Mục lục

I. Đặt vấn đề cho bài toán

Khi xét các bài toán chứa phương trình vi phân đạo hàm riêng, chúng ta thống nhất sử dụng các kí hiệu tương đương sau: $u_t = \frac{\partial u}{\partial t}, u_x = \frac{\partial u}{\partial x}$ để chỉ đạo hàm riêng bậc nhất của hàm số $u(x,t)$ theo biến t biến x tương ứng. Tương tự $u_{tt} = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$, $u_{ttt} = \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}$, … là đạo hàm riêng bậc hai, bậc ba, ... của hàm $u(x,t)$ theo biến t.

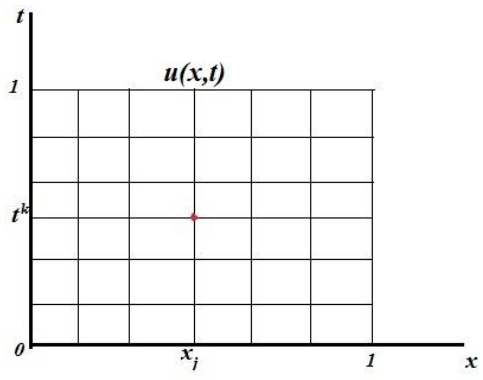
Xét bài toán biên có phương trình $\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = 0$ trong miền $D = \{(x,t): 0 < t \le 1; 0 < x \le 1\}$, với điều kiện đầu $u(0,x) = \varphi(x)$ $(0 \le x \le 1)$ và điều kiện biên $u(t,0) = \psi(t)$ $(0 \le t \le 1)$. Theo ngôn ngữ toán học, bài toán được phát biểu như sau:

$$\begin{cases} u_t + u_x = 0 & (t > 0,\ 0 < x \le 1), \\ u(0,x) = \varphi(x) & (0 \le x \le 1), \\ u(t,0) = \psi(t) & (0 \le t \le 1). \end{cases}$$

hay có thể viết theo dạng toán tử:

$$Lu = f \text{ với } \left[\begin{array}{l} Lu = \begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + \dfrac{\partial u}{\partial x} & t > 0,\ 0 < x \le 1 \\ u(0,x) & 0 \le x \le 1 \\ u(t,0) & 0 \le t \le 1 \end{cases} \\ f = \begin{cases} 0 \\ \varphi(x) & 0 \le x \le 1 \\ \psi(t) & 0 \le t \le 1 \end{cases} \end{array} \right. .$$

Miền tính toán là hình vuông $D = \{(t,x) \,|\, 0 < t \le 1; 0 < x \le 1\}$. Chia miền D thành các ô lưới, với tọa độ các nút lưới là (x_j, t^k) trong đó đoạn $x \in [0;1]$ được chia thành n đoạn, tọa độ các điểm $x_j = jh$, $j = \overline{0,n}$, $h = \dfrac{1}{n}$, h — *bước lưới theo tọa độ không gian*. Đoạn $t \in [0;1]$ chia thành m đoạn, với tọa độ các điểm $t^k = k\tau$, $k = \overline{0,m}$, $\tau = \dfrac{1}{m}$, τ — *bước lưới theo thời gian*. Giá trị hàm $u(x,t)$ tại các nút lưới (x_j, t^k) được kí hiệu là u_j^k với quy ước chỉ số k phía trên là chỉ số theo thời gian t, còn chỉ số j phía dưới là chỉ số theo tọa độ không gian x (xem Hình 1).



Hình 1 — Không gian tính toán

Trong khuôn khổ bài viết này phương pháp sai phân hữu hạn được sử dụng để tìm lời giải cho bài toán đặt ra ở trên.

Để xấp xỉ đạo hàm riêng chúng ta sử dụng một số công thức sai phân như sau:

Công thức sai phân tiến:

$$u_t\left(x_j,t^k\right)=\frac{\partial u}{\partial t}\left(x_j,t^k\right)=\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+O(\tau)$$
$$u_x\left(x_j,t^k\right)=\frac{\partial u}{\partial x}\left(x_j,t^k\right)=\frac{u_{j+1}^k-u_j^k}{h}+O(h)$$

Công thức sai phân lùi:

$$u_t\left(x_j,t^k\right)=\frac{\partial u}{\partial t}\left(x_j,t^k\right)=\frac{u_j^{k}-u_j^{k-1}}{\tau}+O(\tau)$$
$$u_x\left(x_j,t^k\right)=\frac{\partial u}{\partial x}\left(x_j,t^k\right)=\frac{u_{j}^k-u_{j-1}^k}{h}+O(h)$$

Công thức sai phân trung tâm:

$$u_t\left(x_j,t^k\right)=\frac{\partial u}{\partial t}\left(x_j,t^k\right)=\frac{u_j^{k+1}-u_j^{k-1}}{2\tau}+O\left(\tau^2\right)$$
$$u_x\left(x_j,t^k\right)=\frac{\partial u}{\partial x}\left(x_j,t^k\right)=\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}+O\left(h^2\right)$$

Theo trên, đạo hàm riêng bậc nhất được xấp xỉ với độ chính xác bậc nhất đối với sai phân tiến và sai phân lùi, bậc hai đối với sai phân trung tâm.

Ngoài ra, đạo hàm bậc nhất có thể xấp xỉ với độ chính xác bậc hai theo công thức sau[1]:

$$u_x\left(x_j,t^k\right)=\frac{\partial u}{\partial t}\left(x_j,t^k\right)=\frac{3u_j^k-4u_{j-1}^k+u_{j-2}^k}{2h}+O\left(h^2\right)$$

Tiếp theo, chúng ta sẽ nghiên cứu cụ thể hơn về bậc xấp xỉ, tính ổn định và bậc hội tụ của các sơ đồ sai phân.

---

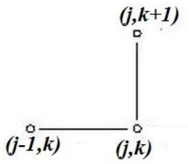
[1] Đây là công thức sai phân sử dụng khuôn một hướng, thường sử dụng để xấp xỉ gradient của các hàm số tại các điểm biên. Đối với các điểm trong của miền tính toán, ta thường có xu hướng sử dụng các công thức sai phân với khuôn đối xứng.

II. Một số sơ đồ sai phân cơ bản

1. Sơ đồ tường minh[2]

• Sơ đồ tường minh góc trái

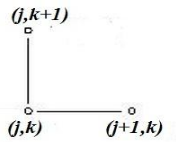
Công thức sai phân cho sơ đồ góc trái:



$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_j^k-u_{j-1}^k}{h}=0 \qquad (1.1)$$

• Sơ đồ tường minh góc phải

Công thức sai phân cho sơ đồ góc phải:

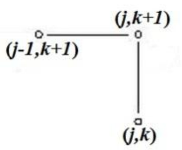


$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_{j+1}^k-u_j^k}{h}=0 \qquad (1.2)$$

2. Sơ đồ không tường minh[3]

• Sơ đồ không tường minh góc trái

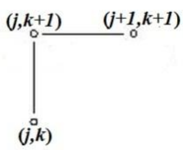
Công thức sai phân cho sơ đồ góc trái:



$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_j^{k+1}-u_{j-1}^{k+1}}{h}=0 \qquad (2.1)$$

• Sơ đồ không tường minh góc phải

Công thức sai phân cho sơ đồ góc phải:



$$\frac{u_j^{k+1}-u_i^k}{\tau}+\frac{u_{j+1}^{k+1}-u_j^{k+1}}{h}=0 \qquad (2.2)$$

---

[2] Đối với sơ đồ tường minh giá trị hàm trên lớp $t+\tau$ được tính thông qua lớp t và trước đó

[3] Khi sử dụng sơ đồ không tường minh, giá trị của hàm tại thời điểm bất kì được tính thông qua giá trị của hàm tại các thời điểm trước cũng như sau thời điểm đang xét. Chú ý rằng, thời điểm đang nói đến ngụ ý là các lớp theo tọa độ thời gian.

3. Bậc xấp xỉ, tính ổn định và hội tụ của sơ đồ sai phân

Ở phần này, chúng ta sẽ xem xét tỉ mỉ hơn các vấn đề liên quan đến bậc xấp xỉ, tính ổn định và bậc hội tụ của các sơ đồ sai phân. Nếu bạn vẫn còn cảm thấy lạ lẫm khi đọc những thuật ngữ này, xin hãy xem bài viết về các khái niệm ban đầu của chúng tôi.

Các vấn đề này sẽ được xem xét một cách cụ thể qua ví dụ sơ đồ sai phân 1.1 đã nói ở trên. Các bạn sẽ hiểu được làm thế nào để đưa ra các giá trị như bậc xấp xỉ, bậc hội tụ hay chứng minh được tính ổn định hoặc không ổn định của một sơ đồ sai phân. Cuối cùng, bạn sẽ được gợi ý thuật toán để kiểm nghiệm các giá trị này nhờ vào số liệu tính toán thực tế trên máy tính. Sau khi hiểu được nguyên lý cơ bản các bước khảo sát một sơ đồ sai phân qua ví dụ cụ thể này, các bạn đã có thể tự mình tìm hiểu tiếp các sơ đồ tiếp theo tùy vào mục đích và sở thích riêng của từng người.

- **Sơ đồ sai phân 1.1**

  - **Bậc xấp xỉ**

Từ công thức sai phân (tiến, lùi) dễ dàng nhận thấy cả bốn sơ đồ trên đều có xấp xỉ bậc một theo τ và theo h.

Chứng minh:

Khai triển Taylor[4] các hàm u_j^{k+1}, u_{j-1}^k tại lân cận điểm $\left(x_j, t^k\right)$ ta được:

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} = \frac{\partial u}{\partial t}\left(x_j, t^k\right) + \frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\left(x_j, t^k + \eta\right),$$

$$\frac{u_j^k - u_{j-1}^k}{h} = \frac{\partial u}{\partial x}\left(x_j, t^k\right) - \frac{h}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\left(x_j + \xi, t^k\right),$$

trong đó: $0 < \eta < \tau,\ 0 < \xi < h$.

[4] Sử dụng công thức phần dư Lagrange cho khai triển Taylor. Ở đây ta cũng giả thiết rằng hàm số đang xét khả vi đến bậc hai

Từ đó suy ra:

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_j^k-u_{j-1}^k}{h}=\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\right)\Bigg|_{(x_j;t^k)}+\frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\left(x_j,t^k+\eta\right)-\frac{h}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\left(x_j+\xi,t^k\right),$$

hay: $\delta f_h=\frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\left(x_j,t^k+\eta\right)-\frac{h}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\left(x_j+\xi,t^k\right).$

Suy ra: $\left\|\delta f_h\right\|\le\frac{1}{2}\left(Cu\sup\left|\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right|+\sup\left|\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|\right)h$ với $Cu=\frac{\tau}{h}$.

Tóm lại: $\left\|\delta f_h\right\|\le ch$ với $c=\frac{1}{2}\left(Cu\sup\left|\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right|+\sup\left|\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|\right)$.

Theo định nghĩa về bậc xấp xỉ, sơ đồ đang xét xấp xỉ đạo hàm riêng bậc nhất đối với h, (hay có thể viết sơ đồ (1.1) có bậc xấp xỉ là một, hoặc sơ đồ (1.1) xấp xỉ bài toán sai phân với độ chính xác bậc một).

➢ **Khảo sát thêm về tính xấp xỉ của sơ đồ 1.1**

Áp dụng khai triển Taylor cho u_j^{k+1}, u_{j-1}^k tại lân cận điểm $\left(x_j,t^k\right)$, ta được:

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}=\frac{\partial u}{\partial t}\left(x_j,t^k\right)+\frac{\tau}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\left(x_j,t^k\right)+\frac{\tau^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\left(x_j,t^k+\eta\right),$$

$$\frac{u_j^k-u_{j-1}^k}{h}=\frac{\partial u}{\partial x}\left(x_j,t^k\right)-\frac{h}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\left(x_j,t^k\right)+\frac{h^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\left(x_j+\xi,t^k\right).$$

Suy ra:

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_j^k-u_{j-1}^k}{h}=\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\right)\Bigg|_{(x_j;t^k)}+\frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\left(x_j,t^k\right)-\frac{h}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\left(x_j,t^k\right)+$$

$$+\frac{\tau^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\left(x_j,t^k+\eta\right)+\frac{h^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial h^3}\left(x_j+\xi,t^k\right)$$

Từ phương trình bài toán suy ra: $\frac{\partial u}{\partial t}=-\frac{\partial u}{\partial x}\Rightarrow\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$. Thay vào phương trình phía trên ta thu được:

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_j^k-u_{j-1}^k}{h}=\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\right)\Bigg|_{(x_j;t^k)}+\frac{h}{2}(Cu-1)\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\left(x_j,t^k\right)+$$
$$+\frac{\tau^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\left(x_j,t^k+\eta\right)+\frac{h^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial h^3}\left(x_j+\xi;t^k\right)$$

với $Cu=\dfrac{\tau}{h}$.

Trường hợp đặc biệt khi $Cu=1$, hoặc $\dfrac{\tau}{h}=1$, ta có:

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_j^k-u_{j-1}^k}{h}=\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\right)\Bigg|_{(x_j;t^k)}+\frac{\tau^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\left(x_j,t^k+\eta\right)+\frac{h^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial h^3}\left(x_j+\xi;t^k\right)$$

hay:

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_j^k-u_{j-1}^k}{h}=\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\right)\Bigg|_{(x_j;t^k)}+O\left(\tau^2+h^2\right).$$

Vậy, sơ đồ (1.1) xấp xỉ bài toán sai phân (toán tử sai phân) với độ chính xác bậc hai[5].

Khi $0<Cu<1$ sơ đồ có bậc xấp xỉ là bậc một.

Tương tự cho các sơ đồ còn lại (các sơ đồ còn lại cũng có bậc xấp xỉ giống sơ đồ (1.1) mà ta vừa khảo sát ở trên).

➢ Khảo sát tính ổn định

Để khảo sát tính ổn định của từng sơ đồ, chúng ta sử dụng phương pháp phổ Fourier. Nghiệm u_j^k được biểu diễn ở dạng $u_j^k=u_0\lambda^k e^{i(j\alpha)}$, với u_0 là một hằng số, λ và α là các số thực bất kì. Thay vào (1.1), ta được :

$$\frac{u_0\lambda^{k+1}e^{i(j\alpha)}-u_0\lambda^k e^{i(j\alpha)}}{\tau}+\frac{u_0\lambda^k e^{i(j\alpha)}-u_0\lambda^k e^{i((j-1)\alpha)}}{h}=0.$$

---

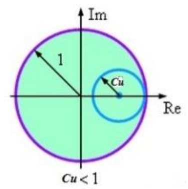
[5] Trên thực tế, khi q=1, sơ đồ này xấp xỉ bài toán đạo hàm riêng với độ chính xác tuyệt đối (không có sai số tính toán). Nếu chúng ta tiếp tục khai triển Taylor, các hạng tử tiếp theo sẽ tự triệt tiêu nhau.

Tuy vậy, đạt được q chính xác bằng 1 trong các bài toán thực tế là không thể nên ta ít khi có thể vận dụng được lợi thế này.

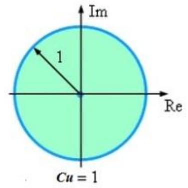
Sau khi giản ước cho $u_0\lambda^k e^{i(j\alpha)}$ sẽ được:

$$\frac{\lambda-1}{\tau}+\frac{1-e^{-i\alpha}}{h}=0 \Rightarrow \lambda=1-\frac{\tau}{h}\left(1-e^{-i\alpha}\right)=1-Cu+Cue^{-i\alpha}.$$

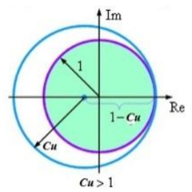
Theo phương pháp Fourier, sơ đồ ổn định nếu $|\lambda|\le 1$. Nếu biểu diễn λ trong tọa độ phức, thì tập hợp các điểm λ thỏa mãn phương trình trên là đường tròn tâm $(1-Cu,0)$, bán kính Cu.



Với $Cu<1$: dễ dàng thấy rằng đường tròn thu được nằm toàn bộ trong đường tròn đơn vị nên $|\lambda|<1$, sơ đồ ổn định.



Với $Cu=1$: đường tròn thu được chính là đường tròn đơn vị nên $|\lambda|=1$, sơ đồ ổn định.



Với $Cu>1$: thì đường tròn thu được nằm phía ngoài đường tròn đơn vị nên trong trường hợp này sơ đồ không ổn định.

Kết luận:

1. Để sơ đồ (1.1) ổn định thì $0<Cu\le 1$, hay $\frac{\tau}{h}\le 1$.

2. Sơ đồ (1.1) hội tụ khi $\frac{\tau}{h}\le 1$. Với $\frac{\tau}{h}>1$, sơ đồ không hội tụ.

- **Tính sai số**

Để tính sai số kết quả thu được của phương pháp chúng ta đưa vào không gian hàm U_h các chuẩn hàm.

Chuẩn hàm thứ nhất xác định như sau (gọi là *chuẩn mô đun cực đại*):

$$\|u_h\| = \sup_{j,k}\left|u_j^k\right| \text{ với } j=0,\ldots,n;\ k=0,\ldots.,m.$$

Khi đó sai số kết quả thu được tính theo công thức:

$$err_\infty=\max_{j,k}\left|[u]_j^k-u_j^k\right|.$$

với $[u]_j^k$ — là giá trị chính xác của hàm u tại các nút lưới (x_j, t^k), còn u_j^k — là giá trị thu được từ tính toán cũng tại nút lưới này.

Chuẩn hàm khác cũng được sử dụng khá phổ biến, được định nghĩa như sau (gọi là *chuẩn trung bình bình phương* (TBBP))[6]:

$$\|u_h\|_{U_h} = \max_k \sqrt{h\sum_j \left|u_j^k\right|^2}, \text{ với } j = 0,\ldots,n;\ k = 0,\ldots.,m.$$

Khi đó công thức tính sai số là:

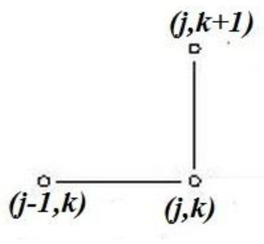
$$err_{L2} = \max_k \sqrt{h\sum_j \left|[u]_j^k - u_j^k\right|^2}.$$

➢ Xây dựng thuật toán và tính toán

Bài toán 1. Xét bài toán cụ thể sau:

$$\begin{cases} u_t + u_x = 0 & (0 < t \le 1,\ 0 < x \le 1) \\ \varphi(x) = \begin{cases} 0 & (0 \le x < 0.45 \& 0.55 < x \le 1) \\ 1 & (0.45 \le x \le 0.55) \end{cases} \\ \psi(t) = 0 & (0 \le t \le 1) \end{cases} \qquad (1)$$

Sử dụng sơ đồ tường minh góc trái 1.1:



$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} + \frac{u_j^k - u_{j-1}^k}{h} = 0,$$

hoặc có thể viết lại thành:

$$u_j^{k+1} = (1 - \frac{\tau}{h})u_j^k + \frac{\tau}{h}u_{j-1}^k. \qquad (2)$$

Để thực hiện tính toán trên máy tính cần xây dựng thuật toán và sử dụng ngôn ngữ lập trình làm công cụ hỗ trợ. Với mục đích học tập, chúng tôi sử dụng ngôn ngữ lập trình chủ yếu là C, C++.

---

[6] Trong các tài liệu tiếng Anh, chuẩn này có tên gọi là RMS Norm hay Root Mean Square. Trong tài liệu tiếng Việt thường được gọi là quân phương, có nghĩa là lấy quân bình bình phương.

Thuật toán:

Bước 1: *Nhập dữ liệu*

Nhập số nút lưới sử dụng cho tính toán n

Nhập giá trị số Courant Cu

Nhập giá trị tổng thời gian tính toán T

Bước 2: *Khởi tạo dữ liệu và gán giá trị đầu, giá trị biên*

Khởi tạo mảng dữ liệu chứa giá trị tính toán tại n nút lưới và một nút lưới chứa giá trị ô lưới ở biên bên trái

Khởi gán giá trị đầu và giá trị biên cho các nút lưới trong miền tính toán và trên biên tại thời điểm đầu với thời gian bằng 0 và tọa độ các nút lưới được tính từ dữ liệu đầu vào sử dụng công thức (1)

Bước 3: *Lặp*

Tính giá trị mỗi bước lặp thời gian

Với mỗi nút lưới trong miền tính toán thực hiện tính toán giá trị của hàm tại thời điểm tiếp theo, sử dụng công thức (2)

Kiểm tra điều kiện lặp, nếu thời gian lớn hơn hoặc bằng tổng thời gian tính toán thì thoát vòng lặp

Bước 4:

Xuất dữ liệu

Tính các sai số theo các chuẩn hàm đã định nghĩa ở trên

Bài toán 2. Xét bài toán với điều kiện biên như sau:

$$\begin{cases} u_t + u_x = 0 & (0 < t \le 1,\ \ 0 < x \le 1) \\ \varphi(x) = \begin{cases} 0 & (0 \le x < 0.45\ \&\ 0.55 < x \le 1) \\ 1 & (0.45 \le x \le 0.55) \end{cases} \\ \psi(t) = \varphi(t - [t]) & (0 \le t \le 1) \end{cases}, \qquad (3)$$

ở đây kí hiệu $[x]$ để chỉ phần nguyên của x.

Thuật toán xây dựng tương tự như bài toán thứ nhất. Ở đây, chúng tôi đề cập sơ qua về điều kiện biên. Vấn đề này sẽ được xem xét cụ thể hơn trong thời gian tới. Trong khuôn khổ bài viết này, các bạn tạm thời chưa cần quan tâm đến vấn đề này.

Ở bài toán thứ nhất, chúng tôi sử dụng điều kiện trên biên là gán giá trị cho hàm bằng 0. Ở bài toán thứ hai, sử dụng lời giải đúng của phương trình vi phân để tính giá trị cho các nút lưới trên biên ứng với tọa độ của nó theo thời gian tính toán. Một phương pháp khác là vận dụng giá trị đã tính được của hàm số trong các ô lưới trong miền tính toán để tính giá trị trên biên nhờ vào tính chất tuần hoàn của nó.

Chương trình tính toán[7]:

Dưới đây là một đoạn code mẫu được viết dựa trên thuật toán đã nêu trên. Code được viết đơn giản sử dụng ngôn ngữ lập trình C++.

```
/*
* Vietnamese Computational Fluid Dynamics
* Version: 2012-18.08
* Copyright © reserved by author
* Programmer:          Nguyen Ngoc Sang
* Email  :  vncfdgroup@gmail.com
* upwindScheme.cpp
*/

#include <iostream>
#include <fstream>
#include <cmath>
#include <iomanip>

double Cu   = 0.;
double h    = 0.;   //space-step
double tau      = 0.;   //time-step
double time = 0.;
double T;                          //total time (s)
int    n, N, M;

void   Initial(double *U);
void   Solver(double *U);
double exactSolver(int i, double _time);
double Error1(double *U, double th[]);
double Error2(double *U, double th[]);
double leftTime();
void   Output(const double *U);

int main(int argc, char** argv)
{
        std::cout<<"\nenter space-step n = ";
        std::cin>>n;
        std::cout<<"\nenter the Courant number Cu = ";
        std::cin>>Cu;
        std::cout<<"\nenter the total time T = ";
        std::cin>>T;
```

[7] Trong các tài liệu chuyên ngành cũng như trong lĩnh vực mô phỏng, chương trình tính toán được gọi là solver

```
		h = 1./n;
		tau = Cu*h;
		M = (int)(T/tau);
		N = n+1;
		double *U = new double[N];
		Initial(U);
		Solver(U);
		Output(U);
		delete[] U;
		return 0;
}

double leftTime()
{
		return T-time;
}

//initialize
void Initial(double *U)
{
		double eps = 1.e-6;
		for(int i=0; i<N; i++)
		{
			if((0.45-eps)<=i*h && i*h<=(0.55+eps))
				U[i] = 1.;
			else
				U[i] = 0.;
		}
}

//exactly solved delta(x-t- ab)
double exactSolver(int i, double _time)
{
		double eps = 1.e-6;
		double fl = i*h - _time ;
		while (fl<0.)
			fl += 1.;
		while (fl>1.)
			fl -= 1.;
		if((0.45-eps)<=fl && fl<=(0.55+eps))
			return 1.;
		return 0.;
}




/*
*		for the first scheme (left corner)
			__|
```

```
*/

void Solver(double *U)
{
	double Ul, Ur;
	while (1)
	{
		if (time>=T)
			break;
		tau = std::min(tau,leftTime());
		Ul = exactSolver(0,time);
		for(int i=1; i<N; i++)
		{
			Ur   = U[i];
			U[i] = U[i] - Cu*(Ur - Ul);
			Ul   = Ur;
		}
		time += tau;
	}
}

//Maximum norm
double Error1(const double *U, const double th[])
{
	double delta, s;
	delta = fabs(U[0]-th[0]);
	for(int i=1; i<N; i++)
	{
		s = fabs(U[i]-th[i]);
		if(delta < s)
			delta = s;
	}
	return delta;
}

//RMS
double Error2(const double *U, const double th[])
{

	double k = 0.;
	for(int i=1; i<N; i ++)
		k += (U[i]-th[i])*(U[i]-th[i]);
	return sqrt(k/n);
}
void Output(const double *U)
{
	double th[N];
	std::ofstream f;
	f.open("data.dat",std::ios::out);
	//f.precision(5);
```

```
        for(int i = 0; i < N; i++)
        {
                th[i] = exactSolver(i,time);

f<<std::scientific<<i*h<<'\t'<<U[i]<<"\t\t"<<th[i]<<std::endl;
        }
        f<<std::endl;

        double delta1, delta2;
        delta1 = Error1(U,th);
        delta2 = Error2(U,th);

        f<<"Maximum Norm Error:  "<<delta1<<std::endl;
        f<<"RMS Error        :   "<<delta2<<std::endl;
        f.close();
}
```

Từ kết quả thu được qua tính toán, ta thu được kết quả trong các bảng dữ liệu dưới đây. Qua phân tích ta sẽ thấy rằng bậc hội tụ lý thuyết của sơ đồ là bậc một, nhưng trên thực tế giá trị này sẽ nhỏ hơn một khá nhiều. Một trong những lý do làm kết quả không được như mong muốn, về sau các bạn sẽ hiểu, là do sự gián đoạn của hàm số sử dụng trong tính toán. Chúng tôi sẽ đề cập cụ thể hơn vấn đề này trong các bài viết sau. Trong khuôn khổ bài viết này, đây chỉ là một vấn đề được nhắc đến như là một điểm nhấn tạo sự chú ý cho bạn đọc chứ không được đào sâu nghiên cứu.

Tổng số nút lưới n	Sai số trong chuẩn trung bình bình phương δ	Bậc hội tụ trong chuẩn trung bình bình phương[8] k
1.00E+02	1.33E-01	
1.00E+03	7.37E-02	0.26
1.00E+04	4.14E-02	0.25

Bảng 1 — Bậc hội tụ của sơ đồ với Cu = 0.1

[8] Bậc hội tụ được tính theo công thức: $k = \log_{\frac{n_2}{n_1}}\left(\frac{\delta_1}{\delta_2}\right)$

Tổng số nút lưới	Sai số trong chuẩn trung bình bình phương	Bậc hội tụ trong chuẩn trung bình bình phương
1.00E+02	1.12E-01	
1.00E+03	6.36E-02	0.25
1.00E+04	3.58E-02	0.25

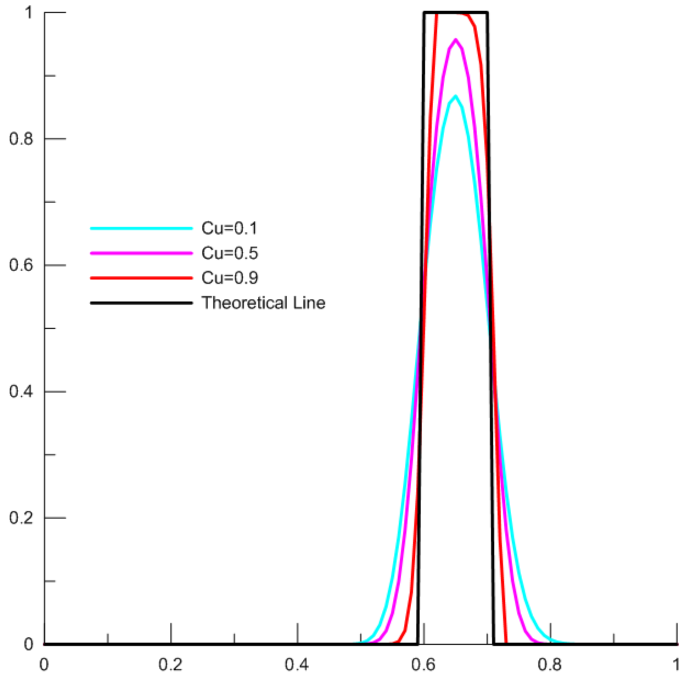
Bảng 2 — Bậc hội tụ của sơ đồ với Cu = 0.5

Tổng số nút lưới	Sai số trong chuẩn trung bình bình phương	Bậc hội tụ trong chuẩn trung bình bình phương
1.00E+02	8.05E-02	
1.00E+03	4.28E-02	0.27
1.00E+04	2.39E-02	0.25

Bảng 3 — Bậc hội tụ của sơ đồ với Cu = 0.9

Với Cu = 1, lời giải tính toán được sẽ có độ chính xác tuyệt đối, tức là sai số góp sẽ bằng không. Nếu vận dụng được ưu thế này (tức là đảm bảo được hệ thức Cu = 1) chúng ta có thể thu được lời giải nhờ tính toán với độ chính xác cao nhất. Tuy vậy, trong các bài toán thực tế, rất khó có thể đạt được điều này. Một trong những lý do đó chính là sự phức tạp của các vấn đề xem xét, đồng thời phương trình mô tả các vấn đề này cũng phức tạp, do vậy mà miền tính toán trở nên không còn đồng nhất nữa, Cu sẽ thay đổi qua các nút lưới trong suốt cả miền tính toán.

Cũng từ phân tích ở trên, chúng ta có thể thấy rằng bậc hội tụ của sơ đồ khi $0 < Cu < 1$ là khoảng 1/4 và không mấy phụ thuộc vào giá trị của Cu. Tuy nhiên, nếu xét về giá trị của sai số chứ không phải là bậc hội tụ ta thấy rằng sai số giảm dần khi Cu tăng dần tới 1, và ngược lại sai số tăng dần khi Cu giảm dần tới 0. Qua Hình 2 chúng ta có thể thấy rõ hơn điều này.



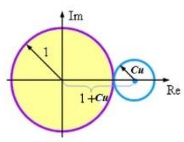
Hình 2 — So sánh lời giải chính xác với lời giải tính toán với các giá trị Cu khác nhau

Với $\frac{\tau}{h} > 1$ sơ đồ không ổn định. Để kiểm chứng khẳng định này chúng tôi thực hiện tính toán với giá trị Cu = $\frac{\tau}{h} = 1.05$. Chỉ sau thời gian 0.15 [s] giá trị tính toán thu được đã chênh lệch lớn với giá trị lý thuyết và không còn khả năng hội tụ về giá trị cần tìm. Các bạn có thể thấy rõ điều này qua Hình 3 dưới đây.

- **Các sơ đồ còn lại**

Đối với sơ đồ (1.2) sau khi giản ước cho $u_0 \lambda^k e^{i(\alpha)}$, ta thu được:

$$\lambda = 1 + \frac{\tau}{h}\left(1 - e^{i\alpha}\right) = 1 + Cu - Cue^{i\alpha} \text{ với } Cu = \frac{\tau}{h} > 0.$$



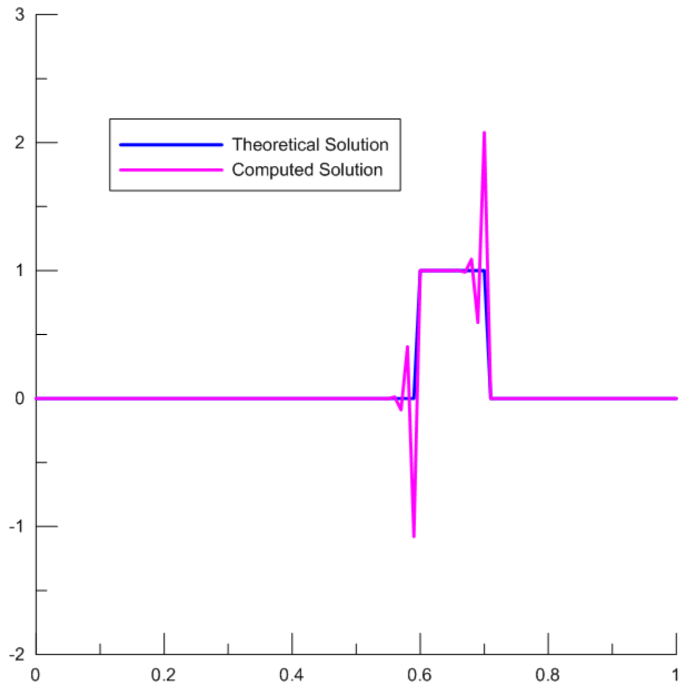
Cũng tương tự như trên, trong tọa độ phức thì λ là tập hợp các điểm nằm trên đường tròn có tâm $(1 + Cu, 0)$, bán kính Cu. Theo hình vẽ thì $|\lambda| > 1$(nằm ngoài đường tròn đơn vị), nên sơ đồ không ổn định.

Kết luận: sơ đồ (1.2) không ổn định với mọi giá trị τ và h.

Sơ đồ này không ổn định, tức là không thỏa mãn điều kiện cần của tính chất hội tụ nên nó không hội tụ.

Tiếp tục khảo sát tính ổn định của sơ đồ không tường minh (2.1) và (2.2). bằng phương pháp Fourier.

Thay $u_j^k = u_0 \lambda^k e^{i(j\alpha)}$ vào (2.1) sau khi giản ước cho $u_0 \lambda^k e^{i(j\alpha)}$ sẽ được:

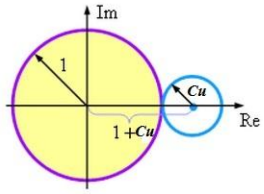


Hình 3 — Lời giải khi Cu = 1.05

$$\frac{\lambda - 1}{\tau} + \frac{\lambda\left(1 - e^{-i\alpha}\right)}{h} = 0 \Rightarrow \lambda = \frac{1}{\left(1 + \frac{\tau}{h}\left(1 - e^{-i\alpha}\right)\right)} = \frac{1}{\left(1 + Cu\left(1 - e^{-i\alpha}\right)\right)},$$

với $Cu = \frac{\tau}{h} > 0$.

Theo phương pháp Fourier, sơ đồ ổn định khi $|\lambda| \le 1$, hay $|1 + Cu\left(1 - e^{-i\alpha}\right)| \ge 1$.



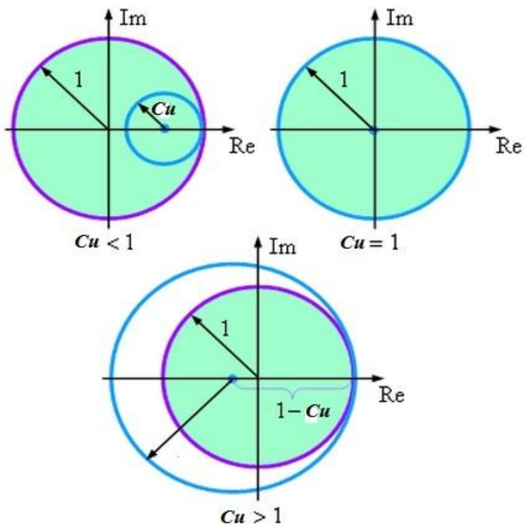
Trong tọa độ phức $1 + Cu - Cue^{-i\alpha}$ là hình tròn tâm $\left(1 + Cu, 0\right)$ bán kính Cu. Dễ dàng nhận thấy $|1 + Cu - Cue^{-i\alpha}| \ge 1$. Nên sơ đồ (2.1) ổn định tuyệt đối.

Kết luận: Sơ đồ (2.1) luôn ổn định với mọi giá trị τ và h.

Tương tự, thay giá trị $u_j^k = u_0 \lambda^k e^{i(j\alpha)}$ vào (2.2), sau khi rút gọn thu được:

$$\lambda = \frac{1}{\left(1 - Cu + Cue^{i\alpha}\right)}, \text{ với } Cu = \frac{\tau}{h} > 0.$$

Để sơ đồ ổn định thì $|\lambda| \leq 1$, suy ra $|1 - Cu + Cue^{i\alpha}| \geq 1$. Xem xét các trường hợp của Cu giống như trong trường hợp khảo sát sơ đồ (1.1).



Chỉ có trường hợp $Cu \geq 1$ là thỏa mãn để hình tròn thu được nằm phía ngoài hình tròn đơn vị, tức khi đó sơ đồ (2.2) ổn định.

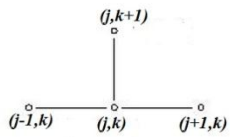
Kết luận: sơ đồ (2.2) ổn định khi $Cu \geq 1$ hay $\frac{\tau}{h} \geq 1$.

III. Sơ đồ bậc cao

Các sơ đồ đã xét ở trên đều xấp xỉ đạo hàm riêng ($\frac{\partial}{\partial x}$) bậc một theo h. Tiếp theo chúng ta xem xét thêm một số sơ đồ sai phân xấp xỉ đạo hàm riêng ($\frac{\partial}{\partial x}$) bậc hai theo h. Một ví dụ cụ thể là sơ đồ sai phân trung tâm bậc hai. Vì sao cần sử dụng sơ đồ bậc cao trong tính toán chúng ta sẽ bàn trong những chủ đề tiếp theo. Trong bài viết này chỉ tìm cách chỉ ra bậc xấp xỉ và xét tính ổn định của chúng mà chưa vội thắc mắc tại sao lại cần sử dụng.

1. Sơ đồ sai phân trung tâm bậc hai dạng tường minh

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}=0 \qquad (3.1)$$



Sơ đồ trên sử dụng sai phân trung tâm theo tọa độ không gian x. Bậc xấp xỉ của sơ đồ là $O(\tau+h^2)$, (có nghĩa là sơ đồ có bậc xấp xỉ là bậc một theo τ và bậc hai theo h) (việc chứng minh thì từ công thức sai phân trung tâm chúng ta có thể rút ra được bậc xấp xỉ của sơ đồ).

Để xét tính ổn định của sơ đồ chúng ta sử dụng phương pháp Fourier, tương tự như trên ta có:

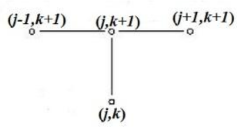
$$\frac{\lambda-1}{\tau}+\frac{e^{i\alpha}-e^{-i\alpha}}{2h}=0\Rightarrow\lambda=1-iCu\sin\alpha \text{ với } Cu=\frac{\tau}{h}, i\sin\alpha=\frac{e^{i\alpha}-e^{-i\alpha}}{2}$$

Suy ra $|\lambda|=\sqrt{1+Cu^2\sin^2\alpha}>1,\forall\alpha$, sơ đồ không ổn định.

Kết luận: Sơ đồ (3.1) không hội tụ.

2. Sơ đồ sai phân trung tâm dạng không tường minh

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_{j+1}^{k+1}-u_{j-1}^{k+1}}{2h}=0 \qquad (3.2)$$



Phương pháp xét bậc xấp xỉ và khảo sát tính ổn định giống như các sơ đồ phía trên, dễ dàng chúng ta có các kết luận sau:

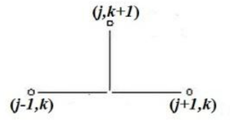
Kết luận:

1. Sơ đồ có bậc xấp xỉ là $O(\tau+h^2)$

2. Sơ đồ ổn định với mọi giá trị $\tau;h$

3. Sơ đồ Lax-Friedrichs

$$\frac{u_j^{k+1}-\frac{1}{2}\left(u_{j+1}^k+u_{j-1}^k\right)}{\tau}+\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}=0 \qquad (3.3)$$



- **Khảo sát bậc xấp xỉ**

Sử dụng khai triển Taylor các hàm tại lân cận điểm $\left(x_j;t^k\right)$

$$u_{j+1}^k=u_j^k+h\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k+\frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k+O\left(h^3\right)$$

$$u_{j-1}^k=u_j^k-h\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k+\frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k+O\left(h^3\right)$$

$$u_j^{k+1}=u_j^k+\tau\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_j^k+\frac{\tau^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_j^k+O\left(\tau^3\right)$$

Thay vào công thức (3.3) thu được:

$$\frac{u_j^{k+1}-\frac{1}{2}\left(u_{j+1}^k+u_{j-1}^k\right)}{\tau}+\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}=\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k+\frac{\tau}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_j^k+\frac{h^2}{2\tau}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k+O\left(h^2\right)$$

$$=\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k+O\left(\tau+\frac{h^2}{\tau}+h^2\right)$$

nếu chọn giá trị $\tau=O(h)$ thì:

$$\frac{u_j^{k+1}-\frac{1}{2}\left(u_{j+1}^k+u_{j-1}^k\right)}{\tau}+\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}=\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k+O\left(\tau+h^2\right)$$

Kết luận: Sơ đồ 3.3 có bậc xấp xỉ là bậc một theo τ và bậc hai theo h.

- **Khảo sát tính ổn định**

Sử dụng phương pháp Fourier. Thay $u_j^k=u_0\lambda^k e^{i(j\alpha)}$ vào phương trình (3.3), sau khi rút gọn nhân tử chung $u_0\lambda^k e^{i(j\alpha)}$ thu được:

$$\frac{\lambda-\frac{1}{2}\left(e^{i\alpha}+e^{-i\alpha}\right)}{\tau}+\frac{\left(e^{i\alpha}-e^{-i\alpha}\right)}{2h}=0\Rightarrow\lambda=\cos\alpha-i\left(\frac{\tau}{h}\right)\sin\alpha$$

hay:

$\lambda=\cos\alpha-iCu\sin\alpha$ với $Cu=\frac{\tau}{h}>0$.

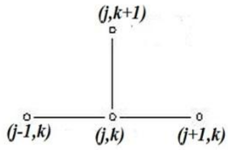
Mô đun $|\lambda|=\sqrt{\cos^2\alpha+Cu^2\sin^2\alpha}$. Sơ đồ ổn định khi $|\lambda|\le 1$, suy ra: $\cos^2\alpha+Cu^2\sin^2\alpha\le 1\Rightarrow Cu^2\le 1\Rightarrow Cu\le 1$.

Kết luận: Sơ đồ Lax-Friedrichs ổn định khi $Cu\le 1$ hay $\frac{\tau}{h}\le 1$.

4. Sơ đồ Lax-Wendroff

Công thức sai phân cho sơ đồ tường minh:

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}-\frac{\tau}{2h^2}\left(u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k\right)=0 \quad (4.1)$$

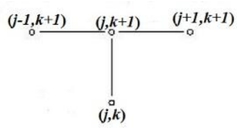


Sơ đồ có bậc xấp xỉ là bậc $O\left(\tau^2+h^2\right)$ (dễ dàng chứng minh được thông qua khai triển Taylor và sử dụng đẳng thức $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$).

Kết luận: Sơ đồ 4.1 ổn định khi $\frac{\tau}{h}\le 1$ (sử dụng phương pháp Fourier để chứng minh).

Đối với sơ đồ không tường minh, công thức sai phân như sau:

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_{j+1}^{k+1}-u_{j-1}^{k+1}}{2h}- -\frac{\tau}{2h^2}\left(u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}\right)=0 \quad (4.2)$$

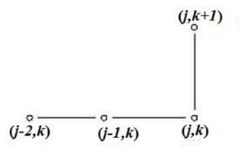


Kết luận: Sơ đồ 4.2 hội tụ bậc hai với mọi giá trị τ và h

Từ ý tưởng vận dụng tính ổn định của sơ đồ góc trái (1.1) và mục đích nâng cao bậc xấp xỉ theo h, ta có thể xây dựng sơ đồ như dưới đây.

5. sơ đồ sai phân góc trái ba điểm

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{3u_j^k-4u_{j-1}^k+u_j^k}{2h}=0 \qquad (5.1)$$



Sơ đồ này có bậc xấp xỉ $O\left(\tau+h^2\right)$.

Để sơ đồ xấp xỉ phương trình sai phân với bậc hai theo τ, ta biến đổi như sau.

Theo khai triển Taylor:

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}=\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_j^k+\frac{\tau}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_j^k+O\left(\tau^2\right) \qquad (5.1.1)$$

Mặt khác từ phương trình bài toán suy ra $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$. Đồng thời dùng công thức sai phân cho đạo hàm riêng bậc hai với ba điểm chúng ta có:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k=\frac{u_j^k-2u_{j-1}^k+u_{j-2}^k}{h^2}+O(h)$$

Nhân cả hai vế phương trình trên cho $\frac{\tau}{2}$ sẽ được:

$$\frac{\tau}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k=\frac{\tau}{2}\frac{u_j^k-2u_{j-1}^k+u_{j-2}^k}{h^2}+O(\tau.h) \qquad (5.1.2)$$

Từ (5.1), (5.1.1) và (5.1.2), ta có:

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{3u_j^k-4u_{j-1}^k+u_j^k}{2h}-$$
$$-\frac{\tau}{2h^2}\left(u_j^k-2u_{j-1}^k+u_{j-2}^k\right)=0$$

Dễ dàng chứng minh được sơ đồ (5.1) có bậc xấp xỉ là bậc hai theo τ và h.

6. Sơ đồ sai phân góc trái bốn điểm

Với ý tưởng như trên chúng ta có thể tăng bậc xấp xỉ của sơ đồ nào đó cho bài toán ban đầu bằng cách tăng số điểm tính toán trong mỗi sơ đồ đó.

Chúng ta sẽ cố gắng tìm sơ đồ có bậc xấp xỉ là bậc ba cho bài toán ban đầu. Đầu tiên ta sẽ tìm công thức sai phân để xấp xỉ đạo hàm riêng với độ chính xác bậc ba. Ở đây chúng ta sử dụng sơ đồ sai phân lùi (vì nó ổn định cho bài toán đang xét) để xấp xỉ đạo hàm riêng với độ chính xác bậc ba, chúng ta cần tới bốn điểm.

Sử dụng khai triển Taylor sẽ có:

$$\left| \begin{array}{l} u_j^k = u_j^k \\ u_{j-1}^k = u_j^k - h\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k - \frac{h^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j^k + O\left(h^4\right) \\ u_{j-2}^k = u_j^k - 2h\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k + \frac{4h^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k - \frac{8h^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j^k + O\left(h^4\right) \\ u_{j-3}^k = u_j^k - 3h\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k + \frac{9h^2}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k - \frac{27h^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j^k + O\left(h^4\right) \end{array} \right. \qquad (6.1)$$

Nhân phương trình đầu với a, thứ hai với b, thứ ba với c và thứ tư với d, sau đó sử dụng đồng nhất thức hệ số cùng chung đạo hàm của u theo x ta sẽ có hệ:

$$\begin{cases} a + b + c + d = 0 & \left(u_j^k\right) \\ b + 4c + 9d = 0 & \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k \\ b + 8c + 27d = 0 & \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j^k \end{cases} \text{ có thể chọn } \begin{cases} a = 11 \\ b = -18 \\ c = 9 \\ d = -2 \end{cases} \text{ suy ra hệ số } \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k = 6$$

Vậy sơ đồ sai phân sẽ có công thức:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k = \frac{11u_j^k - 18u_{j-1}^k + 9u_{j-2}^k - 2u_{j-3}^k}{6h} + O(h^3) \qquad (6.1.1)$$

Đạo hàm riêng được xấp xỉ chính xác tới bậc ba theo h.

Để sơ đồ xấp xỉ bậc ba theo τ, cũng từ khai triển Taylor ta có:

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} = \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_j^k + \frac{\tau}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_j^k + \frac{\tau^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_j^k + O(\tau^3)$$

Thay $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^3 u}{\partial t^3} = -\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$ (thu được từ phương trình ban đầu của bài toán bằng cách đạo hàm theo t và theo x) vào phương trình phía trên sẽ được:

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} = \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_j^k + \frac{\tau}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k - \frac{\tau^2}{6}\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j^k + O(\tau^3) \qquad (6.1.2)$$

Bây giờ chúng ta sẽ xấp xỉ sai phân cho đạo hàm bậc hai và bậc ba theo x của hàm u theo bậc $O(h^2)$ và $O(h)$ tương ứng.

Ứng dụng khai triển Taylor ở (6.1) chúng ta sẽ có hệ phương trình đầu tiên xét cho đạo hàm riêng bậc hai hàm u theo x như sau:

$$\begin{cases} a + b + c + d = 0 & \left(u_j^k\right) \\ b + 2c + 3d = 0 & \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j^k \\ b + 8c + 27d = 0 & \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j^k \end{cases}, \text{ có thể chọn } \begin{cases} a = 2 \\ b = -5 \\ c = 4 \\ d = -1 \end{cases}$$

Vậy thu được sơ đồ sai phân:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k = \frac{2u_j^k - 5u_{j-1}^k + 4u_{j-2}^k - u_{j-3}^k}{h^2} + O(h^2)$$

Tương tự cho đạo hàm riêng bậc ba hàm u theo x:

$$\begin{cases} a+b+c+d=0 \\ b+2c+3d=0 \\ b+4c+9d=0 \end{cases}, \text{ có thể chọn } \begin{cases} a=1 \\ b=-3 \\ c=3 \\ d=-1 \end{cases}$$

Thu được sơ đồ sai phân

$$\left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j^k = \frac{u_j^k - 3u_{j-1}^k + 3u_{j-2}^k - u_{j-3}^k}{h^3} + O(h).$$

Thay các giá trị $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j^k, \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j^k$ thu được ở trên vào (6.1.2) sẽ được:

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} = \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_j^k + \frac{\tau}{2}\frac{2u_j^k - 5u_{j-1}^k + 4u_{j-2}^k - u_{j-3}^k}{h^2} - \frac{\tau^2}{6}\frac{u_j^k - 3u_{j-1}^k + 3u_{j-2}^k - u_{j-3}^k}{h^3} + O\left(h^3\right)$$

Tiếp theo lấy sơ đồ phía trên cộng với sơ đồ (6.1.1) chuyển vế các hạng tử cần thiết chúng ta sẽ thu được sơ đồ sai phân mới có bậc xấp xỉ bằng ba theo h như sau:

$$\begin{aligned} &\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} + \frac{11u_j^k - 18u_{j-1}^k + 9u_{j-2}^k - 2u_{j-3}^k}{6h} - \\ &- \frac{\tau}{2h^2}\left(2u_j^k - 5u_{j-1}^k + 4u_{j-2}^k - u_{j-3}^k\right) + \\ &+ \frac{\tau^2}{6h^3}\left(u_j^k - 3u_{j-1}^k + 3u_{j-2}^k - u_{j-3}^k\right) = 0 \end{aligned} \qquad (6.2)$$