1 - x_0) =$

$(y_2 - y_1)(x_1 - x_0) + (y_1 - y_0)(x_1 - x_0) - (y_1 - y_0)(x_2 - x_1) - (y_1 - y_0)(x_1 - x_0) =$

$= (y_2 - y_1)(x_1 - x_0) - (y_1 - y_0)(x_2 - x_1)$

Thay vào (3.17) và giản ước ta có

$$a_2 = \frac{y[x_2,x_1] - y[x_1,x_0]}{(x_2 - x_0)} = y[x_2, x_1, x_0]$$

Tổng quát ta có thể chứng minh rằng

$a_k = y[x_k,..., x_1, x_0]$

Tương tự như phương pháp sai phân chia đều, ta có bảng tính tỷ sai phân (t.s.p) Newton tổng quát như sau:

X	y	t.s.p bậc 1	t.s.p bậc 2	t.s.p bậc 3	t.s.p bậc 4
X_0	y_0	$y[x_1,x_0]$	$y[x_2,x_1,x_0]$	$y[x_3,x_2,x_1,x_0]$	$y[x_4,x_3,x_2,x_1,x_0]$
X_1	y_1	$y[x_2,x_1]$	$y[x_3,x_2,x_1]$	$y[x_4,x_3,x_2,x_1]$	
X_2	y_2	$y[x_3,x_2]$	$y[x_4,x_3,x_2]$		
X_3	y_3	$y[x_4,x_3]$			
X_4	y_4				

Ví dụ. Cho bảng giá trị (x_i,y_i) (i=0,2...,4)tương ứng như sau

x	-4	-1	0	2	5
y	1245	33	5	9	1335

Hãy thiết lập đa thức nội suy Newton qua các điểm trên?

Vậy ta có bảng tỷ sai phân như sau:

x	y	t.s.p bậc 1	t.s.p bậc 2	t.s.p bậc 3	t.s.p bậc 4
-4	1245	-404	94	-14	3
-1	33	-28	10	13	
0	5	2	88		
2	9	442			
5	1335				

Chọn $x_0 = -4$ ta được đa thức nội suy

$$p_4(x) = 1245 - 404(x+4) + 94(x+4)(x+1) - 14(x+4)(x+1)x + 3(x+4)x(x-2) =$$
$$= 5 - 14x + 6x^2 - 5x^3 + 3x^4$$

d. Cài đặt phương pháp sai phân Newton tổng quát

Ta có thể thấy rằng thuật toán trong trường hợp khoảng chia không cách đều hoàn toàn có thể áp dụng cho trường hợp cách đều. Do vậy ta chỉ cài đặt cho trường hợp tổng quát.

Ta sẽ lưu trữ các điểm quan sát và các kết quả quan sát trong các vectơ x,y; các hệ số a_i trong vectơ a.

Để tính toán và lưu trữ các tỷ sai phân ta sẽ viết lại bảng tỷ sai phân dưới dạng sau

x	y	s.p bậc 1	s.p bậc 2	s.p bậc 3	s.p bậc 4
x_0	y_0	$y[x_1,x_0]$	$y[x_2,x_1,x_0]$	$y[x_3,x_2,x_1,x_0]$	$y[x_4,x_3,x_2,x_1,x_0]$
x_1	y_1	$y[x_2,x_1]$	$y[x_3,x_2,x_1]$	$y[x_4,x_3,x_2,x_1]$	
x_2	y_2	$y[x_3,x_2]$	$y[x_4,x_3,x_2]$		
x_3	y_3	$y[x_4,x_3]$			
x_4	y_4				

Các tỷ sai phân bậc k được tính bởi công thức sau:

$$y[x_{i+k},x_{i+k-1},...,x_i] = \frac{y[x_{i+k},x_{i+k-1},...,x_{i+1}] - y[x_{i+k-1},...,x_{i+1},x_i]}{(x_{i+k} - x_i)} \quad (3.18)$$

Ta có nhận xét sau:

Ta đánh số các sai phân bậc k căn cứ vào vị trí xuất phát i của nó và lưu trữ trong vectơ sp[i], i =0,1,2,...,n-1. Tỷ sai phân bậc k có vị trí xuất phát là i sẽ được lưu trữ trong phần tử sp[i] như bảng sau:

x	y	sp[i]	s.p bậc 1	s.p bậc 3	s.p bậc 4
x_0	y_0	sp[0]	$y[x_1,x_0]$	$y[x_3,x_2,x_1,x_0]$	$y[x_4,x_3,x_2,x_1,x_0]$
x_1	y_1	sp[1]	$y[x_2,x_1]$	$y[x_4,x_3,x_2,x_1]$	
x_2	y_2	sp[2]	$y[x_3,x_2]$		
x_3	y_3	sp[3]	$y[x_4,x_3]$		
x_4	y_4				

Khi k thay đổi thì ta có cảm giác như cần một mảng 2 chiều để lưu trữ các tỷ sai phân vì ở đây ta có 2 chỉ số là i và k. Tuy nhiên mục đích chúng ta không phải là tính các tỷ sai phân mà là tính các hệ số a_i, do đó ta sẽ thấy rằng chỉ cần lưu trữ sai phân trong một mảng vectơ là đủ. Các bước được tiến hành như sau:

- **Bước 0:** Đặt a[0] = y[0]

- **Bước 1:** Ta tính các sai phân bậc nhất và lưu vào vectơ sp, $y[x_{i+1},x_i]$ được lưu trữ vào sp[i], i = 0,1,2, ..., n-1

  Đặt a[1] = sp[0]

- **Bước 2:** Ta tính các sai phân bậc hai $y[x_{i+2},x_i]$ bắt đầu từ i=0,1,...,n-2 và lưu trữ vào sp[i], i = 0,1,2,..., n-2. Để tính $y[x_{0+2},x_0]$ chẳng hạn, ta đặt

$$sp[0] = \frac{y[x_2,x_1]-y[x_1,x_0]}{x_2-x_0} = \frac{sp[1]-sp[0]}{x_2-x_0}$$

  Tương tự ta có

$$sp[1] = \frac{y[x_3,x_2]-y[x_2,x_1]}{x_3-x_1} = \frac{sp[2]-sp[1]}{x_3-x_1}$$

  . . .

  Như vậy ta thấy khi tính lại sp[0] ta cần đến sp[0] và sp[1], khi tính sp[1] ta cần đến sp[1] và sp[2], ... như vậy quá trình tính toán sp[i] chỉ cần đến các phần tử từ vị trí i trở về sau mà không cần đến các vị trí trước i. Như vậy sau khi tính tỷ sai phân bậc 2 thứ i ta có thể dùng ngay vị trí i để lưu trữ không sợ rằng vị trí này bị những tính toán tiếp theo làm thay đổi, vì khi tính tỷ sai phân thứ i+1 ta chỉ cần giá trị sp[i+1] và sp[i+2].

  Đặt a[2] = sp[0].

  ……..

- **Bước k:** Ta tính các tỷ sai phân bậc k $y[x_{i+k},x_i]$ bắt đầu từ i=0,1,...,n-k và lưu trữ vào sp[i], i = 0,1,2, ..., n -k. Để tính $y[x_{0+k},x_0]$ chẳng hạn, ta đặt

$$sp[0] = \frac{y[x_k,x_1]-y[x_{k-1},x_0]}{x_k-x_0} = \frac{sp[1]-sp[0]}{x_k-x_0}$$

  Thực hiện tương tự với i =1,2,.., n-k.

  Đặt a[k] = sp[0]

  . . .

- **Bước n:** Ở bước cuối cùng ta tính

$$sp[0] = \frac{sp[1]-sp[0]}{x_n-x_0}$$

  Đặt a[n] = sp[0]

(Đoạn chương trình mô tả phương pháp được thể hiện ở phần sau)

3.2.7. Phép nội suy ngược

Trong các phần trước ta xét bài toán cho giá trị hàm y = f(x) tại các điểm quan sát x_0, x_1, ... x_n và cần xác định giá trị y = f(x) tại những điểm x không có trong các điểm quan sát. Bây giờ ta xét bài toán ngược lại: vẫn là các giả thiết trên, tức là cho bảng các giá trị y_i của hàm y = f(x) tại các điểm x_i, i=0,1,...,n. Cho biết giá trị y', ta hãy tính x' tương ứng. Bài toán này được gọi là bài toán nội suy ngược. Một trong những ứng dụng của nội suy ngược là tìm nghiệm xấp xỉ của phương trình f(x)=0.

Cách giải quyết bằng đa thức nội suy Lagrange.

Ta xem $x = \varphi(y)$ là hàm ngược của hàm $y = f(x)$ và xem các giá trị $y_0, y_1, ..., y_n$ là các mốc nội suy (nói chung các mốc y_i không đều). Từ đó từ đó biết y' ta sẽ tính được $x' = \varphi(y')$.

Chương trình cài đặt các đa thức nội suy

Sau đây là đoạn chương trình chính thể hiện (mô tả) phương pháp Newton và phương pháp Lagrange:

```
/*Tra ve gia tri da thuc noi suy tai x; anew[i] la cac he so da thuc noi suy Newton, xqs[i] la cac diem quan sat*/
double polinew(double x)
 {int i;double mx,s;
  s=anew[0];
  mx=1;
  for(i=0;i<nqs;i++)
   {mx*=(x-xqs[i]);
    s+=anew[i+1]*mx;
   }
  return s;
 }
//=============================================
/*Tra ve gia tri da thuc noi suy tai x; alag[i] la cac he so cua
  da thuc noi suy Lagrange , xqs[i] la cac diem quan sat*/
double polilag(double x)
 {int i,j;double mx,s;
  s=0;
  for(i=0;i<=nqs;i++)
   {mx=1;
    for(j=0;j<=nqs;j++)
     if(j!=i) mx*=(x-xqs[j]);
    s+=alag[i]*mx;
   }
  return s;
 }
//=============================================
/*Noi suy Newton voi khoang chia khong can deu */
void nsnewton(double *a)
```

```
{ int h,i,j,k;double tmp;kvecto sp;
  a[0]=yqs[0];
  for(i=0;i<=nqs-1;i++) //Tinh sai phan bac 1;
  sp[i]=(yqs[i+1]-yqs[i])/(xqs[i+1]-xqs[i]);
  a[1]=sp[0];
  for(k=2;k<=nqs;k++)//Tinh cac sai phan bac k va cac he so a[i]
  { for(i=0;i<=nqs-k;i++)
    sp[i]=(sp[i+1]-sp[i])/(xqs[i+k]-xqs[i]);
    a[k]=sp[0];
  }
}
//==================================================
/*Noi suy Lagrange voi khoang chia khong can deu
  Tinh cac he so*/
  a[i] = 1/((x[i]-x[0])(x[i]-x[1])...(x[i]-x[i-1])(x[i]-x[i+1])...x[m])*/
void nslagrange(double *a)
{ int h,i,j,k;double tmp;
  for(i=0;i<=nqs;i++) //Tinh cac he so a[i];
  { tmp=1;
    for(j=0;j<=nqs;j++) if(j!=i) tmp=tmp*(xqs[i]-xqs[j]);
    a[i]=yqs[i]/tmp;
  }
}
```

3.3. KHỚP ĐƯỜNG CONG - NỘI SUY SPLINE

Trong phần trước ta đã xét bài toán nội suy dùng đa thức và như ta đã thấy, các đa thức nội suy thường có bậc là n, trong đó n+1 là số điểm quan sát. Ta có thể nội suy bằng đa thức bậc m nhỏ hơn n, nhưng như vậy thì ta cũng chỉ dùng đến mẫu quan sát dựa trên m+1 điểm là (x_0,y_0), (x_1,y_1), . . . ,(x_m,y_m) và như thế chỉ nội suy được giá trị của hàm tại các điểm $x \in [x_0,x_m]$. Điều này tỏ ra không được phù hợp với thực tế cho lắm. Thật vậy, giả sử trong thực tế hàm f(x) là một đa thức bậc 3 nhưng vì ta không biết điều này nên phải dùng đa thức nội suy. Theo một cách tự nhiên, ta nghĩ rằng nếu có càng nhiều thông tin thì ta càng giải quyết bài toán tốt hơn. Nghĩa là nếu có càng nhiều điểm quan sát thì kết quả của chúng ta càng gần với thực tế hơn. Tuy nhiên nếu dùng đa thức nội suy như kiểu chúng ta vừa khảo sát thì không có được như điều chúng ta mong đợi. Mặc dầu dạng thật của đa thức là bậc 3, nhưng nếu dùng 5 điểm quan sát thì ta phải tính các hệ số đa thức bậc 4, 10 điểm thì ta phải tính toán với đa thức bậc 9,...nghĩa là càng dùng nhiều điểm thì ta càng đi xa thực tế hơn. Phép nội suy đa thức còn có một nhược điểm nữa là số lượng phép tính cần thực hiện phụ thuộc rất nhiều vào cỡ của mẫu quan sát. Trong kỹ thuật truyền thông chẳng hạn, việc chuyển đổi một tín hiệu số có hàng ngàn điểm quan sát sang dạng tương tự là vấn đề thường gặp. Thế nhưng chỉ cần nội suy đa thức cho 101 điểm quan sát ta đã phải dùng đến đa thức bậc 100, và việc dùng đa thức bậc 100 để tính toán cho các điểm còn lại là một việc tiêu tốn tài nguyên máy một cách quá lãng phí. Vì vậy có thể nói rằng phép nội suy đa thức chỉ có ý nghĩa lý thuyết mà thôi, trong thực tế hầu như người ta không dùng đến.

Để tìm kiếm một cách nội suy gần với thực tế hơn, chúng ta hãy bắt đầu bằng một thao tác đơn giản mà chúng ta hay thực hiện hồi còn học phổ thông. Khi vẽ một đồ thị hàm số nào đó, đầu tiên ta vẽ các điểm rời rạc, và vẽ được càng nhiều điểm càng tốt. Sau đó ta dùng bút nối các điểm đó với nhau, nhưng ta không nối bằng thước kẻ, mà nối bằng bút và sự quan sát bằng mắt sao cho các đoạn nối các điểm thành một đường mịn, không bị gãy khúc.

Những người chuyên vẽ sơ đồ thiết kế dùng một thiết bị cơ học gọi là spline để vẽ các đường cong đẹp, có thẩm mỹ: người vẽ xác định tập hợp các điểm (nút) rồi bẻ cong một giải plastic hay thanh gỗ linh hoạt (spline) quanh chúng và lấy vết chúng để tạo thành một đường cong. Nội suy spline về mặt toán học tương đương với tiến trình này và cho ra cùng một kết quả.

3.4. PHƯƠNG PHÁP BÌNH PHƯƠNG CỰC TIỂU

Trong phương pháp nội suy đa thức đã xét, ta đòi hỏi đa thức phải đi qua các điểm quan sát. Điều này đôi khi là điều kiện quá chặt trong thực tế. Sau đây ta sẽ xác định tham số của một hàm f(x) có dạng đã biết, sao cho các giá trị $f(x_i)$ xấp xỉ tốt nhất các giá trị y_i theo một tiêu chuẩn gọi là bình phương cực tiểu. Trong bài toán ước lượng bình phương cực tiểu ta phải giả thiết là dạng hàm f(x) đã biết và ta chỉ cần ước lượng các tham số. Nói chung đối với dạng bài toán này thì ta không thể đặt ra yêu cầu là đồ thị hàm số $y = f(x)$ phải đi qua các điểm quan sát, mà chỉ có thể đặt ra yêu cầu là đồ thị gần các điểm quan sát nhất trong tập hợp các dạng hàm đã cho.

3.4.1. Trường hợp hàm nội suy là đa thức hay y phụ thuộc các tham số một cách tuyến tính

Bây giờ ta xét một trường hợp hay được áp dụng nhất là hàm f(x) có dạng đa thức bậc m, tức là:

$$f(x) = a_0 + a_1x^1 + \ldots a_{m-1}x^{m-1} + a_mx^m$$

Vì giá trị $f(x_i)$ nói chung khác giá trị y_i, giả sử sai số là e_i, ta có

$$y_i = a_0 + a_1x_i^1 + \ldots a_{m-1}x_i^{m-1} + a_m x_i^m + e_i$$

$i=0,1,2,\ldots,n$

Như vậy ta có:

$$e_i = y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j$$

Và tổng bình phương các sai số bằng

$$S = \sum_{i=0}^{n} e_i^2 = \sum_{i=0}^{n} (y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j)^2$$

Để S đạt giá trị nhỏ nhất thì điều kiện sau phải thỏa mãn

$\partial S / \partial a_k = 0$, với $k=0,1,...,m$

Thực hiện phép lấy đạo hàm riêng từng thành phần của tổng theo a_k ta có

$$\partial (y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^{j})^2 / \partial a_k = 2(y_i - \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^{j})(- x_i^{k}) = 2(-y_i x_i^{k} + \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^{j+k})$$

Như vậy

$$\partial S / \partial a_k = 2\sum_{i=0}^{n} (-y_i x_i^{k} + \sum_{j=0}^{m} a_j x_i^{j+k}) = 0, \; k=0,1,2,...,m$$

Từ đây

$$\sum_{j=0}^{m} a_j \sum_{i=0}^{n} x_i^{j+k} = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^{k}, \; k = 0,1,2,...,m$$

Với $k = 0,1,2,..,m$

$$(n+1)a_0 + a_1\sum_{i=0}^{n} x_i + a_2\sum_{i=0}^{n} x_i^2 + \ldots + a_m\sum_{i=0}^{n} x_i^m = \sum_{i=0}^{n} y_i$$

$$a_0\sum_{i=0}^{n} x_i + a_1\sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_2\sum_{i=0}^{n} x_i^3 + \ldots + a_m\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i$$

$$a_0\sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_1\sum_{i=0}^{n} x_i^3 + a_2\sum_{i=0}^{n} x_i^4 + \ldots + a_m\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+2} = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^2$$

$$\ldots$$

$$a_0\sum_{i=0}^{n} x_i^m + a_1\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} + a_2\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+2} + \ldots + a_m\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+m} = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^m$$

Đặt

$$C = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^{n} x_i^0 & \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} x_i^3 & \ldots & \sum_{i=0}^{n} x_i^m \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} x_i^3 & \sum_{i=0}^{n} x_i^4 & \ldots & \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} \\ \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} x_i^3 & \sum_{i=0}^{n} x_i^4 & \sum_{i=0}^{n} x_i^5 & \ldots & \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} \\ \ldots & & & & & \\ \sum_{i=0}^{n} x_i^m & \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} & \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+2} & \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+3} & \ldots & \sum_{i=0}^{n} x_i^{2m} \end{bmatrix}$$

$$d = \left(\sum_{i=0}^{n} y_i x_i^0, \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^1, \ldots, \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^m\right)$$

Ta có hệ phương trình

$$C\,a = d$$

Tuy nhiên, để tiện cho việc tính toán, ta có nhận xét sau đây:

Đặt $y = (y_0, y_1, \ldots, y_n)^T$, $e = (e_0, e_1, \ldots, e_n)^T$, $a = (a_0, a_1, \ldots, a_n)^T$

$$F = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^m \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^m \\ . & . & & \ldots & . \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^m \end{bmatrix}$$

Hệ phương trình $C\,a = d$ có thể viết dưới dạng sau:

$$F^T F\,a = F^T y$$

Ta có thể áp dụng phương pháp Gauss-Jordan để giải hệ phương trình này.

Ta có thể thấy rằng nếu $m \le n$ thì định thức của ma trận C khác không và vì vậy đa thức nội suy bình phương cực tiểu được xác định duy nhất.

Thật vậy, viết chi tiết ma trận C ta có

$$C = \begin{bmatrix} 1+1+\ldots+1 & x_0+x_1+\ldots+x_n & \ldots & x_0^m+x_1^m+\ldots+x_n^m \\ x_0+x_1+\ldots+x_n & x_0^2+x_1^2+\ldots+x_n^2 & \ldots & x_0^{m+1}+x_1^{m+1}+\ldots+x_n^{m+1} \\ . & . & \ldots & . \\ x_0^m+x_1^m+\ldots+x_n^m & x_0^{m+1}+x_1^{m+1}+\ldots+x_n^{m+1} & \ldots & x_0^{2m}+x_1^{2m}+\ldots+x_n^{2m} \end{bmatrix}$$

Bằng cách tách ra các cột ta thu được $(n+1)^{m+1}$ ma trận con $C_1, C_2, \ldots$, mỗi cột của ma trận con chỉ phụ thuộc các số $1, x_0, x_1, \ldots, x_n$. Sau khi đã tách được như vậy, bằng cách đặt thừa số chung ra ngoài ta lại thu được các ma trận mà mỗi ma trận có $m+1$ cột, các cột này được lấy từ tổ hợp của $(n+1)$ các cột có dạng

$$\begin{pmatrix} 1 \\ x_0 \\ x_0^2 \\ . \\ x_0^m \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ x_1 \\ x_1^2 \\ . \\ x_1^m \end{pmatrix}, \ldots, \begin{pmatrix} 1 \\ x_n \\ x_n^2 \\ . \\ x_n^m \end{pmatrix}$$

Dễ thấy rằng:

- Nếu $m>n$ thì các ma trận con luôn có 2 cột nào đó trùng nhau nên định thức bằng 0 và do đó $\det C = \Sigma \det C_i = 0$.
- Nếu $n \ge m$: ma trận C được tách thành hai loại ma trận:

Loại 1: Các ma trận có 2 cột nào đó cùng phụ thuộc một thành phần trong $x_0,x_1,...,x_n$ nên có định thức bằng 0.

Loại 2: Các ma trận có m+1 cột khác nhau lấy từ (n+1) cột có dạng trên. Các ma trận này có dạng Vandermond nên khác không. Do đó det C $\neq$ 0.

3.4.2. Trường hợp y phụ thuộc các tham số một cách phi tuyến

a. $y = ae^{bx}$***, a>0*** (3.19)

Lấy logarit hai vế, ta có

$$\ln y = \ln a + bx$$

Đặt $Y = \ln y$, $A = \ln a$, $B = B$, $X = x$ (3.18) trở thành

$$Y = A + BX \qquad (3.20)$$

Như vậy bằng cách lấy logarit hai vế, ta đã đưa quan hệ phi tuyến (3.19) thành dạng tuyến tính (3.20). Ta tính được A và B, từ đây tính được a, b.

b. $y = ax^b$***, a>0*** (3.21)

Lấy logarit hai vế, ta có

$$\ln y = \ln a + b\ln x$$

Đặt $Y = \ln y$, $A = \ln A$, $B = b$, $X = \ln x$ (3.21) trở thành

$$Y = A + BX \qquad (3.22)$$

Từ đây ta tính được A và B, và suy ra a, b.

Chương trình cài đặt các đa thức nội suy

Sau đây là đoạn chương trình chính thể hiện (mô tả) thuật toán hồi qui bằng bình phương cực tiểu

```
/*Hoi quy dung da thuc uoc luong theo phuong phap binh phuong cuc tieu*/
/*Cho truoc bac m, xac dinh cac he so da thuc thuc nghiem , tra ve tong binh phuong cac sai so*/
double regresspoli(double *a,int m)
 {int i,j,k;
   kmatran aa;
   double **f,**ft;
   f = new double* [nqs+1];
   for(I=0;i<=nqs;i++) f[i] = new double [m+1];
   ft = new double* [m+1];
   for(I=0;i<=m;i++) ft[i] = new double [nqs+1];
  /*Tinh ma tran
    f la ma tran co kieu nhu Vandermon nhung co n hang m cot,
    ft la ma tran chuyen vi cua f. Nhu vay ft x f se la ma tran aa cua
    he phuong trinh tuyen tinh
  */
```

```
for(i=0;i<=nqs;i++)
 {f[i][0]=1;
  for(j=1;j<=m;j++)
   f[i][j]=f[i][j-1]*xqs[i];
 }
//Tinh ma tran chuyen vi
for(i=0;i<=m;i++)
 for(j=0;j<=nqs;j++) ft[i][j]=f[j][i];
/*Tinh ma tran vuong aa cap m, chi can tinh tinh nua tren roi gan cho
  nua duoi, vi ma tran aa la doi xung
*/
for(i=0;i<=m;i++)
 for(j=i;j<=m;j++)
  {aa[i][j]=ft[i][0]*f[0][j];
   for(k=1;k<=nqs;k++) aa[i][j]+=ft[i][k]*f[k][j];
  }
//Gan nua duoi
for(i=0;i<=m;i++)
 for(j=0;j<i;j++) aa[i][j]=aa[j][i];
//Tinh ve phai cua he phuong trinh
for(i=0;i<=m;i++)
 {aa[i][m+1]=ft[i][0]*yqs[0];
  for(k=1;k<=nqs;k++) aa[i][m+1]+=ft[i][k]*yqs[k];
 }
for(i=0;i<=nqs;i++) delete [] f[i];
for(i=0;i<=m;i++) delete [] ft[i];
gjordan(aa,a,m);
//Tinh tong binh phuong cac sai so
double ss,fa,xx;
ss=0;
for(i=0;i<=nqs;i++)
 {fa=1;xx=1;
  for(j=1;j<=m;j++)
    {xx=xx*xqs[i];fa+=a[j]*xx;}
 ss+=(yqs[i]-fa)*(yqs[i]-fa);
 }
return ss;
}
```

3.5. BÀI TẬP

Bài 1. Cho hàm số $y = 2^x$ với các giá trị tại $x_i = 3{,}50 + 0{,}05i$, $i=0,1,2,3,4$ tuần tự là 33,115;34,813; 36,598; 38,475; 40,477. Hãy lập đa thức nội suy Newton tiến xuất phát từ nút 3,50.

Bài 2. Tích phân xác suất

$$\phi(x) = (2/\mathrm{sqrt}(\pi))\int_0^x \exp(-t^2)\,dt$$

Không tính được bằng nguyên hàm. Người ta tính gần đúng nó tại $x_i = 1 + 0{,}1i$, $i=0,1,2,..,10$ được các giá trị xấp xỉ tuần tự là 0,8427; 0,8802; 0,9103; 0,9523; 0,9661; 0,9763; 0,9838; 0,9891; 0,9928; 0,9953. Hãy tính $\phi(1{,}43)$

Bài 3. Cho hàm số $y = e^x$ tại $x = 0{,}65 + 0{,}1i$ $i=0,1,...,5$ tuần tự là 1,91554; 2,11700; 2,33965; 2,58571; 2,85765; 3,15819. Hãy tính ln2.

Bài 4. Biết rằng đại lượng y là một tam thức bậc hai của x và tại x =0,78; 1,56; 2,34; 3,12; 3,81 các giá trị của y tuần tự là 2,5; 1,20; 1,12; 4,28. Hãy lập công thức y biểu diễn qua x.

Bài 5. Hãy đánh giá sai số nhận được khi xấp xỉ hàm số y = sinx bằng đa thức nội suy Lagrange bậc 5 $L_5(x)$, biết rằng đa thức này trùng với hàm số đã cho tại các giá trị x bằng: 0^0, 5^0, 10^0, 15^0, 20^0, 25^0.

Xác định gía trị của sai số khi $x = 12^0 30'$.

Bài 6. Cho bảng các giá trị:

x	2	4	6	8	10	12
	7.32	8.24	9.20	10.19	11.01	12.05

Hãy áp dụng phương pháp bình phương cực tiểu xác định các đa thức xấp xỉ có các dạng:
$y = a + bx$, $y = a+bx+cx^2$, $y = ax^b$

và so sánh các sai số để kết luận dạng nào thích hợp nhất.

Bài 7. Thử lại hoặc viết mới các chương trình cài đặt các thuật toán rồi chạy thử để kiểm tra các kết quả trên đây.

TÓM TẮT NỘI DUNG CHƯƠNG 3

Trong chương này chúng ta cần chú ý nhất là các vấn đề sau:

1. Sai số của đa thức nội suy

Với $M = \sup\limits_{a \le x \le b} |f^{(n+1)}(x)|$ khi đó ta có: $|R(x)| \le |f(x) - p_m(x)| \le \dfrac{M}{(n+1)!}|\omega_{n+1}(x)|$

đây là công thức đánh giá sai số của đa thức nội suy.

2. Phương pháp nội suy Lagrange

Đa thức $p_n(x)$ có dạng như sau, được gọi là đa thức nội suy Lagrange:

$$p_n(x) = y_0L_0(x) + y_1L_1(x) + \ldots + y_nL_n(x) \qquad (3.6)$$

Với:

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)\ldots(x_0 - x_n)}$$

$$L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)\ldots(x - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)\ldots(x_1 - x_n)}$$

. . .

$$L_i(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\ldots(x - x_n)}{(x_i - x_1)(x_i - x_2)\ldots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\ldots(x_i - x_n)}$$

. . .

$$L_n(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_2)\ldots(x_n - x_{n-1})}$$

3. Phương pháp sai phân Newton

Phương pháp sai phân tiến Newton với khoảng chia đều

Theo phương pháp Newton tiến thì đa thức nội suy có bậc m là $p_m(x)$ với khoảng chia đều như sau:

$$p_m(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x-x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2h^2}(x-x_0)(x-x_1) + \ldots + \frac{\Delta^i y_0}{i!h^i}(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1}) + \ldots + \frac{\Delta^m y_0}{m!h^m}(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{m-1})$$

Hoặc có thể biểu diễn công thức trên dưới một dạng khác bằng phép biến đổi $t = \dfrac{x - x_0}{h}$ -> $x = x_0 + th$:

$$p_m(x) = p_m(x_0 + th) = y_0 + (\Delta y_0)t + \frac{\Delta^2 y_0}{2} t(t-1) + \ldots$$

$$+ \frac{\Delta^i y_0}{i!} t(t-1)\ldots(t-i+1) + \ldots + \frac{\Delta^m y_0}{m!} t(t-1)\ldots(t-m+1)$$

Phương pháp sai phân tiến Newton với khoảng chia không đều

Theo phương pháp Newton tiến thì đa thức nội suy có bậc m là $p_m(x)$ với khoảng chia không đều như sau:

$$p_m(x) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)(x-x_1) + \ldots + a_i(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1}) + \ldots$$
$$+ a_m(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{m-1}) \qquad (3.16)$$

Trong đó:

$a_0 = y_0$

$a_1 = \dfrac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = y[x_1, x_0].$

$a_2 = \dfrac{y[x_2, x_1] - y[x_1, x_0]}{(x_2 - x_0)} = y[x_2, x_1, x_0]$

....

$a_m = y[x_m, \ldots, x_1, x_0]$