



CK.0000059845

NGUYỄN ĐỨC NGHĨA

# TÍNH TOÁN KHOA HỌC

NGUYỄN  
ĐỨC LIỆU

NHÀ XUẤT BẢN BÁCH KHOA - HÀ NỘI

NGUYỄN ĐỨC NGHĨA

# TÍNH TOÁN KHOA HỌC

NHÀ XUẤT BẢN BÁCH KHOA – HÀ NỘI

Bản quyền thuộc về trường Đại học Bách Khoa Hà Nội.

Mọi hình thức xuất bản, sao chép mà không có sự cho phép bằng văn bản của trường là vi phạm pháp luật.

Mã số: 58 – 2013/CXB/29 – 01/BKHN

**Biên mục trên xuất bản phẩm của Thư viện Quốc gia Việt Nam**

Nguyễn Đức Nghĩa

Tính toán khoa học / Nguyễn Đức Nghĩa. - H. : Bách khoa Hà Nội, 2013. - 408tr. : hình vẽ, bảng ; 24cm

Thư mục: tr. 407

ISBN 9786049112799

1. Toán tin 2. Thuật toán 3. Giáo trình

004.01 - dc14

BKF0029p-CIP

## LỜI NÓI ĐẦU

Giáo trình được **Tính toán khoa học** biên soạn dựa trên nội dung các bài giảng mà tác giả sử dụng để giảng dạy cho sinh viên ngành Công nghệ Thông tin, Đại học Bách Khoa Hà Nội. Với thời lượng để giảng dạy trong 60 tiết, giáo trình trình bày một số vấn đề cơ bản trong lĩnh vực Tính toán khoa học nhằm cung cấp cho sinh viên những kiến thức và kỹ năng cần thiết trong việc thực hiện các thuật toán tính toán số trên máy tính để giải các bài toán ứng dụng của khoa học kỹ thuật trong thực tế.

Giáo trình bao gồm 9 chương:

Chương 0. Mở đầu.

Chương 1. Nhập môn MATLAB.

Chương 2. Hệ phương trình tuyến tính.

Chương 3. Đường cong khớp.

Chương 4. Giải phương trình phi tuyến.

Chương 5. Tính gần đúng đạo hàm và phân tích.

Chương 6. Bài toán giá trị ban đầu đối với phương trình vi phân thường.

Chương 7. Các phương pháp cực tiểu hóa không ràng buộc.

Chương 8. Quy hoạch tuyến tính.

Do biên soạn lần đầu nên cuốn sách không thể tránh khỏi những hạn chế và thiếu sót nhất định, vì thế tác giả rất mong nhận được những ý kiến đóng góp của đồng nghiệp và các bạn đọc để tác giả có thêm điều kiện hoàn chỉnh cho lần xuất bản tiếp theo.

Mọi góp ý xin gửi về địa chỉ Email: [nghiand@soict.hut.edu.vn](mailto:nghiand@soict.hut.edu.vn).

**Tác Giả**

# MỤC LỤC

LỜI NÓI ĐẦU .....	3
<b>CHƯƠNG 0. MỞ ĐẦU .....</b>	<b>9</b>
0.1. TÍNH TOÁN KHOA HỌC LÀ GÌ? .....	9
0.2. CÁCH TIẾP CẬN TÍNH TOÁN KHOA HỌC .....	10
0.3. SAI SỐ TÍNH TOÁN TRONG CÁC PHƯƠNG PHÁP SỐ .....	11
0.3.1. Nguồn gốc của sai số .....	11
0.3.2. Các loại sai số .....	12
0.3.3. Về điều kiện của bài toán .....	13
0.3.4. Số với dấu phẩy động .....	14
0.3.5. Chuẩn IEEE đối với phép tính số học nhị phân .....	15
0.3.6. Độ chính xác của máy tính .....	16
0.3.7. Sự ổn định số .....	20
0.3.8. Các thuật toán số .....	20
0.4. HẬU QUẢ CỦA CÁC SAI SỐ PHẦN MỀM .....	21
0.4.1. Tại sao tên lửa Patriot đã không ngăn chặn được Scud? .....	22
0.4.2. Vụ nổ tên lửa Ariane 5 (The Explosion of the Ariane 5) .....	23
0.4.3. Intel Pentium Flaw .....	23
<b>CHƯƠNG 1. NHẬP MÔN MATLAB .....</b>	<b>24</b>
1.1. GIỚI THIỆU CHUNG VỀ MATLAB .....	24
1.2. LÀM VIỆC VỚI MATLAB .....	25
1.2.1. Màn hình làm việc của MATLAB .....	25
1.2.2. Trợ giúp tức thời (Online Help) trong MATLAB .....	26
1.2.3. Làm việc trong chế độ hội thoại và với file chương trình M-file .....	26
1.2.4. Các tên biến và tên hàm (function) chuẩn của MATLAB .....	28
1.2.5. Khuôn dạng dữ liệu .....	28
1.2.6. Vẽ đồ thị đơn giản .....	29
1.2.7. Khởi tạo biến vector và ma trận .....	30
1.2.8. Địa chỉ của mảng .....	32
1.2.9. Biến xâu trong MATLAB .....	34
1.2.10. Các phép toán đối với vector và ma trận .....	36
1.2.11. Một số lệnh khác .....	44
1.3. LẬP TRÌNH TRÊN MATLAB .....	45
1.3.1. Soạn thảo lệnh trong cửa sổ màn hình lệnh của MATLAB .....	45
1.3.2. Câu lệnh trong MATLAB .....	45

1.3.3.	Các phép toán quan hệ và logic trong MATLAB .....	46
1.3.4.	Câu lệnh if .....	47
1.3.5.	Câu lệnh vòng lặp.....	48
1.3.6.	Kịch bản (Script) và hàm (Function).....	51
1.4.	CÁC PHÉP TÍNH MA TRẬN NÂNG CAO .....	59
1.4.1.	Trị riêng, vector riêng và một số phương pháp số của đại số tuyến tính....	59
1.4.2.	Tính toán với ma trận thưa (Sparse matrix computations) .....	60
1.5.	ĐỒ HỌA NÂNG CAO.....	64
1.5.1.	Đưa nhiều đồ thị lên cùng một cửa sổ .....	64
1.5.2.	Vẽ đường .....	65
1.5.3.	Vẽ mặt .....	70
1.5.4.	Vẽ đường mức (Level Curves) .....	76
1.5.5.	Vẽ trường vector (Vector Field) .....	78
1.6.	VÀO – RA DỮ LIỆU.....	82
1.6.1.	Vào dữ liệu từ bàn phím .....	82
1.6.2.	Đưa ra màn hình .....	84
1.6.3.	Vào – ra với file văn bản .....	87
1.7.	MỘT SỐ VẤN ĐỀ KHÁC .....	92
1.7.1.	Giải các bài toán phi tuyến trong MATLAB .....	92
1.7.2.	Tính thời gian thực hiện .....	92
1.7.3.	Hiệu quả của chương trình viết trên MATLAB .....	93
1.7.4.	Kiểu dữ liệu nâng cao trong MATLAB .....	93
1.8.	VÍ DỤ MINH HỌA.....	96
1.8.1.	Thuật toán đơn hình hai pha giải bài toán quy hoạch tuyến tính dạng chính tắc.....	96
1.8.2.	Cài đặt chương trình trên MATLAB.....	100
BÀI TẬP CHƯƠNG 1 .....		110
<b>CHƯƠNG 2. HỆ PHƯƠNG TRÌNH TUYẾN TÍNH.....</b>		<b>120</b>
2.1.	ĐIỂM LẠI MỘT SỐ KẾT QUẢ TỪ ĐẠI SỐ MA TRẬN.....	120
2.2.	VÍ DỤ BA CHIỀU.....	124
2.3.	MA TRẬN HOÁN VỊ VÀ MA TRẬN TAM GIÁC.....	126
2.3.1.	Ma trận hoán vị.....	126
2.3.2.	Ma trận tam giác.....	127
2.4.	PHÂN TÍCH LU (LU FACTORIZATION) .....	129
2.5.	VAI TRÒ CỦA PHẦN TỬ TRỤ .....	132
2.6.	HIỆU ỨNG CỦA SAI SỐ LÀM TRÒN .....	133
2.7.	CÀI ĐẶT THUẬT TOÁN TRÊN MATLAB.....	135



2.8. HỆ XÁC ĐỊNH TÔI VÀ SỐ ĐIỀU KIỆN CỦA MA TRẬN.....	143
2.8.1. Chuẩn vector.....	144
2.8.2. Chuẩn ma trận.....	146
2.8.3. Số điều kiện của ma trận.....	147
2.8.4. Đánh giá sai số khi biết số điều kiện của ma trận.....	148
2.9. GIẢI HỆ PHƯƠNG TRÌNH TUYẾN TÍNH BẰNG PHÂN TÍCH MA TRẬN.....	151
2.9.1. Phân tích Cholesky.....	151
2.9.2. Phân rã $QR$ .....	151
2.10. VÍ DỤ.....	152
BÀI TẬP CHƯƠNG 2.....	154
<b>CHƯƠNG 3. ĐƯỜNG CONG KHỚP.....</b>	<b>158</b>
3.1. ĐẶT VẤN ĐỀ.....	158
3.2. NỘI SUY.....	158
3.2.1. Mở đầu.....	158
3.2.2. Nội suy tuyến tính.....	159
3.2.3. Công thức nội suy Lagrange.....	160
3.3. NỘI SUY BỞI SPLINE.....	170
3.3.1. Đặt vấn đề.....	170
3.3.2. Spline tuyến tính từng khúc.....	171
3.3.3. Nội suy bởi spline bậc ba.....	174
3.4. HỒI QUY.....	183
3.4.1. Đặt vấn đề.....	183
3.4.2. Hồi quy tuyến tính (Linear Regression Analysis).....	185
3.4.3. Đường cong khớp bậc cao.....	188
3.4.4. Đường cong khớp tổng quát.....	190
BÀI TẬP CHƯƠNG 3.....	192
<b>CHƯƠNG 4. GIẢI PHƯƠNG TRÌNH PHI TUYẾN.....</b>	<b>199</b>
4.1. ĐẶT VẤN ĐỀ.....	199
4.2. PHƯƠNG PHÁP CHIA ĐÔI.....	202
4.3. PHƯƠNG PHÁP DÂY CUNG.....	207
4.4. PHƯƠNG PHÁP NEWTON.....	208
4.5. PHƯƠNG PHÁP CẮT TUYẾN.....	215
4.6. PHƯƠNG PHÁP LẬP.....	218
4.7. PHƯƠNG PHÁP BAIRSTOW.....	224
4.8. MỘT SỐ HÀM TRÊN MATLAB ĐỂ GIẢI PHƯƠNG TRÌNH.....	227
4.8.1. Tìm nghiệm của đa thức.....	227
4.8.2. Tìm nghiệm của phương trình phi tuyến.....	230
BÀI TẬP CHƯƠNG 4.....	233

<b>CHƯƠNG 5. TÍNH GẦN ĐÚNG ĐẠO HÀM VÀ TÍCH PHÂN .....</b>	<b>236</b>
5.1. TÍNH GẦN ĐÚNG ĐẠO HÀM .....	236
5.1.1. Tính gần đúng đạo hàm bậc nhất.....	236
5.1.2. Tính gần đúng đạo hàm cấp cao và đạo hàm riêng.....	242
5.1.3. Hàm tính gần đúng đạo hàm trên MATLAB.....	242
5.2. TÍNH GẦN ĐÚNG TÍCH PHÂN .....	245
5.2.1. Đặt vấn đề.....	245
5.2.2. Công thức tích phân Newton–Cotes .....	249
5.2.3. Công thức hình thang (Trapezoidal Rule) .....	250
5.2.4. Công thức Simpson .....	259
5.2.5. Các hàm của MATLAB.....	264
BÀI TẬP CHƯƠNG 5 .....	266
<b>CHƯƠNG 6. BÀI TOÁN GIÁ TRỊ BAN ĐẦU ĐỐI VỚI PHƯƠNG TRÌNH</b>	
<b>VI PHÂN THƯỜNG .....</b>	<b>269</b>
6.0. MỞ ĐẦU.....	269
6.1. PHƯƠNG PHÁP EULER .....	272
6.1.1. Phương pháp Euler thuận .....	272
6.1.2. Phương pháp Euler cải biên.....	280
6.1.3. Phương pháp Euler ngược .....	282
6.2. PHƯƠNG PHÁP RUNGE–KUTTA.....	283
6.2.1. Phương pháp Runge–Kutta bậc 2 .....	284
6.2.2. Phương pháp Runge–Kutta bậc 3 .....	286
6.2.3. Phương pháp Runge–Kutta bậc 4 .....	287
6.2.4. Sai số, sự ổn định.....	291
6.3. CÁC HÀM TRÊN MATLAB.....	292
6.3.1. ODE23 (ODE45) .....	293
6.3.2. ODESET.....	299
6.3.3. Tìm công thức giải tích của nghiệm .....	300
BÀI TẬP CHƯƠNG 6 .....	302
<b>CHƯƠNG 7. CÁC PHƯƠNG PHÁP CỰC TIỂU HÓA KHÔNG RÀNG BƯỚC ..306</b>	
7.1. NHẮC LẠI MỘT SỐ KHÁI NIỆM TỪ GIẢI TÍCH .....	306
7.1.1. Không gian Euclid $n$ –chiều .....	306
7.1.2. Vi phân của hàm nhiều biến .....	308
7.1.3. Bài toán cực trị hàm nhiều biến.....	309
7.2. BÀI TOÁN QUY HOẠCH PHI TUYẾN KHÔNG RÀNG BƯỚC .....	311
7.3. CÁC PHƯƠNG PHÁP CỰC TIỂU MỘT BIẾN .....	313
7.3.1. Hàm đơn cực trị .....	314



7.3.2. Phương pháp Fibonacci .....	316
7.3.3. Phương pháp lát cắt vàng .....	316
7.4. CÁC PHƯƠNG PHÁP SỐ CỰC TIỂU HÓA KHÔNG RÀNG BUỘC.....	317
7.4.1. Mở đầu.....	317
7.4.2. Các phương pháp gradient.....	318
7.4.3. Phương pháp Newton .....	323
7.4.4. Các phương pháp tìm kiếm.....	327
7.5. CÁC HÀM TỐI ƯU HÓA TRÊN MATLAB.....	329
7.5.1. Hàm FMINBND.....	329
7.5.2. Hàm FMINUNC .....	331
7.5.3. Hàm FMINSEARCH.....	333
7.5.4. Hàm OPTIMSET .....	336
7.5.5. Hàm INLINE .....	340
BÀI TẬP CHƯƠNG 7.....	342
<b>CHƯƠNG 8. QUY HOẠCH TUYẾN TÍNH .....</b>	<b>347</b>
8.1. XÂY DỰNG MÔ HÌNH TOÁN HỌC CHO CÁC BÀI TOÁN TỐI ƯU THỰC TẾ.....	347
8.1.1. Xây dựng mô hình toán học cho một vấn đề thực tế .....	347
8.1.2. Một số mô hình thực tế.....	348
8.2. THUẬT TOÁN ĐƠN HÌNH .....	351
8.2.1. Bài toán quy hoạch tuyến tính tổng quát .....	351
8.2.2. Bài toán quy hoạch tuyến tính dạng chính tắc và dạng chuẩn.....	351
8.2.3. Giải bài toán quy hoạch tuyến tính dạng chuẩn trong mặt phẳng.....	354
8.2.4. Một số ký hiệu và định nghĩa.....	356
8.2.5. Phương án cơ sở chấp nhận được .....	357
8.2.6. Công thức số gia hàm mục tiêu. Tiêu chuẩn tối ưu .....	361
8.2.7. Thuật toán đơn hình dạng ma trận nghịch đảo .....	363
8.2.8. Thuật toán đơn hình dạng bảng .....	367
8.2.9. Tính hữu hạn của thuật toán đơn hình .....	371
8.2.10. Thuật toán đơn hình hai pha .....	376
8.2.11. Về hiệu quả của thuật toán đơn hình .....	382
8.3. LÝ THUYẾT ĐỐI NGẪU .....	383
8.3.1. Bài toán đối ngẫu của quy hoạch tuyến tính tổng quát.....	383
8.3.2. Định lý đối ngẫu .....	386
8.4. GIẢI QUY HOẠCH TUYẾN TÍNH TRÊN MATLAB .....	391
BÀI TẬP CHƯƠNG 8.....	395
<b>TÀI LIỆU THAM KHẢO .....</b>	<b>407</b>

# Chương 0

## MỞ ĐẦU

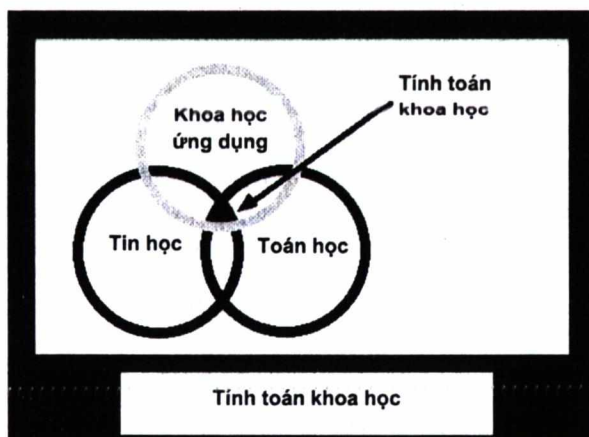
### 0.1. TÍNH TOÁN KHOA HỌC LÀ GÌ?

Tính toán khoa học (Scientific Computing) đã trở thành một lĩnh vực nghiên cứu phổ biến của Toán học ứng dụng chỉ trong vòng vài chục năm gần đây. Vì vậy, có rất nhiều định nghĩa và thuật ngữ xuất hiện trong lĩnh vực có liên quan đến ứng dụng và công cụ sử dụng này. Do lĩnh vực ứng dụng của Tính toán khoa học được mở rộng nhanh chóng và công cụ tính toán ngày càng phát triển nên rất nhiều thuật ngữ cũng nhanh chóng trở nên lỗi thời.

Nói chung, có một điểm chung trong tất cả các định nghĩa, đó là Tính toán khoa học 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.

Có thể nói một cách vắn tắt: Tính toán khoa học là tập hợp tất cả 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.

Hình ảnh dưới đây cho thấy vị trí của tính toán khoa học



Hình 1. Vị trí của tính toán khoa học