

NGHIÊN CỨU THUẬT TOÁN CHỌN K-LÁNG GIỀNG GẦN VỚI 2 ĐIỀU KIỆN DỪNG CHO PHƯƠNG PHÁP RBF-FD GIẢI PHƯƠNG TRÌNH POISSON TRONG 2D

Đặng Thị Oanh, Nguyễn Văn Tào

Trường Đại học Công nghệ thông tin và Truyền thông Thái Nguyên, Đại học Thái Nguyên
{dtoanh, nvtao}@ictu.edu.vn

TÓM TẮT— Bài toán tính xấp xỉ phương trình đạo hàm riêng xuất hiện nhiều trong khoa học và kỹ thuật. Hiện nay có nhiều phương pháp phổ biến giải bài toán này như: phương pháp Sai phân hữu hạn (FD-Finite Difference), phương pháp Phần tử hữu hạn (FEM-Finite Element Method), phương pháp Phần tử biên (BEM-Boundary Element Method), phương pháp Thể tích hữu hạn (FVM-Finite Volume Method),... Tuy nhiên, các phương pháp này đều cần hỗ trợ bởi một lưới, trong khi chi phí sinh lưới, duy trì lưới và cập nhật lưới là rất lớn. Đặc biệt, trong trường hợp hàm có độ dao động lớn, miền có hình học phức tạp hoặc có số chiều không gian cao. Hơn nữa, trong trường hợp hàm có độ dao động mạnh có thể ảnh hưởng lớn đến độ chính xác tính toán. Trong những năm gần đây, phương pháp không lưới RBF-FD ra đời để khắc phục một số khó khăn của phương pháp lưới trong những trường hợp trên.

Để thực hiện phương pháp xấp xỉ không lưới RBF-FD (Radial Basis Function - Finite Difference), chúng ta cần sử dụng thuật toán chọn tâm hay còn gọi là chọn k-láng giềng gần. Trong bài báo này chúng tôi quan tâm đến việc chọn các láng giềng gần với tâm ζ trong thuật toán chọn tâm. Câu hỏi thường đặt ra là cần chọn bao nhiêu là đủ và mối liên hệ giữa điều kiện khoảng cách với độ phân tán dữ liệu ra sao? Thử nghiệm của chúng tôi cho thấy rằng trong trường hợp dữ liệu phân bố không quá phân cụm thì ta chỉ cần quan tâm đến điều kiện góc đều, vì trong trường hợp này nếu đảm bảo điều kiện về góc thì sẽ đảm bảo về điều kiện khoảng cách, còn trong trường hợp dữ liệu phân bố phân cụm thì cần phải quan tâm đến cả điều kiện khoảng cách và có sự thỏa hiệp giữa điều kiện góc đều và khoảng cách đến tâm đang xét ζ là không quá xa. Điều này chứng tỏ việc bổ sung vào thuật toán chọn tâm điều kiện dừng liên quan đến khoảng cách là cần thiết và thuật toán sau khi bổ sung thêm điều kiện dừng về khoảng cách sẽ sử dụng được trong các trường hợp dữ liệu phân bố phức tạp.

Từ khóa— RBF-FD, PDE, dirichlet, poisson equation, approximation.

I. GIỚI THIỆU

Trong bài báo này chúng tôi xét bài toán điều kiện biên Dirichlet: Tìm $u : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ thỏa mãn

$$\Delta u = f \quad \text{trong } \Omega, \quad u|_{\partial\Omega} = g \quad (1.1)$$

Trong đó, Δ là toán tử Laplace; cho trước miền $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ và các hàm f, g ; hàm f được định nghĩa bên trong miền Ω và hàm g được định nghĩa trên biên $\partial\Omega$ của miền Ω . Để giải số, bài toán (1.1) được rời rạc thành hệ phương trình tuyến tính sau:

$$\sum_{\xi \in \Xi_{\zeta}} w_{\zeta, \xi} \hat{u}_{\xi} = f(\zeta), \quad \zeta \in \Xi_{\text{int}}; \quad u = g(\xi), \quad \xi \in \partial\Xi, \quad (1.2)$$

trong đó:

1. $\Xi \subset \bar{\Omega}$ là tập hợp các tâm rời rạc và phân bố phân tán;
2. $\partial\Xi := \Xi \cap \partial\Omega$ là tập các tâm nằm trên biên;
3. $\Xi_{\text{int}} := \Xi \setminus \partial\Xi$ là tập các tâm nằm trong miền;
4. Ξ_{ζ} là tập hợp bao gồm ζ và một vài tâm lân cận $\xi \in \Xi$ (còn gọi là tập tâm hỗ trợ ζ);
5. $w_{\zeta, \xi} \in \mathbb{R}$ là vectơ trọng số được chọn sao cho $\sum_{\xi \in \Xi_{\zeta}} w_{\zeta, \xi} u(\xi) \approx \Delta u(\zeta)$.
6. \hat{u} là nghiệm xấp xỉ.

Đối với phương pháp RBF-FD, vectơ trọng số được tính toán bởi nội suy RBF với cách tính toán như sau:

Cho $\phi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ là hàm xác định dương [1]. Chẳng hạn, hàm Gaussian $\phi(r) = e^{-\left(\frac{r}{\delta}\right)^2}$, trong đó δ là tham số tỉ lệ. Cho trước tập $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^d$ và hàm $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, nội suy hàm cơ sở bán kính s được biểu diễn như sau:

$$s(x) = \sum_{j=1}^n a_j \Phi(x - x_j), \quad \Phi(x) := \phi(\|x\|_2), \quad (1.3)$$

với điều kiện nội suy:

$$s(x_i) = u(x_i), \quad \text{với } i = 1, 2, \dots, n. \quad (1.4)$$

Từ các công thức (1.3)-(1.4), ta có:

$$\sum_{j=1}^n a_j \Phi(x_i - x_j) = u(x_i), \quad \text{với } i = 1, 2, \dots, n. \quad (1.5)$$

Hệ phương trình tuyến tính (1.5) có thể viết trong dạng ma trận như sau:

$$\Phi_X a = u_{|X}, \quad \Phi_X := \left[\Phi(x_i - x_j) \right]_{i,j=1}^n,$$

trong đó Φ_X là ma trận đối xứng xác định dương. Vì vậy,

$$a = (\Phi_X)^{-1} u_{|X}.$$

Cho D là toán tử vi phân tuyến được tác động vào $u(x)$ trong công thức (1.5). Chúng ta cần tìm xấp xỉ của $Du(x)$ bằng công thức vi phân tuyến tính,

$$Ds(x) = \sum_{j=1}^n a_j D\Phi(x - x_j), \quad (1.6)$$

Cho $X = \{x_i\}_{i=1}^n$ là tập tâm cố định trong không gian \square^d , chúng ta có thể khai triển hệ phương trình (1.6) như sau:

$$\begin{aligned} Ds(x) &= a^T D\Phi(x - \cdot)_{|X} = \left\{ (\Phi_X)^{-1} u_{|X} \right\}^T D\Phi(x - \cdot)_{|X} \\ &= (\Phi_X)^{-1} D\Phi(x - \cdot)_{|X} u_{|X} = \sum_{i=1}^n w_i(x) u(x_i) = \left[w_i(x) u(x_i) \right]_{i=1}^n, \end{aligned} \quad (1.7)$$

trong đó véctơ

$$w(x) = (w_1, w_2, \dots, w_n) = (\Phi_X)^{-1} D\Phi(x - \cdot)_{|X}, \quad (1.8)$$

được gọi là véctơ trọng số và

$$\Phi_{|X} := \left[\phi(\|x_i - x_j\|_2) \right]_{i,j=1}^n. \quad (1.9)$$

Khi đó để tính véctơ trọng số $w(x)$ ta chỉ cần sử dụng toán tử vi phân D là toán tử Laplace Δ là đủ. Hơn nữa, ta cũng cần có tập điểm $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$. Để làm việc này ta cần thuật toán chọn tập điểm phục vụ cho nội suy RBF.

Cụ thể, để tính được véctơ trọng số $w_{\zeta, \xi}$, ta cần sử dụng thuật toán chọn bộ điểm Ξ_{ζ} . Hiện nay có các thuật toán đã được sử dụng trong [2], nhưng trong trường hợp dữ liệu phân bố quá phân tán thì các thuật toán đó gặp khó khăn. Trong [2], chúng tôi đề xuất thuật toán chọn tâm với một điều kiện dừng. Gần đây, trong [4], chúng tôi đề xuất thuật toán chọn tâm với hai điều kiện dừng nhưng để giảm phức tạp, chúng tôi chỉ sử dụng một bộ giá trị tham số cho các loại phân bố dữ liệu, từ đơn giản đến phức tạp. Hơn nữa, thuật toán này còn được dùng cho mục đích làm mịn không lưới. Trong bài báo này chúng tôi chỉ tập trung nghiên cứu kỹ sự ảnh hưởng của các điều kiện dừng liên quan đến khoảng cách trong thuật toán chọn tâm trong [4]. Kết quả cho thấy rằng trong những trường hợp bài toán có hàm dao động ít hay dữ liệu phân bố không quá phân cụm thì kết quả của thuật toán trong [2] xấp xỉ với kết quả kết quả khi dùng thuật toán [4], còn trong trường hợp bài toán có hàm dao động mạnh thì dùng thuật toán [4] sẽ tốt hơn với giá trị tham số liên quan đến khoảng cách phù hợp với độ phân tán. Cụ thể là khi dữ liệu phân bố quá phân cụm thì ta nên sử dụng giá trị tham số khoảng cách lớn hơn.

Bài báo được tổ chức như sau: Phần II, trình bày thuật toán chọn K- Láng giềng gần; Phần III, trình bày lược đồ không lưới RBF-FD giải phương trình Poisson và các kết quả thử nghiệm; Phần cuối cùng dành cho kết luận.

II. THUẬT TOÁN CHỌN K-LÁNG GIỀNG GẦN

Thuật toán [4] được trình bày như sau:

Cho $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$ và $\Xi_{\zeta} = \{\zeta, \zeta_1, \dots, \zeta_n\} \subset \Xi$, trong đó $\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n$ được xếp theo chiều ngược chiều kim đồng hồ đối với ζ .

$$\mu(\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n) := \sum_{i=1}^n \alpha_i^2, \quad \underline{\alpha}(\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n) := \min_{1 \leq i \leq n} \alpha_i, \quad \bar{\alpha}(\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n) := \max_{1 \leq i \leq n} \alpha_i,$$

trong đó, α_i ký hiệu là góc giữa hai tia $\zeta\zeta_i, \zeta\zeta_{i+1}$ theo hướng ngược chiều kim đồng hồ với chu kỳ $\zeta_{n+i} := \zeta_i$.

Thuật toán này sử dụng hai điều kiện dừng:

1. Điều kiện dừng thứ nhất:

$$\|\zeta - \xi\| \geq \frac{c}{2k} \sum_{j=1}^k (\|\zeta_j - \zeta\| + \|\zeta_j - \zeta_{j+1}\|), \quad \text{với } c \geq 1 \text{ và } \xi \in \Xi \setminus \Xi_{\zeta}. \quad (1.10)$$

2. Điều kiện dừng thứ hai:

$$\bar{\alpha}(\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n) \leq v \underline{\alpha}(\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n), \quad v > 1.0 \quad (1.11)$$

• **Thuật toán:**

Input: Ξ .

Output: Ξ_{ζ} .

Parameter: k (Số điểm của $\Xi_{\zeta} \setminus \{\zeta\}$), $v > 1.0$ (ngưỡng góc đều), $c > 1.0$ (ngưỡng khoảng cách) và $m > k$ (số điểm gần ζ nhất được đưa vào xét).

Begin

I. Tìm m điểm trong $\Xi \setminus \{\zeta\}$ mà gần ζ nhất và thỏa mãn $\|\xi_1 - \zeta\| \leq \|\xi_2 - \zeta\| \leq \dots \leq \|\xi_m - \zeta\|$.

Đầu tiên, $\Xi_{\zeta} := \{\zeta, \zeta_1, \dots, \zeta_k\} := \{\zeta, \xi_1, \dots, \xi_k\}$ và $i = k + 1$.

II. While $i \leq m$

1. **If** điều kiện dừng thứ nhất (1.10) được thỏa mãn, **then** STOP và trả về tập Ξ_{ζ} .

2. Tính các góc $\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_{k+1}$ được tạo bởi tập mở rộng $\{\zeta'_1, \zeta'_2, \dots, \zeta'_{k+1}\} = \{\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_k, \xi_i\}$.

Nếu các góc giữa tia $\zeta\xi_i$ và hai tia lân cận của nó đều lớn hơn góc nhỏ nhất

$$\underline{\alpha}' := \underline{\alpha}(\zeta'_1, \zeta'_2, \dots, \zeta'_{k+1}):$$

i. Tìm j sao cho $\alpha'_j = \underline{\alpha}'$. Chọn $p = j$ hoặc $p = j + 1$ phụ thuộc vào $\alpha'_{j-1} < \alpha'_{j+1}$ hay $\alpha'_{j-1} \geq \alpha'_{j+1}$.

ii. **If** $\mu(\{\zeta'_1, \zeta'_2, \dots, \zeta'_{k+1}\} \setminus \{\zeta'_p\}) < \mu(\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_k)$:

a. Update $\Xi_{\zeta} := \{\zeta, \zeta_1, \dots, \zeta_k\} = \{\zeta, \zeta'_1, \dots, \zeta'_{k+1}\} \setminus \{\zeta'_p\}$.

b. **If** $\bar{\alpha}(\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_k) \leq v \underline{\alpha}(\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_k)$, **then** STOP và trả về Ξ_{ζ} .

3. **If** $i = m$:

Tìm m điểm tiếp theo $\xi_{m+1}, \xi_{m+2}, \dots, \xi_{2m}$ thuộc $\Xi \setminus \{\zeta\}$ và gần ζ nhất và được xếp theo khoảng cách tăng dần đến ζ và $m := 2m$.

4. Gán $i := i + 1$.

End.

• **Nhận xét**

- Trong bài báo [4], chúng tôi sử dụng bộ tham số: $k = 6; m = 50; v = 2.5; c = 3$.

- Trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu kỹ sự ảnh hưởng của các tham số v và c đến điều kiện dừng của bài toán trên các miền có hình học khác nhau và hàm có độ dao động khác nhau trong tính xấp xỉ đạo hàm.

III. THỬ NGHIỆM SỐ

A. Phương pháp RBF-FD

Để giải bài toán (1.2), chúng tôi sử dụng lược đồ sau:

1. Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$

(a) Chọn tập Ξ_{ζ} bởi thuật toán chọn tâm phía trên;

(b) Tính tham số tỉ lệ δ thỏa mãn lớn nhất trước khi số điều kiện của ma trận nội suy (1.9) vượt qua 10^{12} [3].

(c) Tính vectơ trọng số như công thức (1.8) với tham số tỉ lệ δ vừa tính trong Bước 1(b):

$$w_{\zeta, \xi} = \left(\Phi_{\Xi_{\zeta}} \right)^{-1} \Delta \Phi(\zeta - \cdot) |_{\Xi_{\zeta}};$$

(d) Thay $w_{\zeta, \xi}$ vừa tính được trong (c) vào hệ phương trình (1.2).

2. Giải hệ phương trình (1.2) để tìm nghiệm xấp xỉ $\hat{u}(\zeta)$, với $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$.

3. Tính sai số trung bình bình phương *rms* (root mean square):

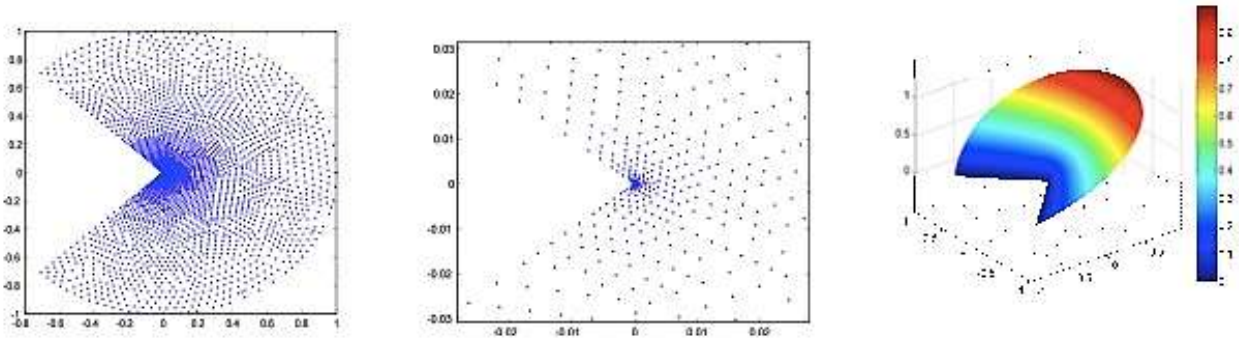
$$rms := \left(\frac{1}{\#\Xi_{\text{int}}} \sum_{\zeta \in \Xi_{\text{int}}} (\hat{u}_{\zeta} - u(\zeta))^2 \right)^{1/2}. \quad (1.12)$$

B. Kết quả thử nghiệm

Chúng tôi sử dụng mã lệnh trong PDE Toolbox của Matlab [6] để tạo ra bộ tâm Ξ và Ξ_{int} . Mã lệnh này dành cho phương pháp FEM thích nghi, nghĩa là tại các vị trí miền có hình học phức tạp hoặc hàm có độ dao động lớn thì số tâm sinh ra nhiều hơn và tỉ lệ thuận với độ dao động của hàm, xem Hình 1 và Hình 3.

Chúng tôi trình bày thử nghiệm trên 2 bài toán tiêu biểu, bài toán thứ nhất là bài toán mẫu của phương pháp phần tử hữu hạn thích nghi (Bài toán 1) và bài toán thứ hai là bài toán khó (Bài toán 2), ở đó hàm có độ dao động rất mạnh trong phạm vi rất hẹp (xem Hình 3 bên phải).

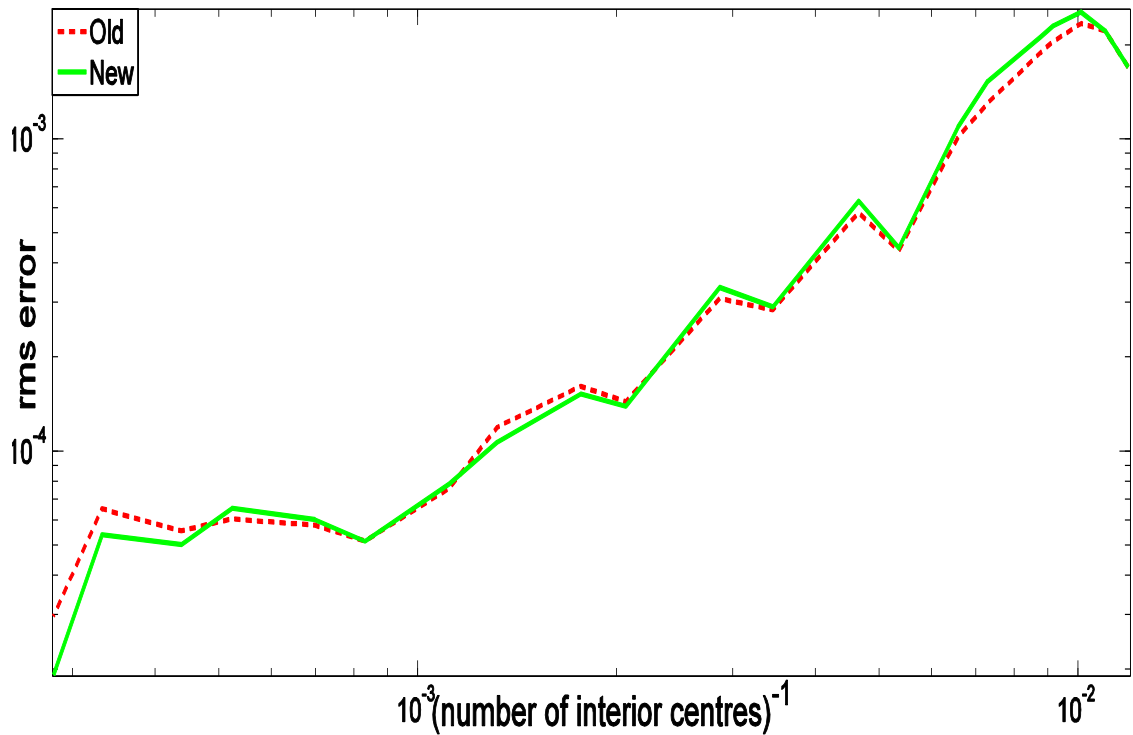
Bài toán 1: Cho phương trình Laplace $\Delta u = 0$ trong miền Ω hình quạt được cho bởi bất phương trình $r < 1, -3\pi/4 < \varphi < 3\pi/4$ trong hệ tọa độ cực, với điều kiện biên Dirichlet cho bởi $u(r, \varphi) = \cos(2\varphi/3)$ trên cung tròn, và $u(r, \varphi) = 0$ dọc theo hai đoạn thẳng. Lời giải chính xác là $u(r, \varphi) = r^{2/3} \cos(2\varphi/3)$.



Hình 1. Biểu diễn bài toán 1. Hình bên trái biểu diễn sự phân bố của 3559 tâm nằm trong miền; Hình giữa biểu diễn sự phân bố tâm tại vị trí hàm có độ dao động lớn nhất; Hình bên phải biểu diễn 3D của nghiệm chính xác

Trong Hình 1 và Hình 2: Hình bên trái biểu diễn các tâm nằm trong miền, hình nằm giữa biểu diễn vùng dữ liệu phân bố dày mà ở đó hàm có độ dao động lớn, hình bên phải biểu diễn 3D của nghiệm chính xác.

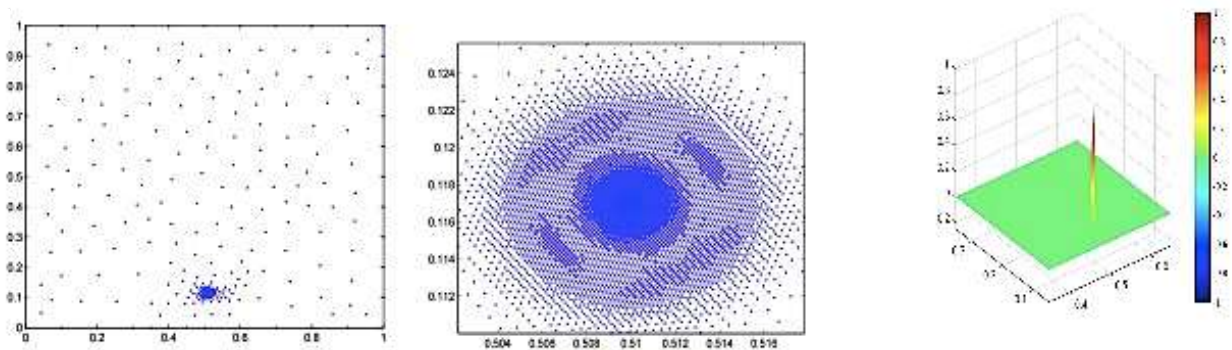
Hình 2 và Hình 4, các đường cong biểu diễn sai số trung bình bình phương (*rms*) được tính theo công thức (1.12), đồ thị là một hàm của sai số *rms* với đối số là nghịch đảo của số nút nằm trong miền. Đường nét đứt biểu diễn sai số *rms* khi sử dụng thuật toán chọn tâm trong [2], đường nét liền biểu diễn sai số *rms* khi sử dụng thuật toán chọn tâm trình bày Phần II. Đường nét đứt và nét liền đều sử dụng bộ tham số $k = 6; m = 100; u = 3$. Riêng đường nét liền dùng thêm giá trị tham số c .



Hình 2. Sai số *rms* của Bài toán 1; Đường nét đứt tương ứng với "Old" biểu diễn kết quả khi sử dụng thuật toán chọn trong [2]; Đường nét liền tương ứng với "New" biểu diễn kết quả khi sử dụng thuật toán chọn ở Phần II với giá trị tham số $c = 2.5$

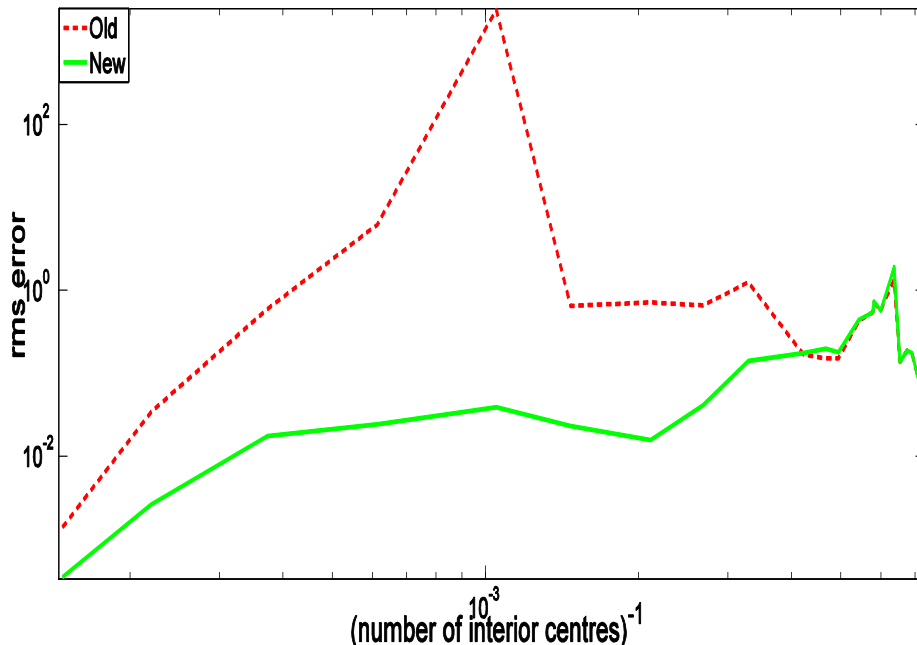
- **Nhận xét 1:** Trong Hình 2, ta thấy rằng 2 đường cong xấp xỉ nhau, điều này có thể giải thích rằng khi các tâm phân bố không quá phức tạp thì thỏa mãn điều kiện góc đều thì cũng thỏa mãn điều kiện về khoảng cách.

Bài toán 2: [5. Section 2.4: Peak] Cho bài toán Dirichlet (1.1) với phương trình Poisson $\Delta u = f$ trong miền $\Omega = (0,1)^2$, trong đó về phải f và điều kiện biên được chọn thỏa mãn lời giải chính xác $u(x) = e^{-\alpha \|x-x_0\|^2}$. Giá trị $\alpha = 100000$ (the strength of the peak) và $x_0 = (0.51, 0.117)$ (vị trí của Peak) (xem Hình 3 bên phải).



Hình 3. Biểu diễn bài toán 2. Hình bên trái biểu diễn sự phân bố 6784 tâm; Hình ở giữa biểu diễn sự phân bố tâm tại vị trí hàm có độ dao động lớn nhất; Hình bên phải biểu diễn 3D của nghiệm chính xác

- **Nhận xét 2:** Quan sát cả 3 hình trong Hình 3, ta thấy rằng có sự thay đổi mật độ các tâm quá đột ngột. Vì vậy có thể giải thích rằng nếu chúng ta cố gắng chọn sao cho các tia $\zeta\xi_i, \xi_i \in \Xi \setminus \{\zeta\}$ phân bố theo các hướng thỏa mãn điều kiện góc đều thì ta sẽ phải kết nạp thêm một điểm có khoảng cách quá xa so với ζ . Điều này cũng giải thích cho lý do tại sao trong Hình 4, đường nét liền đẹp hơn đường nét đứt.



Hình 4. Sai số rms của Bài toán 2; Đường nét đứt tương ứng với "Old" biểu diễn kết quả khi sử dụng thuật toán chọn trong [2]; Đường nét liền tương ứng với "New" biểu diễn kết quả khi sử dụng thuật toán chọn ở Phần II với $c = 4$

IV. KẾT LUẬN

Trong bài báo này chúng tôi trình bày phương pháp xấp xỉ không lưới RBF-FD giải phương trình đạo hàm riêng, thuật toán chọn k- láng giềng gần hỗ trợ phương pháp không lưới RBF-FD, thử nghiệm số trên một bài toán mẫu và một bài toán khó. Kết quả cho thấy:

- Với các bài toán dữ liệu phân bố đơn giản, ta có thể sử dụng thuật toán chọn tâm [2] hoặc sử dụng thuật toán chọn tâm được trình bày ở Phần II phía trên với giá trị tham số c nhỏ.
- Với bài toán khó, ta nên sử dụng thuật toán chọn tâm phía trên với giá trị tham số c lớn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Martin D. Buhmann. "Radial Basis Functions". Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2003.
- [2] Oleg Davydov and Dang Thi Oanh. "Adaptive meshless centres and RBF stencils for Poisson equation". Journal of Computational Physics, 230: 287-304, 2011.
- [3] Oleg Davydov and Dang Thi Oanh. "On the Optimal shape parameter for Gaussian radial basis function finite difference approximation of the Poisson equation". Computers and Mathematics with Applications, 62: 2143-2161, 2011.
- [4] Dang Thi Oanh, Oleg Davydov and Hoang Xuan Phu. "Adaptive RBF-FD Method for Elliptic Problems with Points Singularities in 2D". Submitted.
- [5] William F. Mitchell. "A collection of 2D elliptic problems for testing adaptive grid refinement algorithms". Applied Mathematics and Computation, 220: 350-364, 2013.
- [6] "Partial Differential Equation Toolbox™ User's Guide". The MathWorks, Inc, 2009.

RESEARCH THE K- NEIGHBORHOOD SELECTION WITH TWO TERMINAL CONDITIONS FOR THE RBF-FD APROXIMATION METHOD OF POISSON EQUATION IN 2D

Dang Thi Oanh, Nguyen Van Tao

ABSTRACT—To carry out RBF-FD, we need to use the centres selection algorithm or in other words the k-neighborhood selection. In this paper, we are interested in the selection of the k-neighborhood with the center ζ in the centres selection algorithm. Frequently-raised questions are how many is sufficient to select and what relation between spatial distance and data dispersion? Our experiments have shown that in case data is not dispersed too clustering, we just need to take the equilateral quadrant into consideration as in case of the condition of quadrant is satisfied, the condition of distance will be sufficient; in case data is dispersed clustering, we just need to take the condition of equilateral quadrant into consideration and the negotiation between the condition of equilateral quadrant and the distance to the examined center ζ is not too far. This proves the supplement of terminal condition in space into centres selection algorithm is required and the algorithm after the supplement of terminal condition in space will be applied in case data is complicatedly distributed.