

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC

NGÔ MẠNH TƯỜNG

PHƯƠNG PHÁP KHÔNG LƯỚI THÍCH NGHI RBF-FD
GIẢI SỐ BÀI TOÁN DIRICHLET CHO PHƯƠNG
TRÌNH ELLIPTIC

LUẬN ÁN TIẾN SĨ TOÁN HỌC

THÁI NGUYÊN - 2023

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC

NGÔ MẠNH TƯỜNG

PHƯƠNG PHÁP KHÔNG LƯỚI THÍCH NGHI RBF-FD
GIẢI SỐ BÀI TOÁN DIRICHLET CHO PHƯƠNG
TRÌNH ELLIPTIC

Chuyên ngành: Toán ứng dụng

Mã số: 9 46 01 12

LUẬN ÁN TIẾN SĨ TOÁN HỌC

Tập thể hướng dẫn:

1. GS. TS. Oleg Davydov
2. TS. Đặng Thị Oanh

THÁI NGUYÊN - 2023

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan đây là công trình nghiên cứu của tôi dưới sự hướng dẫn khoa học của GS.TS. Oleg Davydov và TS. Đặng Thị Oanh. Kết quả viết chung với các tác giả khác đã được sự nhất trí của các đồng tác giả trước khi đưa vào luận án. Các kết quả được nêu trong luận án là trung thực và chưa từng được ai công bố trong bất kỳ công trình nào khác.

Thái Nguyên, tháng 4 năm 2023

Tác giả luận án

Ngô Mạnh Tường

LỜI CẢM ƠN

Trong quá trình nghiên cứu và hoàn thành luận án, nghiên cứu sinh đã nhận được sự hướng dẫn, giúp đỡ, đóng góp ý kiến quý báu và những lời động viên của các nhà khoa học, các thầy, cô, đồng nghiệp và gia đình.

Lời đầu tiên, cho phép em được bày tỏ lòng kính trọng và biết ơn sâu sắc nhất tới GS.TS. Oleg Davydov - Khoa Toán - Trường Đại học Giessen - Cộng hòa Liên Bang Đức, TS. Đặng Thị Oanh - Cục Công nghệ thông tin - Bộ Giáo dục và Đào tạo, đã tận tình hướng dẫn, định hướng và giúp đỡ em trong suốt quá trình thực hiện luận án.

Em xin bày tỏ lòng biết ơn chân thành đến GS.TSKH. Hoàng Xuân Phú và các thành viên seminar của phòng Giải tích số và tính toán khoa học - Viện Toán học - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam, đã đóng góp những ý kiến quý báu để em hoàn thành luận án.

Em xin chân thành cảm ơn các thầy, cô trong bộ môn Toán ứng dụng và Tin học, Khoa Toán - Tin, Trường Đại học Khoa học - Đại học Thái Nguyên đã dạy dỗ, động viên và giúp đỡ em rất nhiều trong thời gian là nghiên cứu sinh của Trường.

Tôi xin chân thành cảm ơn đến cơ quan chủ quản - Ban Giám hiệu Trường Đại học Công nghệ thông tin và Truyền thông - Đại học Thái Nguyên, Ban Chủ nhiệm khoa Khoa học cơ bản, Lãnh đạo Phòng Đào tạo và Bộ môn Khoa học tự nhiên, đã tạo mọi điều kiện thuận lợi để tôi hoàn thành nhiệm vụ nghiên cứu.

Cuối cùng Nghiên cứu sinh bày tỏ lời cảm ơn tới các đồng nghiệp, gia đình, bạn bè đã luôn động viên, chia sẻ, ủng hộ và giúp đỡ Nghiên cứu sinh vượt qua khó khăn để đạt được những kết quả nghiên cứu và hoàn thành luận án.

Thái Nguyên, tháng 4 năm 2023

Mục lục

DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU, CÁC CHỮ VIẾT TẮT.....	v
Danh sách bảng.....	vii
Danh sách hình vẽ.....	ix
PHẦN MỞ ĐẦU.....	1
Chương 1 KIẾN THỨC CƠ SỞ.....	11
1.1 Nội suy dữ liệu phân tán.....	11
1.2 Hàm cơ sở bán kính.....	13
1.3 Ma trận xác định dương, hàm xác định dương.....	14
1.3.1 Ma trận xác định dương.....	14
1.3.2 Hàm xác định dương.....	14
1.4 Nội suy hàm cơ sở bán kính.....	17
1.5 Sai số và số điều kiện của nội suy RBF.....	18
1.5.1 Sai số.....	18
1.5.2 Số điều kiện và sự ổn định của nội suy RBF.....	21
1.6 Phương pháp lưới giải phương trình đạo hàm riêng.....	22
1.6.1 Phương pháp sai phân hữu hạn.....	24
1.6.2 Phương pháp phần tử hữu hạn.....	25
1.7 Giải phương trình đạo hàm riêng bằng nội suy RBF.....	27
1.8 Kết luận.....	28
Chương 2 PHƯƠNG PHÁP KHÔNG LƯỚI THÍCH NGHI RBF-FD GIẢI BÀI TOÁN DIRICHLET CHO PHƯƠNG TRÌNH ELLIPTIC.....	29
2.1 Rời rạc bài toán.....	29
2.2 Nội suy RBF tính véc tơ trọng số.....	32
2.2.1 Véc tơ trọng số.....	32
2.2.2 Véc tơ trọng số với thành phần hằng số.....	34
2.2.3 Véc tơ trọng số với thành phần đa thức.....	36
2.3 Một số thuật toán chọn tâm trong không gian 2 chiều.....	40
2.3.1 Một số thuật toán chọn tâm phổ biến.....	40
2.3.2 Các thuật toán chọn tâm cho phương pháp không lưới RBF-FD.....	43

2.4 Một số thuật toán chọn tâm trong không gian 3 chiều	54
2.4.1 Thuật toán k-near	55
2.4.2 Thuật toán dựa trên các tứ diện tet	55
2.4.3 Thuật toán dựa trên các Octant	56
2.4.4 Thuật toán oct-dist.....	60
2.4.5 Thuật toán pQR.....	65
2.5 Thuật toán làm mịn thích nghi không lưới	68
2.5.1 Thuật toán sinh tâm trung điểm D02.....	72
2.5.2 Thuật toán sinh 5 tâm ODP2	74
2.5.3 Thuật toán cải tiến sinh 5 tâm OT2	76
2.6 Kết luận.....	79
Chương 3 THỬ NGHIỆM SỐ	81
3.1 Thử nghiệm số trong không gian 2 chiều	81
3.1.1 Bài toán có miền hình học phức tạp	83
3.1.2 Bài toán nghiệm có kỳ dị hoặc có độ dao động mạnh	93
3.2 Thử nghiệm số trong không gian 3 chiều	108
3.2.1 Bài toán có miền hình học lồi	110
3.2.2 Bài toán thực tế có miền hình học phức tạp	115
3.3 Kết luận	131
KẾT LUẬN	133
CÁC CÔNG TRÌNH KHOA HỌC ĐÃ CÔNG BỐ.....	134
Tài liệu tham khảo.....	136

DANH MỤC CÁC KÝ HIỆU, CÁC CHỮ VIẾT TẮT

MQ	Hàm Multiquadric.
IMQ	Hàm Inverse multiquadric.
Gauss	Hàm Gaussian.
RBF	Hàm cơ sở bán kính (Radial Basis Function).
FD	Phương pháp sai phân hữu hạn (Finite Different).
Ξ	Tập hữu hạn các tâm rời rạc.
Ξ_{int}	Tập hữu hạn các tâm rời rạc trong miền.
$\partial\Xi$	Tập hữu hạn các tâm rời rạc trên biên.
Ξ_{ζ}	Tập giá véctơ trọng số.
$\#\Xi_{\text{int}}$	Số tâm của tập Ξ_{int} .
$\varepsilon(\zeta, \xi)$	Độ lệch của cạnh $\zeta \xi$.
$\bar{\varepsilon}$	Độ lệch lớn nhất.
τ	Ngưỡng độ lệch.
$\text{sep}_{\xi'}(\Xi')$	Khoảng cách tách biệt của tâm ξ' và tập Ξ' .
FEM	Phương pháp phần tử hữu hạn (Finite element method).
RBF-FD	Phương pháp không lưới RBF-FD (Radial Basis Function-Finite Different).
RBF-FD 17	Kết quả của RBF-FD sử dụng các thuật toán ODP1, ODP2.
rms	Sai số trung bình bình phương (root mean square error).
RRMS	Sai số trung bình bình phương tương đối (relative root mean square error).
E_{rc}	Sai số rms trên các tâm thích nghi.
E_{mc}	Sai số rms lớn nhất trên các tâm thích nghi.
E_{rg}	Sai số rms trên lưới đều.
E_{mg}	Sai số rms lớn nhất trên lưới đều.
E_{ref}	Sai số RRMS so với nghiệm tham chiếu.
rms FEM	Sai số rms của phương pháp phần tử hữu hạn.
rms RBF-FD 17	Sai số rms của RBF-FD sử dụng các thuật toán ODP1, ODP2.

rms RBF-FD	Sai số rms của RBF-FD sử dụng các thuật toán OT1, OT2.
max FEM	Sai số lớn nhất của phương pháp phần tử hữu hạn.
max RBF-FD 17	Sai số lớn nhất của RBF-FD sử dụng các thuật toán ODP1, ODP2.
max RBF-FD	Sai số lớn nhất của RBF-FD sử dụng các thuật toán OT1, OT2.
RBF-FD	Kết quả của RBF-FD sử dụng các thuật toán OT1, OT2.
fem1	Kết quả của phương pháp phần tử hữu hạn bậc 1.
fem2	Kết quả của phương pháp phần tử hữu hạn bậc 2.
knear	Kết quả của RBF-FD sử dụng Thuật toán k-near.
tet	Kết quả của RBF-FD sử dụng Thuật toán tet.
Oct	Kết quả của RBF-FD sử dụng Thuật toán 16-Octants.
oct-dist	Kết quả của RBF-FD sử dụng Thuật toán oct-dist.
pQR4sel	Kết quả của RBF-FD sử dụng Thuật toán pQR chọn tâm và tính trọng số bằng nội suy RBF.
pQR3	Kết quả của phương pháp pQR sử dụng Thuật toán pQR bậc 3.
pQR4	Kết quả của phương pháp pQR sử dụng Thuật toán pQR bậc 4.

Danh sách bảng

1.1	Một số hàm bán kính	13
1.2	Một số hàm bán kính với tham số hình dạng $\varepsilon > 0$	13
2.1	Bảng chia 8 Octant	57
2.2	Bảng chia 16 Octant	58
3.1	Giá trị của các tham số sử dụng trong Thuật toán OT2	83
3.2	Kết quả thử nghiệm số của các phương pháp FEM, RBF-FD 17, RBF-FD ứng với các bài toán	106
3.3	Các giá trị α_{Aver} , δ_{aver} , i_{aver} , c_{max} , c_{aver} , k_{aver} , p_1 của RBF-FD 17 và RBF-FD	106
3.4	Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 0.25$ và mật độ ma trận hệ số của Bài toán 7	111
3.5	Sai số E_{ref} của fem2 trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 0.25$ và mật độ ma trận hệ số của Bài toán 7	111
3.6	Sai số E_{ref} trên nút lưới đều và các điểm biên của Bài toán 7	113
3.7	Sai số E_{ref} trên điểm trong miền là điểm Halton và điểm biên là phép chiều vuông góc của Bài toán 7	114
3.8	Thống kê hệ số tỷ lệ khung hình γ_T với 3 cách tạo lưới tứ diện cho fem1 của Bài toán 7	115
3.9	Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện tối ưu của Bài toán 8 với $H_0 = 8.5$	117
3.10	Sai số E_{ref} của fem2 trên đỉnh của các tứ diện tối ưu của Bài toán 8 với $H_0 = 17$	117
3.11	Thống kê hệ số tỷ lệ khung hình γ_T với 2 cách tạo lưới tứ diện cho fem1 của Bài toán 8	117
3.12	Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu của Bài toán 8	117
3.13	Hệ số ổn định σ trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu của Bài toán 8	118

3.14 Sai số E_{ref} trên các điểm trong miền là lưới đều và điểm biên là phép chiếu vuông góc của Bài toán 8	119
3.15 Sai số E_{ref} trên các điểm trong miền là nút lưới đều và điểm biên là đỉnh của các tứ diện tối ưu của Bài toán 8	120
3.16 Sai số E_{ref} trên điểm trong miền là điểm Halton và điểm biên là phép chiếu vuông góc của Bài toán 8	121
3.17 Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện tối ưu của Bài toán 9 với $H_0 = 6.8$	124
3.18 Sai số E_{ref} của fem2 trên đỉnh của các tứ diện tối ưu của Bài toán 9 với $H_0 = 7.1$	124
3.19 Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu của Bài toán 9	124
3.20 Thống kê hệ số tỷ lệ khung hình γ_T với 2 cách tạo tứ diện cho fem1 của Bài toán 9	125
3.21 Sai số E_{ref} trên các điểm trong là nút lưới đều và điểm biên là đỉnh của các tứ diện tối ưu của Bài toán 9	125
3.22 Sai số E_{ref} trên điểm trong miền là điểm Halton và điểm biên là phép chiếu vuông góc của Bài toán 9	125
3.23 Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện tối ưu của Bài toán 10 với $H_0 = 3$	128
3.24 Sai số E_{ref} của fem2 trên đỉnh của các tứ diện tối ưu của Bài toán 10 với $H_0 = 3$	128
3.25 Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu của Bài toán 10	128
3.26 Thống kê hệ số tỷ lệ khung hình γ_T với 2 cách tạo tứ diện cho fem1 của Bài toán 10	129
3.27 Sai số E_{ref} trên các điểm trong là nút lưới đều đỉnh và điểm biên là đỉnh của các tứ diện tối ưu của Bài toán 10	129
3.28 Sai số E_{ref} trên điểm trong miền là điểm Halton và điểm biên là phép chiếu vuông góc của Bài toán 10	129

Danh sách hình vẽ

1.1	Miền rời rạc Ω và các điểm của các tập Ξ , Θ , Ξ_ζ và Θ_ζ	25
1.2	Các tâm rời rạc, tập tâm trùng khớp Θ_ζ , khuôn trọng số 5- điểm Ξ_ζ của phương pháp sai phân hữu hạn.	26
1.3	Rời rạc miền Ω bởi các tam giác và các điểm của các tập Ξ , Θ , Ξ_ζ và Θ_ζ của phương pháp phần tử hữu hạn.	27
2.1	Lưới tam giác thích nghi của Bài toán 1.	41
2.2	Sai số RBF-FD sử dụng các thuật toán 6_{near} , nn , 4_{quad} , LLF, SLS trên các tâm thích nghi của FEM	42
2.3	Cấu trúc Ξ_ζ thu được bởi Thuật toán ODP1. Dấu "*" biểu diễn vị trí của ζ và các hình tròn " \odot " là vị trí của các điểm $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_6$	48
2.4	Các tâm ứng viên ξ_{mid} , ξ_{mid}^+ , ξ_{mid}^- , ξ'_+ , ξ'_- trong lân cận của cạnh được đánh dấu.	71
2.5	Lưu đồ chèn thêm các tâm mới trên mỗi cạnh đánh dấu $\zeta\xi$ của Thuật toán OT2	78
3.1	Các sai số E_{rc} , E_{mc} , E_{rg} , E_{mg} , $\max(\{\mathcal{E}(\zeta, \xi)\})$, τ , mật độ ma trận hệ số và số điều kiện ma trận hệ số của Bài toán 1	84
3.2	Sai số $u - \hat{u}$ ứng với các tâm thích nghi của Bài toán 1	85
3.3	Các sai số E_{rc} , E_{mc} , E_{rg} , E_{mg} của Bài toán 2	86
3.4	Độ lệch lớn nhất $\max(\{\mathcal{E}(\zeta, \xi)\})$ và τ của Bài toán 2	87
3.5	Mật độ và số điều kiện ma trận hệ số của Bài toán 2 ứng với các phương pháp FEM, RBF-FD 17, RBF-FD	88
3.6	Sai số $u - \hat{u}$ ứng với các tâm thích nghi trong Hình 3.7 của Bài toán 2	89
3.7	Các tâm thích nghi ứng với các sai số trong Hình 3.6 của Bài toán 2	90
3.8	Miền Ω với cung cong chia miền, nghiệm chính xác và các sai số E_{rc} , E_{mc} , E_{rg} , E_{mg} của Bài toán 3	91

3.9	Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$, ngưỡng của độ lệch τ , mật độ, số điều kiện ma trận hệ số và sai số $u - \hat{u}$ ứng với các tâm thích nghi của Bài toán 3	92
3.10	Sai số $u - \hat{u}$ ứng với các tâm thích nghi của Bài toán 4	93
3.11	Các sai số $E_{rc}, E_{mc}, E_{rg}, E_{mg}, \max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$, τ , mật độ ma trận hệ số và số điều kiện ma trận hệ số của Bài toán 4	94
3.12	Nghiệm chính xác của Bài toán 4 và Bài toán 5	95
3.13	Các sai số $E_{rc}, E_{mc}, E_{rg}, E_{mg}$ của Bài toán 5	95
3.14	Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$, τ , mật độ và số điều kiện ma trận hệ số của Bài toán 5	96
3.15	Sai số $u - \hat{u}$ ứng với các tâm thích nghi của Bài toán 5(a)	97
3.16	Sai số $u - \hat{u}$ ứng với các tâm thích nghi của Bài toán 5(b)	98
3.17	Nghiệm chính xác của Bài toán 6: (a) Với $\alpha = 1000, x_0 = (0.5, 0.5)$ (trái) và (b) Với $\alpha = 100000, x_0 = (0.51, 0.117)$ (phải).	99
3.18	Các sai số $E_{rc}, E_{mc}, E_{rg}, E_{mg}$ của Bài toán 6	99
3.19	Mật độ, số điều kiện ma trận hệ số, độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$ và τ của Bài toán 6 ứng với các phương pháp FEM, RBF-FD 17, RBF-FD 100	100
3.20	Sai số $u - \hat{u}$ ứng với các tâm thích nghi của Bài toán 6(a)	101
3.21	Sai số $u - \hat{u}$ ứng với các tâm thích nghi của Bài toán 6(b)	102
3.22	Tâm thích nghi tạo bởi các phương pháp RBF-FD, RBF-FD 17, FEM của Bài toán 6(b)	103
3.23	Sai số E_{ref} của Bài toán 7 ứng với kết quả trong các bảng 3.4, 3.5, 3.6, 3.7 và điểm Halton của miền Ω	114
3.24	Miền BracketTwoHoles của Bài toán 8 và tâm rời rạc của được tạo bởi Gmsh	116
3.25	Hình dạng tam giác STL trên biên và 30 điểm ξ gần ζ nhất của các tứ diện không tối ưu của Bài toán 8	119
3.26	Sai số E_{ref} của Bài toán 8 ứng với kết quả trong các bảng 3.9, 3.10, 3.12, 3.15 và 3.16	122

3.27 Miền Ω của Bài toán 9 và tập giá trị số Ξ_ζ	123
3.28 Sai số E_{ref} của Bài toán 9 ứng với kết quả trong các bảng 3.17, 3.18, 3.19, 3.21 và 3.22	126
3.29 Miền Ω của Bài toán 10 và các tâm rời rạc được tạo bởi lưới đều	127
3.30 Sai số E_{ref} của Bài toán 10 ứng với kết quả trong các bảng 3.23, 3.24, 3.25, 3.27 và 3.28	130

PHẦN MỞ ĐẦU

Luận án nghiên cứu phương pháp không lưới thích nghi RBF-FD (Radial Basis Function-Finite Difference) giải số bài toán Dirichlet cho phương trình Elliptic trong không gian 2 chiều và 3 chiều. Bài toán được phát biểu như sau: Cho miền mở $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, (với $d = 2$ hoặc $d = 3$) và các hàm số f xác định trên Ω , g xác định trên $\partial\Omega$. Tìm hàm số $u : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ thỏa mãn

$$\begin{aligned} Du &= f & \text{trong } \Omega, \\ u &= g & \text{trên } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{1}$$

trong đó D là toán tử vi phân tuyến tính Elliptic bậc 2.

Rời rạc hóa Bài toán (1), ta có hệ phương trình tuyến tính với véc tơ $\hat{u} = [\hat{u}_\xi]_{\xi \in \Xi}$:

$$\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} \hat{u}_\xi = f(\zeta), \quad \zeta \in \Xi_{\text{int}}; \quad \hat{u}_\xi = g(\xi), \quad \xi \in \partial\Xi, \tag{2}$$

trong đó

- $\Xi \subset \bar{\Omega}$ là tập các tâm rời rạc;
- \hat{u} là nghiệm xấp xỉ của nghiệm chính xác u của (1) tại các điểm $\xi \in \Xi$;
- $\partial\Xi := \Xi \cap \partial\Omega$ là tập các tâm rời rạc trên biên;
- $\Xi_{\text{int}} := \Xi \setminus \partial\Xi$ là tập các tâm rời rạc nằm trong miền;
- Ξ_ζ là một tập hợp (được gọi là *tập hợp hỗ trợ tính stencil* hay *tập hợp giá véc tơ trọng số* ứng với ζ), trong đó bao gồm tâm ζ và một số tâm $\xi_i \in \Xi$ được lựa chọn nằm tại vị trí lân cận của ζ ;
- $w_{\zeta, \xi} \in \mathbb{R}$ là *các trọng số* hay *stencil* được chọn sao cho $\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} u(\xi)$ là một xấp xỉ của $Du(\zeta)$.

Để giải hệ phương trình (2), ta cần phải giải quyết ba vấn đề chính sau:

- (1) Làm thế nào để sinh ra được tập Ξ ?
- (2) Làm thế nào để chọn được tập hợp Ξ_ζ hỗ trợ tính véc tơ trọng số?
- (3) Làm thế nào để tính các trọng số $w_{\zeta, \xi}$ phù hợp?

Phương pháp số giải phương trình đạo hàm riêng (1) được giới thiệu lần đầu tiên năm 1911 bởi Richardson bằng việc sử dụng phương pháp sai phân hữu hạn (FD-Finite Difference) cổ điển để tính ứng suất của một đập [52]. Ý tưởng của phương pháp sai phân hữu hạn là thay miền của các biến liên tục bằng tập các điểm lưới rời rạc và xấp xỉ phương trình vi phân đạo hàm riêng bởi lược đồ sai phân. Đối với phương pháp RBF-FD cổ điển, Ξ là tập các nút trên lưới đều, tập hợp Ξ_ζ là khuôn sai phân 5 điểm với tâm ζ và 4 điểm $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4 \in \Xi$ và 4 điểm này phân bố đều xung quanh ζ , khi đó các trọng số $w_{\zeta, \xi}$ được xác định một cách dễ dàng. Vì tính toán đơn giản và độ chính xác cao, nên phương pháp sai phân hữu hạn có nhiều lợi thế với các bài toán có miền hình học đẹp như miền hình vuông, miền hình chữ nhật... .

Khi khoa học kỹ thuật và công nghệ ngày càng phát triển, thì các bài toán thực tế cần giải quyết ngày càng nhiều và đa dạng, trong đó phần lớn là các bài toán có miền hình học phức tạp và các bài toán có nghiệm dao động mạnh (khi có sự thay đổi nhỏ của đối số thì kéo theo sự thay đổi lớn của hàm số). Vì vậy, phương pháp số giải phương trình đạo hàm riêng dựa trên lưới đều gặp nhiều khó khăn, nên đã tạo động lực cho sự ra đời của phương pháp phần tử hữu hạn (FEM- finite element method). Phương pháp Phần tử hữu hạn (Finite element method - FEM) được phát triển vào những năm 1940 [13, 35], bằng việc chia miền thành các miền con đơn giản hơn, làm cơ sở cho việc rời rạc và giải một bài toán xấp xỉ có tên gọi bài toán dạng yếu. Phương pháp này được phát triển mạnh vào những năm 1950 trong việc phân tích kết cấu khung máy bay và các công trình xây dựng, nó dễ áp dụng hơn phương pháp sai phân cho các bài toán có miền hình học phức tạp. Một lợi thế khác của FEM là cơ sở toán học vững chắc của nó được chứng minh năm 1973 bởi Strang và Fix [58], Ciarlet và Raviart [12], cùng với các phân tích sai số, ổn định và hội tụ của nghiệm xấp xỉ được phát triển sau này.

Năm 1978 RongHua Li đã giới thiệu *phương pháp sai phân suy rộng* trên lưới không đều [42]. Phương pháp này sử dụng lưới một cách mềm dẻo (lưới tam giác hoặc lưới tứ giác), có sai số nhỏ và chi phí tính toán lớn hơn phương pháp sai phân hữu hạn và nhỏ hơn FEM, trong khi độ chính xác cao hơn phương pháp sai phân hữu hạn và tương đương với FEM.

Bên cạnh sự phát triển của phương pháp FD và FEM còn có phương pháp thể tích hữu hạn (Finite Volume Method -FVM), phương pháp này cũng sử dụng các tùy chọn dựa trên lưới tương tự như FEM và giải bài toán dạng yếu.

Sự phát triển của các phương pháp lưới đã đem lại những đóng góp to lớn trong việc ứng dụng toán học vào thực tiễn. Tuy nhiên, chúng còn nhiều hạn chế khi áp dụng vào lớp các bài toán thực tế có cấu trúc phức tạp như: lưới biến dạng trên phạm vi rộng, số chiều không gian cao, hàm vế phải hoặc hàm điều kiện biên có kì dị (có độ dao động lớn). Khó khăn lớn nhất là sinh lưới, duy trì lưới và cập nhật lưới. Những khó khăn này được Griebel và Schweitzer chỉ ra trong [33], đó là " hơn 70% chi phí trên toàn bộ tính toán là dành cho việc sinh lưới". Đây là một trong những lý do thúc đẩy các nhà khoa học tìm kiếm những phương pháp mới nhằm khắc phục những hạn chế này của các phương pháp lưới.

Để khắc phục một số nhược điểm của phương pháp lưới, các nhà khoa học đã đưa ra phương pháp không lưới giải phương trình đạo hàm riêng, được giới thiệu trong [4, 5, 16, 59, 62]. Một trong các cách tiếp cận không lưới là phương pháp không lưới RBF-FD [16, 59, 62]. Phương pháp này sử dụng nội suy hàm cơ sở bán kính RBF với cách tiếp cận địa phương, dựa trên sự rời rạc hóa giống như phương pháp sai phân hữu hạn, để tính xấp xỉ nghiệm tại một số điểm rời rạc trong miền xác định. Cụ thể, phương pháp RBF-FD được xây dựng theo lược đồ sau: Cho hàm cơ sở bán kính $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, là hàm xác định dương, xác định bởi $\Phi(x) = \varphi(\|x\|_2)$, với $x \in \mathbb{R}^d$ và $\varphi : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$ là một hàm cho trước [7, 61]. Ta sử dụng hàm Φ để xây dựng nội suy hàm cơ sở bán kính RBF. Nội suy hàm cơ sở bán kính RBF được sử dụng để xấp xỉ toán tử vi phân, từ đó tìm nghiệm xấp xỉ của phương trình vi phân đạo hàm riêng. Khi sử dụng phương pháp RBF-FD giải bài toán trong không gian d chiều, với d lớn tùy ý, thay vì phải làm việc với hàm d biến, ta chỉ cần làm việc với hàm một biến. Một lợi thế của kỹ thuật rời rạc không lưới là chỉ cần dựa trên tập điểm độc lập phân bố bất kỳ, không cần tạo ra cấu trúc lưới. Do đó, không còn cần chi phí dành cho sinh lưới, duy trì lưới và cập nhật lưới. Lợi thế của phương pháp không lưới RBF-FD được giới thiệu trong các công bố [26, Section 20.5], [47, 59, 62].

Phương pháp RBF-FD được công bố đầu tiên bởi Tolstykh và Shirobokov, năm 2003 [59] dựa trên cấu trúc của phương pháp sai phân hữu hạn. Năm 2006, Wright và Fornberg đề xuất phương pháp RBF-FD, sử dụng nội suy Hermite [62]. Năm 2011, Oleg Davydov và Đặng Thị Oanh công bố phương pháp RBF-FD dựa trên nội suy đa điểm, thuật toán chọn tâm hỗ trợ phương pháp không lưới, thuật toán làm mịn thích nghi [16] và thuật toán ước lượng tham số hình dạng tối ưu cho nội suy hàm RBF [17].

Những năm gần đây, kỹ thuật làm mịn thích nghi và kỹ thuật chọn tâm cho phương pháp RBF-FD nhận được sự quan tâm của nhiều nhà khoa học [8, 9, 36, 43, 48, 56, 57]. Các công bố [8, 9] đã sử dụng phương pháp toàn cục, phương pháp này yêu cầu giải một hệ phương trình tuyến tính đầy đủ, trong khi phương pháp RBF-FD là phương pháp tiếp cận địa phương nên chỉ yêu cầu giải các hệ phương trình tuyến tính với ma trận hệ số là ma trận thưa [36, 43, 48, 56, 57].

Các kết quả đã đạt được theo hướng nghiên cứu này là:

- Đề xuất một số thuật toán sinh bộ tâm rời rạc thích nghi Ξ hay còn gọi là thuật toán làm mịn thích nghi [8, 9, 16, 36, 43, 48, 56, 57].
- Đề xuất một số thuật toán chọn tập hợp Ξ_ζ hỗ trợ tính stencil hay còn gọi là thuật toán chọn tâm hỗ trợ nội suy để tính stencil [16, 41, 55, 48].
- Phát triển một số cách tính véc tơ trọng số dựa trên ý tưởng của phương pháp FD và FEM [16, 59, 62] và đề xuất thuật toán ước lượng tham số hình dạng tối ưu [17].

Các kết quả nghiên cứu theo phương pháp RBF-FD chủ yếu đang dừng lại trên các bài toán mẫu trong không gian 2 chiều, chưa có chứng minh chặt chẽ về mặt lý thuyết đối với tính xấp xỉ, ổn định và hội tụ của nghiệm xấp xỉ. Đây là công việc khó giải quyết trong tương lai gần. Hơn nữa, với lợi thế của phương pháp RBF-FD cũng cần phát triển trong không gian 3 chiều. Trong luận án này, chúng tôi nghiên cứu kỹ thuật sinh tâm thích nghi và chọn bộ tâm nội suy hỗ trợ tính véc tơ trọng số RBF phù hợp với bộ tâm thích nghi Ξ trong không gian 2 chiều cho các bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm có kỳ dị, hoặc hàm có độ dao động lớn dựa trên ý tưởng của Đặng Thị Oanh, Oleg Davydov và Hoàng Xuân Phú trong [48] và đồng thời phát triển kỹ thuật chọn tâm trong không gian 3 chiều. Cụ thể luận án đã thực hiện được các nội dung sau:

1. Đề xuất thuật toán chọn bộ tâm Ξ_ζ hỗ trợ tính véc tơ trọng số cho phương pháp RBF-FD, sao cho phù hợp với bộ tâm thích nghi Ξ trong không gian 2 chiều.

Đối với phương pháp RBF-FD, để tìm nghiệm xấp xỉ của phương trình đạo hàm riêng (1), ta cần tính được các véc tơ trọng số $w_{\zeta, \xi} \in \mathbb{R}$ trong công thức vi phân số (2). Các véc tơ trọng số này được tìm dựa vào nội suy RBF trên bộ tâm rời

rạc $\Xi_\zeta := \{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\}$, trong đó các tâm $\{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\}$ nằm xung quanh vị trí tâm ζ (hay còn gọi là phương pháp RBF-FD địa phương). Do đó, việc chọn bộ tâm nội suy Ξ_ζ ảnh hưởng lớn đến độ chính xác của nghiệm xấp xỉ. Các thử nghiệm trên bộ tâm thích nghi Ξ được sinh ra bởi Thuật toán 2 trong [16] cho thấy, khi ứng dụng các thuật toán được giới thiệu trong [3, 10, 37, 41, 44, 45, 51, 55, 62] để chọn bộ tâm Ξ_ζ thì thu được nghiệm xấp xỉ có độ chính xác thấp. Ngoài ra, trong [16] các tác giả đã đề xuất thuật toán chọn tâm (Thuật toán 1) cho phương pháp RBF-FD, với một điều kiện dừng dựa trên độ lớn của góc lớn nhất giữa 2 tia liên kế $\zeta\xi_i$ và $\zeta\xi_{i+1}$, trong đó $i = 1, 2, \dots, k$ với $k = 6$, trường hợp $i = k$ thì $\xi_{i+1} \equiv \xi_1$. Việc chọn $k = 6$ nhằm đảm bảo mật độ ma trận hệ số trong (2) không cao hơn mật độ ma trận hệ số (hay được gọi là ma trận cứng) của FEM. Kết quả thử nghiệm cho thấy, nghiệm xấp xỉ của phương pháp RBF-FD có độ chính xác hầu hết cao hơn nghiệm của FEM. Tuy nhiên, thuật toán sử dụng một điều kiện dừng dựa trên tính đều của góc, dẫn đến bộ tâm Ξ_ζ được chọn có thể bỏ qua một điểm nào đó ở gần mà tốt cho nội suy, để lấy một điểm ở xa, dẫn đến không phù hợp cho nội suy. Để khắc phục nhược điểm này, trong [48] các tác giả đã đề xuất thuật toán chọn bộ tâm nội suy với hai điều kiện dừng, ngoài điều kiện dừng về độ lớn của góc, thuật toán có thêm điều kiện dừng về khoảng cách. Thử nghiệm số với các bài toán có miền hình học phức tạp, hoặc bài toán có độ dao động mạnh cho thấy, nghiệm xấp xỉ của phương pháp RBF-FD có độ chính xác cao hơn nghiệm xấp xỉ của phương pháp RBF-FD sử dụng thuật toán chọn tâm trong [16, Thuật toán 1] và cao hơn nghiệm của FEM.

Tuy nhiên, việc chọn giá véc tơ trọng số với số tâm cố định $k = 6$ có thể loại bỏ một số điểm phù hợp hoặc chọn một số điểm không tốt, hơn nữa từ các Hình 1(d, f) trong [48] có thể chọn được bộ tâm Ξ_ζ tốt với $k = 4$ hoặc $k = 5$, thậm chí $k = 7$ hoặc $k = 8$, điều này đã thúc đẩy chúng tôi *đề xuất thuật toán chọn giá véc tơ trọng số có số tâm không cố định và đề xuất một tiêu chí mới để lựa chọn một số điểm phù hợp*. Thử nghiệm số trên các bài toán có miền hình học phức tạp, hoặc bài toán có độ dao động lớn cho thấy, thuật toán chọn bộ tâm nội suy Ξ_ζ mới thường xuyên chọn được 4 tâm xung quanh ζ ($k = 4$), nên mật độ ma trận hệ số nhỏ hơn rất nhiều mật độ ma trận cứng của FEM. Hơn nữa, sai số trung bình bình phương rms (root mean square) của phương pháp RBF-FD khi

sử dụng thuật toán này ổn định và nhỏ hơn sai số rms của phương pháp RBF-FD sử dụng thuật toán chọn tâm trong [48, Thuật toán 1] và cũng nhỏ hơn sai số rms của FEM. Ngoài ra, chi phí tính toán của thuật toán chọn tâm mới cũng nhỏ hơn so với thuật toán chọn tâm trong [48, Thuật toán 1], dựa vào so sánh 2 giá trị là số phần trăm thuật toán dừng lại tại Bước II (chọn được giá véctơ trọng số 4 điểm ($k = 4$)) từ 74% đến 90% và mật độ ma trận hệ số.

2. Phát triển các thuật toán chọn tâm cho phương pháp không lưới RBF-FD trong không gian 3 chiều

Mục đích của các thuật toán chọn tâm này tương tự như trong không gian 2 chiều, nghĩa là bộ tâm được chọn sử dụng để tính véctơ trọng số trong không gian 3 chiều. Tuy nhiên, với các thuật toán chọn tâm đã công bố trong không gian 2 chiều [16, 48, Thuật toán 1], khi phát triển sang không gian 3 chiều thì các điều kiện về góc không còn phù hợp. Vì vậy, chúng tôi đã tiến hành thực hiện các thử nghiệm số cho phương pháp RBF-FD trong không gian 3 chiều trên tập các tâm của FEM, đồng thời sử dụng một số thuật toán chọn tâm đơn giản và tự nhiên, cụ thể là chọn tập các tâm là *k*-điểm gần nhất. Kết quả thử nghiệm cho thấy rằng với bài toán có miền hình học là khối lập phương hoặc khối hình cầu (miền lồi), khi chọn giá véctơ trọng số là $k = 14$ điểm gần nhất hoặc $k = 16$ điểm gần nhất thì sai số rms của phương pháp RBF-FD xấp xỉ hoặc nhỏ hơn sai số của FEM với mật độ ma trận hệ số của RBF-FD xấp xỉ bằng 16 và mật độ ma trận cứng của FEM xấp xỉ bằng 15, còn khi chọn với $k = 20$ thì sai số này tốt hơn đáng kể nhưng mật độ ma trận hệ số của nó xấp xỉ 20, trong khi mật độ ma trận cứng của FEM xấp xỉ 15. Trong trường hợp, bài toán có miền hình học phức tạp (miền không lồi) như trong [18], cho thấy sai số rms của phương pháp RBF-FD cao hơn đáng kể so với FEM, trong cả trường hợp $k = 20$. Ngoài thuật toán *k*-điểm gần nhất, trong [18] chúng tôi còn thử nghiệm phương pháp RBF-FD với sự hỗ trợ của thuật toán chọn tâm, với các tâm là đỉnh của các tứ diện có chung 1 đỉnh, mà đỉnh đó là tâm cần tính trọng số bằng nội suy RBF. Kết quả thử nghiệm cho thấy sai số rms của phương pháp RBF-FD xấp xỉ sai số của FEM trên miền khối hình lập phương, với số tâm trong miền nhỏ hơn 20000 và tốt hơn của FEM trên miền hình cầu với số tâm trong miền nhỏ hơn 10000. Trong trường hợp, số tâm trong miền lớn hơn 10000 với bài toán có miền hình học là khối cầu hoặc lớn hơn 20000 với bài toán có miền hình học là khối lập

phương, thì sai số rms của phương pháp RBF-FD không ổn định. Tuy nhiên, với bài toán có miền hình học phức tạp, thì sai số rms của phương pháp RBF-FD không ổn định với số tâm trong miền nhỏ hơn 4000, nhưng khi số tâm tăng lên thì sai số rms của phương pháp RBF-FD xấp xỉ của FEM và mật độ ma trận hệ số của nó luôn bằng mật độ ma trận cứng của FEM, trong tất cả các bài toán. Từ các kết quả thử nghiệm số này đã thúc đẩy chúng tôi xây dựng các thuật toán chọn cho phương pháp RBF-FD trong không gian 3 chiều dựa trên các Octant.

Trong [18] chúng tôi giới thiệu 2 thuật toán chọn tâm dựa trên các Octant, đó là thuật toán 8-Octants và thuật toán 16-Octants. Với thuật toán 8-Octants, chúng tôi chọn 2 điểm gần nhất trên mỗi Octant, còn thuật toán 16-Octants chúng tôi chọn 1 điểm gần nhất trên mỗi Octant. Kết quả thử nghiệm số trên bộ tâm của FEM, cho thấy sai số rms của phương pháp RBF-FD khi sử dụng thuật toán 8-Octants và thuật toán 16-Octants đều nhỏ hơn đáng kể sai số của FEM trên các bài toán có miền hình học là miền lồi. Tuy nhiên, với bài toán có miền hình học phức tạp thì sai số rms của phương pháp RBF-FD xấp xỉ sai số của FEM và mật độ ma trận hệ số của phương pháp RBF-FD cao hơn một chút so với mật độ ma trận cứng của FEM.

Một thuật toán chọn tâm được coi là thành công trong không gian 3 chiều nếu: (a) chọn được tập giá véctơ trọng số gồm k điểm với k nhỏ hơn hoặc bằng 20 trên miền rời rạc được tạo ra với chi phí rẻ và không cần kỹ thuật cải thiện để các điểm rời rạc có độ đều cao như trong [2], và (b) có độ chính xác xấp xỉ FEM. Các thuật toán chọn dựa trên các Octant trong [18] đã thành công theo nghĩa này trên miền rời rạc có các điểm là đỉnh của các tam giác được tạo bởi PDE Toolbox trong MATLAB. Tuy nhiên, các điểm của miền rời rạc này là các điểm lưới của FEM, nên không thể hiện đầy đủ các ưu điểm của phương pháp không lưới. Trong các thử nghiệm số của chúng tôi, khi các điểm rời rạc miền được tạo bởi các cách khác thì các thuật toán chọn tâm dựa trên các Octant trong [18] thường không thành công. Điều đó đã thúc đẩy chúng tôi xây dựng thuật toán cải tiến của phương pháp RBF-FD dựa trên các Octant này. Thử nghiệm số cho thấy thuật toán cải tiến hoạt động tốt trên miền rời rạc được tạo bởi các tam giác Delaunay không tối ưu hoặc miền rời rạc là kết hợp các nút lưới Descartes hoặc điểm Halton bên trong miền 3D với một số tùy chỉnh chọn các điểm trên biên.

3. Cải tiến thuật toán sinh tâm thích nghi cho phương pháp không lưới RBF-FD trong không gian 2 chiều từ các thuật toán sinh tâm thích nghi được đề xuất trong [16, 48, Thuật toán 2]

Thuật toán sinh tâm thích nghi đầu tiên cho phương pháp không lưới RBF-FD được đề xuất trong [16, Thuật toán 2]. Mục đích của các thuật toán này là sinh ra được bộ dữ liệu thật sự “phân tán”, theo nghĩa dữ liệu được sinh ra giống với dữ liệu có được nhờ đo đạc của một bài toán thực tế. Đây là thuật toán sinh 1 tâm và sử dụng cách tính độ lệch là hiệu của 2 nghiệm xấp xỉ trên miền địa phương. Các thử nghiệm số của chúng tôi cho thấy, sai số rms của phương pháp RBF-FD sử dụng thuật toán sinh tâm thích nghi này kết hợp với thuật toán chọn trong [16, Thuật toán 1] trên các tâm thích nghi RBF-FD, có thể đối sánh với sai số của FEM trên lưới thích nghi. Tuy nhiên, với bài toán có miền hình học phức tạp hoặc hàm vế phải có độ dao động mạnh như các thử nghiệm số trong [48], thì cách tính độ lệch này làm cho nghiệm xấp xỉ của phương trình đạo hàm riêng lớn, dẫn đến việc chèn tâm không chính xác, làm cho sai số rms của phương pháp RBF-FD trên các tâm thích nghi cao hơn sai số của FEM trên lưới thích nghi, điều này là động lực cho các tác giả cải tiến thuật toán sinh tâm thích nghi được giới thiệu trong [48, Thuật toán 2], đó là thuật toán sinh 5 tâm. Trong [57] các tác giả cũng giới thiệu kỹ thuật sinh tâm thích nghi cho phương pháp RBF-FD giải phương trình Poisson và thu được kết quả có thể so sánh với kết quả trong [48] với một bài toán thử nghiệm số. Tuy nhiên, các tác giả sử dụng cách tính độ lệch khác và tham số sử dụng trong Bài toán 5 của các tác giả là $\alpha = \frac{1}{5\pi}$, trong khi các tham số này trong [48] là $\alpha = \frac{1}{10\pi}$ và $\alpha = \frac{1}{50\pi}$.

Thuật toán sinh 5 tâm thích nghi được giới thiệu trong [48, Thuật toán 2] đã sử dụng cách tính độ lệch của Zienkiewicz và Zhu [64]. Kết quả thử nghiệm số cho thấy sai số rms của phương pháp RBF-FD sử dụng kết hợp thuật toán sinh 5 tâm thích nghi với thuật toán chọn 2 điều kiện dừng trong [48, Thuật toán 1] trên tâm thích nghi nhỏ hơn sai số của phương pháp RBF-FD sử dụng thuật toán sinh tâm 1 điểm kết hợp với thuật toán chọn 1 điều kiện dừng trong [16, Thuật toán 1] và nhỏ hơn sai số của FEM trên lưới thích nghi.

Đối với một thuật toán sinh tâm thích nghi, có bốn công đoạn chính ảnh hưởng đến kết quả sinh tâm là: Cách tính độ lệch, ngưỡng của độ lệch, khoảng cách tách biệt địa phương và cấu trúc của các tâm ứng viên. Phương pháp tính độ lệch

tốt đóng một vai trò rất quan trọng trong quá trình sinh tâm thích nghi, như trong [48, Thuật toán 2] đã sử dụng cách tính tốt với chi phí tính toán chỉ là tuyến tính và đã chứng minh tính hiệu quả bằng các thử nghiệm số, đặc biệt nghiệm xấp xỉ phương pháp RBF-FD có độ chính xác tốt với cả bài toán có hàm dao động mạnh như Bài toán 6, Chương 3, với tham số $\alpha = 100000$. Trong thuật toán sinh tâm thích nghi cải tiến chúng tôi tiếp tục sử dụng cách tính độ lệch này. Ngưỡng độ lệch xác định các cạnh có chèn thêm tâm mới hay không, trong thuật toán sinh tâm thích nghi cải tiến chúng tôi giới thiệu một chiến lược xác định ngưỡng độ lệch dựa trên sự dao động của bài toán. Chiến lược này tránh được việc giảm ngưỡng nhanh có thể dẫn đến việc chèn các tâm tại vị trí không cần thiết. Với bài toán có nghiệm dao động mạnh, nên ưu tiên cho mật độ của các tâm hơn là sự phân bố đều. Do đó, thuật toán sinh tâm thích nghi cải tiến có bước điều chỉnh giảm tham số hệ số khoảng cách tách biệt địa phương để các tâm ứng viên được chèn vào nhiều hơn. Các thử nghiệm số cho thấy, phương pháp RBF-FD sử dụng thuật toán sinh tâm thích nghi cải tiến và thuật toán chọn tâm mới đề xuất, rất hiệu quả trên các bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm có kỳ dị, hoặc có độ dao động mạnh, sai số rms của phương pháp RBF-FD ổn định, nhỏ hơn sai số rms của FEM và của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán trong [48, Thuật toán 1, 2]. Hơn nữa, số vòng lặp chèn thêm tâm mới của thuật toán mới nhỏ hơn rất nhiều của FEM và của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán trong [48, Thuật toán 1, 2] với cùng số tâm của miền rời rạc.

4. Đề xuất các thử nghiệm số trong không gian 3 chiều, đối sánh nghiệm của phương pháp không lưới RBF-FD khi sử dụng các thuật toán chọn tâm với nghiệm của FEM

Để đánh giá hiệu quả của phương pháp không lưới RBF-FD, chúng tôi tạo các điểm rời rạc trong miền hình học của bài toán thử nghiệm bởi các phương pháp khác nhau như: Các điểm là đỉnh của các tứ diện được tạo bởi PDE Toolbox trong MATLAB, các đỉnh của tứ diện không tối ưu tạo bởi Gmsh [30], các nút lưới đều Descartes và điểm bán ngẫu nhiên Halton. Kết quả thử nghiệm cho thấy phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán chọn tâm được chúng tôi đề xuất, cho kết quả tốt trên các tâm rời rạc, được tạo bởi các kỹ thuật khác nhau và có thể đối sánh với kết quả của FEM.

Ngoài Phần mở đầu, Kết luận và Tài liệu tham khảo, nội dung chính của luận án được trình bày trong 3 chương.

Trong Chương 1, chúng tôi trình bày một số kiến thức chuẩn bị cho việc trình bày các kết quả chính trong các chương tiếp theo, như: nội suy dữ liệu phân tán, hàm cơ sở bán kính, ma trận xác định dương, hàm xác định dương, nội suy hàm cơ sở bán kính, sai số và số điều kiện của nội suy hàm cơ sở bán kính, đồng thời giới thiệu một số phương pháp lưới và phương pháp không lưới trùng khớp toàn miền, giải số phương trình đạo hàm riêng.

Trong Chương 2, chúng tôi trình bày cách rời rạc bài toán bằng phương pháp sai phân hữu hạn, giới thiệu một số cách tính véc tơ trọng số, nghiên cứu các thuật toán *chọn tâm* và thuật toán sinh *tâm thích nghi*, trong đó đề xuất các thuật toán *chọn giá véc tơ trọng số* và thuật toán sinh *tâm thích nghi* cho phương pháp không lưới RBF-FD trong không gian 2 chiều và phát triển trong không gian 3 chiều.

Cuối cùng trong Chương 3, chúng tôi trình bày chi tiết kết quả thử nghiệm số, đánh giá hiệu quả của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán được đề xuất, đối sánh với kết quả của FEM và kết quả của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật trước đó trong không gian 2 chiều và 3 chiều.

Chương 1

KIẾN THỨC CƠ SỞ

Trong chương này chúng tôi sẽ trình bày một số kiến thức chuẩn bị cho việc trình bày các kết quả chính trong Chương 2 và Chương 3. Các khái niệm về nội suy dữ liệu phân tán, hàm xác định dương, hàm cơ sở bán kính, nội suy hàm cơ sở bán kính, sai số và số điều kiện của ma trận nội suy hàm cơ sở bán kính, được tham khảo trong các tài liệu [7, 24, 61].

1.1 Nội suy dữ liệu phân tán

Cho bộ dữ liệu $(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, n, x_i \in \mathbb{R}^d, y_i \in \mathbb{R}$, trong đó x_i là điểm lấy mẫu, y_i là các kết quả ứng với các điểm lấy mẫu. Giả sử các điểm lấy mẫu không nằm trên lưới đều hoặc lưới chính quy, tức là phân bố không đều hay *dữ liệu phân tán*. Cho u_1, u_2, \dots, u_n là các hàm cơ sở của không gian tuyến tính các hàm d biến liên tục

$$U = \text{span} \{u_1, u_2, \dots, u_n\} = \left\{ \sum_{k=1}^n c_k u_k, c_k \in \mathbb{R} \right\}.$$

Bài toán *nội suy dữ liệu phân tán* trong \mathbb{R}^d là: Tìm hàm số liên tục $F \in U$ thỏa mãn

$$F(x_i) = y_i, i = 1, 2, \dots, n. \quad (1.1)$$

Do $F \in U$ nên

$$F(x) = \sum_{k=1}^n c_k u_k(x), x \in \mathbb{R}^d. \quad (1.2)$$

Từ (1.1) và (1.2) suy ra

$$Ac = y, \quad (1.3)$$

trong đó

$$A = \begin{pmatrix} u_1(x_1) & \cdots & u_n(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_1(x_n) & \cdots & u_n(x_n) \end{pmatrix}, \quad (1.4)$$

$$c = [c_1, \dots, c_n]^T, \quad y = [y_1, \dots, y_n]^T.$$

Phương trình (1.3) có nghiệm duy nhất khi $\det(A) \neq 0$. Câu hỏi đặt ra là chọn cơ sở $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ như thế nào để điều kiện trên được thỏa mãn? Trong trường hợp $d = 1$ thì ta có thể chọn cơ sở là

$$\{u_1, u_2, \dots, u_n\} = \{1, x, x^2, \dots, x^{n-1}\}.$$

Với cơ sở $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$, nếu Bài toán nội suy (1.1) tạo ra ma trận nội suy A xác định dương thì hệ (1.3) có nghiệm duy nhất.

Định nghĩa 1.1.1 (Không gian Haar, xem [61], Định nghĩa 2.1, tr. 18). *Giả sử $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ chứa ít nhất n điểm và $V \subset C(\Omega)$ là không gian tuyến tính n chiều. Ta nói V là không gian Haar n chiều trên Ω nếu với bất kỳ các điểm phân biệt $x_1, x_2, \dots, x_n \in \Omega$ và $f_1, f_2, \dots, f_n \in \mathbb{R}$, thì tồn tại duy nhất hàm $s \in V$ sao cho $s(x_i) = f_i$, $i = 1, 2, \dots, n$.*

Định lý 1.1.1 (Xem [61], Định lý 2.2, tr. 18). *Giả sử $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ chứa ít nhất n điểm. Khi đó V là không gian Haar n chiều khi và chỉ khi với bất kỳ các điểm phân biệt $x_1, x_2, \dots, x_n \in \Omega$ và cơ sở u_1, u_2, \dots, u_n của V , ta luôn có $\det(A) \neq 0$, trong đó ma trận A được xác định bởi (1.4).*

Sự tồn tại của không gian Haar đảm bảo tính khả nghịch của ma trận nội suy, nghĩa là tồn tại duy nhất nghiệm của Bài toán nội suy (1.1). Không gian các đa thức một biến bậc $n - 1$ chính là không gian Haar n chiều với tập dữ liệu $(x_j; y_j)$, $x_j, y_j \in \mathbb{R}$, $j = 1, \dots, n$.

Định lý 1.1.2 (Định lý Mairhuber Curtis, xem [61], Định lý 2.3, tr. 19). *Giả sử $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \geq 2$, chứa một điểm trong. Khi đó không tồn tại không gian Haar trên Ω có số chiều $n \geq 2$.*

Định lý Mairhuber Curtis cho thấy, nếu muốn giải được bài toán nội suy dữ liệu phân tán nhiều biến thì cơ sở cần phụ thuộc vào các vị trí dữ liệu. Để thu được các không gian xấp xỉ phụ thuộc dữ liệu, chúng ta cần xét các hàm xác định dương và ma trận xác định dương.

1.2 Hàm cơ sở bán kính

Định nghĩa 1.2.1 (Xem [61], Định nghĩa 6.15, tr. 78). Hàm số $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ được gọi là hàm bán kính nếu tồn tại hàm số một biến $\varphi : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$ sao cho

$$\Phi(x) = \varphi(\|x\|) = \varphi(r),$$

trong đó $r = \|x\|$, $x \in \mathbb{R}^d$ và $\|\cdot\|$ là chuẩn Euclid trên \mathbb{R}^d .

Bảng 1.1: Một số hàm bán kính

Tên hàm	Ký hiệu	$\Phi(x)$
Multiquadric	MQ	$\sqrt{1+r^2}$
Inverse multiquadric	IMQ	$1/\sqrt{1+r^2}$
Gaussian	Gauss	e^{-r^2}

Nếu thêm tham số hình dạng $\varepsilon > 0$ vào hàm Φ ta có Bảng 1.2 sau

Bảng 1.2: Một số hàm bán kính với tham số hình dạng $\varepsilon > 0$.

Tên hàm	Ký hiệu	$\Phi(x)$
Multiquadric	MQ	$\sqrt{\varepsilon^2+r^2}$
Inverse multiquadric	IMQ	$1/\sqrt{\varepsilon^2+r^2}$
Gaussian	Gauss	$e^{-(\varepsilon r)^2}$

Định nghĩa 1.2.2 (Hàm cơ sở bán kính). Cho X là tập các tâm trên \mathbb{R}^d và hàm số $\varphi : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$. Hàm cơ sở bán kính (RBF-radial basis function) (gọi tắt là hàm RBF) tâm c xác định bởi

$$\Phi_c : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}, \quad \Phi_c(x) = \varphi(\|x-c\|), \quad (1.5)$$

trong đó c được gọi là tâm của hàm cơ sở bán kính.

Tập hợp tất cả các hàm cơ sở bán kính trên X

$$\{\Phi_x : x \in X\} \quad (1.6)$$

được gọi là tập các hàm cơ sở bán kính có tâm trên X tạo bởi φ .

Tập các hàm cơ sở bán kính chưa chắc đã độc lập tuyến tính.

Ví dụ 1.2.1. Các hàm cơ sở bán kính được tạo bởi $\Phi(r) = r^2$ trên các tâm $\{-2, -1, 0, 1, 2\}$ trong \mathbb{R} là phụ thuộc tuyến tính.

Thật vậy, ta có $\Phi_{-2}(x) = (x+2)^2$, $\Phi_{-1}(x) = (x+1)^2$, $\Phi_0 = x^2$, $\Phi_1(x) = (x-1)^2$ và $\Phi_2(x) = (x-2)^2$. Các đa thức này phụ thuộc tuyến tính vì $\Phi_{-2} = -3\Phi_0 + 3\Phi_{-1} + \Phi_1$.

1.3 Ma trận xác định dương, hàm xác định dương

1.3.1 Ma trận xác định dương

Định nghĩa 1.3.1 (Xem [24], Định nghĩa 3.1, tr. 27). *Ma trận thực, đối xứng $A = [A_{ij}]_{n \times n}$ được gọi là xác định dương nếu dạng toàn phương tương ứng không âm, tức là*

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_i c_j A_{ij} \geq 0, \quad c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T \in \mathbb{R}^n$$

hay

$$c^T A c \geq 0, \quad c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T \in \mathbb{R}^n.$$

Dấu "=" xảy ra khi và chỉ khi $c = (0, 0, \dots, 0)^T$.

Tính chất quan trọng của ma trận xác định dương là các giá trị riêng của nó dương, do đó ma trận xác định dương là không suy biến.

1.3.2 Hàm xác định dương

Định nghĩa 1.3.2 (Xem [61], Định nghĩa 6.1, tr. 65). *Hàm số liên tục $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$, được gọi là xác định dương trên \mathbb{R}^d nếu với mọi bộ tâm phân biệt $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^d$, với mọi véc tơ $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T \in \mathbb{C}^n$, dạng toàn phương*

$$\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j \bar{c}_k \Phi(x_j - x_k) \geq 0. \quad (1.7)$$

Dấu "=" xảy ra khi và chỉ khi c là véc tơ 0.

Nếu

$$\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j \bar{c}_k \Phi(x_j - x_k) > 0, \quad c \neq 0, \quad (1.8)$$

thì hàm Φ được gọi là xác định dương chặt trên \mathbb{R}^d .

Định nghĩa 1.3.3 (Xem [61], Định nghĩa 6.16, tr. 78). *Hàm một biến* $\varphi : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$ được gọi là *xác định dương trên* \mathbb{R}^d nếu hàm nhiều biến tương ứng $\Phi(x) = \varphi(\|x\|)$, $x \in \mathbb{R}^d$ là *xác định dương*.

Ví dụ 1.3.1. Hàm số

$$\Phi(x) = e^{ix^T y}$$

là xác định dương với bất kỳ điểm cố định $y \in \mathbb{R}^d$, với mọi d .

Thật vậy, ta có

$$\Phi(x_j - x_k) = e^{i(x_j - x_k)^T y} = e^{ix_j^T y} \overline{e^{ix_k^T y}},$$

nên

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j \overline{c_k} e^{i(x_j - x_k)^T y} &= \left(\sum_{j=1}^n c_j e^{ix_j^T y} \right) \left(\sum_{k=1}^n \overline{c_k} e^{-ix_k^T y} \right) \\ &= \left(\sum_{j=1}^n c_j e^{ix_j^T y} \right) \left(\sum_{k=1}^n \overline{c_k e^{ix_k^T y}} \right) \\ &= \left| \sum_{j=1}^n c_j e^{ix_j^T y} \right|^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Các định lý sau cho ta một cách khác để chứng minh một hàm số là xác định dương.

Định lý 1.3.1 (Định lý Bochner, xem [24], Định lý 3.3, tr. 31). *Hàm số liên tục* $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ là *xác định dương* khi và chỉ khi nó là *phép biến đổi Fourier của độ đo Borel μ hữu hạn, không âm trên* \mathbb{R}^d , tức là

$$\Phi(x) = \hat{\mu}(x) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ix^T y} d\mu(y), \quad \text{với mọi } x \in \mathbb{R}^d. \quad (1.9)$$

Tính chất của hàm đơn điệu hoàn toàn được giới thiệu trong phần tiếp theo rất hữu ích để kiểm tra một hàm cơ sở bán kính là xác định dương trên không gian d chiều.

Định nghĩa 1.3.4 (Hàm đơn điệu hoàn toàn, xem [7], Định nghĩa 2.1, tr. 12). *Hàm số* $\varphi \in C^\infty(0, +\infty)$ được gọi là *đơn điệu hoàn toàn trên* $(0, +\infty)$ nếu

$$(-1)^\ell \varphi^{(\ell)}(r) \geq 0 \quad (1.10)$$

với mọi $r > 0$ và $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$. *Hàm số* φ cũng được gọi là *đơn điệu hoàn toàn trên* $[0, +\infty)$ nếu nó thuộc $C[0, +\infty)$ và thoả mãn (1.10).

Ví dụ 1.3.2. 1. Hàm số $\varphi(r) = e^{-cr}$, $c \geq 0$ là đơn điệu hoàn toàn trên $(0, +\infty)$, vì

$$(-1)^\ell \varphi^{(\ell)}(r) = (-1)^{2\ell} c^\ell e^{-cr} = c^\ell e^{-cr} \geq 0, \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

2. Hàm số $\varphi(r) = \frac{1}{(1+r)^\alpha}$, $\alpha \geq 0$ là đơn điệu hoàn toàn trên $(0, +\infty)$. Thật vậy

$$(-1)^\ell \varphi^{(\ell)}(r) = (-1)^{2\ell} \alpha(\alpha+1) \cdots (\alpha+\ell-1) \frac{1}{(1+r)^{\alpha+\ell}} \geq 0, \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Định lý sau là tính chất của hàm đơn điệu hoàn toàn, nó cũng là một cách để xác định hàm số là xác định dương.

Định lý 1.3.2 (Xem [61], Định lý 7.14, tr. 95). Cho hàm số $\varphi : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$, khi đó các mệnh đề sau là tương đương:

- (i) φ là xác định dương trên \mathbb{R}^d .
- (ii) $\varphi(\sqrt{r})$ là đơn điệu hoàn toàn trên $[0, +\infty)$ và khác hàm hằng.
- (iii) Tồn tại độ đo Borel ν hữu hạn, khác không, có tâm khác 0, thỏa mãn

$$\varphi(r) = \int_0^\infty e^{-r^2 y} d\nu(y). \quad (1.11)$$

Áp dụng Định lý 1.3.2 để chứng minh hàm φ là xác định dương trong ví dụ sau

Ví dụ 1.3.3. Các hàm số sau là xác định dương trên \mathbb{R}^d .

- (i) Hàm Gauss: $\varphi(r) = e^{-(\varepsilon r)^2}$, $\varepsilon > 0$.
- (ii) Hàm IMQ: $\varphi(r) = (1 + (\varepsilon r)^2)^{-\alpha}$, $\alpha > 0, \varepsilon > 0$.

Thật vậy, áp dụng Định lý 1.3.2 ta có:

(i) Với hàm Gauss ta có $\varphi(\sqrt{r}) = e^{-\varepsilon^2 r}$, $\varepsilon > 0$, nên

$$(-1)^\ell \varphi^{(\ell)}(\sqrt{r}) = (-1)^{2\ell} \varepsilon^{2\ell} e^{-\varepsilon^2 r} = \varepsilon^{2\ell} e^{-\varepsilon^2 r} \geq 0, \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Do đó $\varphi(\sqrt{r})$ là đơn điệu hoàn toàn trên $[0, +\infty)$, nên $\varphi(r)$ là hàm xác định dương.

(ii) Với hàm IMQ ta có $\varphi(\sqrt{r}) = \frac{1}{(1+\varepsilon^2 r)^\alpha}$, $\alpha \geq 0$, nên

$$(-1)^\ell \varphi^{(\ell)}(\sqrt{r}) = (-1)^{2\ell} \varepsilon^{2\ell} \alpha(\alpha+1) \cdots (\alpha+\ell-1) \frac{1}{(1+\varepsilon^2 r)^{\alpha+\ell}} \geq 0, \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Do đó $\varphi(\sqrt{r})$ là đơn điệu hoàn toàn trên $[0, +\infty)$, nên $\varphi(r)$ là hàm xác định dương.

Định lý 1.3.3 (Xem [61], Định lý 8.3, tr. 98). *Hàm liên tục, chẵn $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ được gọi là xác định dương bậc m nếu với mọi $n \in \mathbb{N}$, mọi cặp tâm phân biệt từng đôi một $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^d$ và mọi véc tơ $c \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ thỏa mãn*

$$\sum_{j=1}^n c_j p(x_j) = 0 \quad (1.12)$$

với mọi đa thức giá trị thực bậc nhỏ hơn m , thì dạng toàn phương

$$\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n c_j c_k \Phi(x_j - x_k) \geq 0. \quad (1.13)$$

Hàm Φ được gọi là xác định dương chặt bậc m nếu dạng toàn phương (1.13) dương và bằng 0 khi c là véc tơ không.

Nếu một hàm là xác định dương bậc m trong không gian \mathbb{R}^d thì nó sẽ là xác định dương với mọi bậc $m_1 > m$. Nếu một hàm là xác định dương (nghĩa là trường hợp $m = 0$) thì sẽ là xác định dương với mọi bậc $m > 0, m \in \mathbb{N}$.

1.4 Nội suy hàm cơ sở bán kính

Cho bộ dữ liệu $(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, n, x_i \in \mathbb{R}^d, y_i \in \mathbb{R}$ và hàm $\Phi(x)$ sao cho

$$\Phi_k(x) = \Phi(x - x_k) = \varphi(\|x - x_k\|), \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

Khi đó, nội suy hàm số dựa trên các hàm cơ sở bán kính (gọi tắt là nội suy RBF) là tìm hàm

$$F(x) = \sum_{k=1}^n c_k \Phi_k(x) = \sum_{k=1}^n c_k \varphi(\|x - x_k\|)$$

thỏa mãn điều kiện nội suy (1.1).

Nếu $\Phi_k(x)$ là hàm xác định dương thì theo điều kiện nội suy ta có

$$F(x_i) = y_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

hay

$$\sum_{k=1}^n c_k \varphi(\|x_i - x_k\|) = y_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

hay

$$\begin{bmatrix} \varphi(\|x_1 - x_1\|) & \varphi(\|x_1 - x_2\|) & \cdots & \varphi(\|x_1 - x_n\|) \\ \varphi(\|x_2 - x_1\|) & \varphi(\|x_2 - x_2\|) & \cdots & \varphi(\|x_2 - x_n\|) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi(\|x_n - x_1\|) & \varphi(\|x_n - x_2\|) & \cdots & \varphi(\|x_n - x_n\|) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

hay

$$Ac = y,$$

trong đó

$$A = \begin{pmatrix} \varphi(0) & \varphi(\|x_1 - x_2\|) & \cdots & \varphi(\|x_1 - x_n\|) \\ \varphi(\|x_2 - x_1\|) & \varphi(0) & \cdots & \varphi(\|x_2 - x_n\|) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi(\|x_n - x_1\|) & \varphi(\|x_n - x_2\|) & \cdots & \varphi(0) \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

$$c = [c_1, \dots, c_n]^T, \quad y = [y_1, \dots, y_n]^T.$$

Theo định nghĩa hàm xác định dương suy ra $\det(A) \neq 0$.

1.5 Sai số và số điều kiện của nội suy RBF

1.5.1 Sai số

Định nghĩa 1.5.1 (Tập các tâm rời rạc). Cho miền mở, bị chặn $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$. Tập $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subseteq \overline{\Omega}$ được gọi là tập các tâm rời rạc nếu X gồm tất cả các điểm trong miền và các điểm trên biên.

Định nghĩa 1.5.2 (Xem [61], Định nghĩa 1.4, tr. 14). Cho miền mở, bị chặn $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ và $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subseteq \Omega$ là tập các tâm rời rạc. Khoảng cách đầy (fill distance) $h_{X,\Omega}$ của X trong Ω được xác định bởi

$$h_{X,\Omega} := \sup_{x \in \Omega} \min_{j=1,2,\dots,n} \|x - x_j\|.$$

Giả sử Φ là hàm xác định dương chặt, $A_{ij} = \Phi(x_i, x_j)$, $i, j = 1, 2, \dots, n$. Để tìm được các hàm cơ sở chính tắc u_j^* , $j = 1, 2, \dots, n$ thoả mãn

$$u_j^*(x_i) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{khi } i = j, \\ 0 & \text{khi } i \neq j, \end{cases}$$

ta xét hệ phương trình

$$Au^*(x) = b(x), \quad x \in X,$$

trong đó A là ma trận khả nghịch và

$$u = [u_1^*, u_2^*, \dots, u_n^*]^T, \quad b = [\Phi(\cdot, x_1), \Phi(\cdot, x_2), \dots, \Phi(\cdot, x_n)]^T.$$

Khi đó ta có kết quả sau:

Định lý 1.5.1 (Xem [24], Định lý 14.1, tr. 112). Cho $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subseteq \mathbb{R}^d$ là tập các tâm rời rạc và Φ là hàm xác định dương chặt trên \mathbb{R}^d . Khi đó tồn tại các hàm $u_j^* \in \text{span}\{\Phi(\cdot, x_j), j = 1, 2, \dots, n\}$ thoả mãn $u_j^*(x_i) = \delta_{ij}$ và hàm nội suy F ứng với các giá trị $f_j, j = 1, 2, \dots, n$ tại các mốc nội suy x_1, x_2, \dots, x_n là

$$F(x) = \sum_{j=1}^n f_j u_j^*(x).$$

Cho hàm $\Phi : \Omega \subseteq \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$. Gọi $\mathcal{N}_\Phi(\Omega)$ là không gian được sinh bởi Φ , được định nghĩa là không gian Hilbert mà các phần tử có dạng

$$\sum_{j=1}^{n_\Phi} c_j \Phi(\cdot - x_j), \quad x_j \in \Omega,$$

trong đó n_Φ có thể bằng ∞ , với tích vô hướng được xác định bởi

$$\left\langle \sum_{j=1}^{n_\Phi} c_j \Phi(\cdot - x_j), \sum_{i=1}^{n_\Phi} d_i \Phi(\cdot - z_i) \right\rangle := \sum_{j=1}^{n_\Phi} \sum_{i=1}^{n_\Phi} c_j d_i \Phi(x_j - z_i), \quad z_i \in \Omega.$$

Để đánh giá sai số của phép nội suy, Wu và Schaback [63, Định nghĩa 1] đưa ra khái niệm hàm Kriging và được Schaback dùng với tên hàm lữ thừa trong [53], nó được định nghĩa như sau:

Định nghĩa 1.5.3 (Xem [24], Định nghĩa 14.1, tr. 115). Cho $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ và $\Phi \in C(\Omega \times \Omega)$ là hàm xác định dương chặt trên \mathbb{R}^d . Với bất kỳ tập các điểm phân biệt $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subseteq \Omega$, hàm lữ thừa được xác định bởi

$$[P_{\Phi, X}(x)]^2 = Q(u^*(x)),$$

trong đó u^* là véc tơ của các hàm cơ sở chính tắc như trong Định lý 1.5.1 và

$$Q(u) := \Phi(x, x) - 2 \sum_{j=1}^n u_j \Phi(x, x_j) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n u_i u_j \Phi(x_i, x_j), \quad x \in X, \quad u \in \mathbb{R}^n.$$

Sử dụng tích vô hướng trong không gian $\mathcal{N}_\Phi(\Omega)$ ta có

$$\begin{aligned} Q(u) &= \Phi(x, x) - 2 \sum_{j=1}^n u_j \Phi(x, x_j) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n u_i u_j \Phi(x_i, x_j) \\ &= \langle \Phi(\cdot, x), \Phi(\cdot, x) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} - 2 \sum_{j=1}^n u_j \langle \Phi(\cdot, x), \Phi(\cdot, x_j) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} \\ &\quad + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n u_i u_j \langle \Phi(\cdot, x_i), \Phi(\cdot, x_j) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left\langle \Phi(\cdot, x) - \sum_{j=1}^n u_j \Phi(\cdot, x_j), \Phi(\cdot, x) - \sum_{j=1}^n u_j \Phi(\cdot, x_j) \right\rangle_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)} \\
&= \left\| \Phi(\cdot, x) - \sum_{j=1}^n u_j \Phi(\cdot, x_j) \right\|_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)}^2.
\end{aligned}$$

Nếu sử dụng hệ phương trình tuyến tính như trong mục 1.4 với

$$A = [\Phi(x_i - x_j)]_{i,j=1}^n, u = [u_1, u_2, \dots, u_n]^T, b = [\Phi(\cdot, x_1), \Phi(\cdot, x_2), \dots, \Phi(\cdot, x_n)]^T,$$

khi đó dạng toàn phương của $Q(u)$ là

$$Q(u) = \Phi(x, x) - 2u^T b(x) + u^T A u.$$

Từ Định nghĩa 1.5.3 suy ra

$$P_{\Phi, X}(x) = \sqrt{Q(u^*(x))} = \sqrt{\Phi(x, x) - 2(u^*(x))^T b(x) + (u^*(x))^T A (u^*(x))}.$$

Mặt khác, bằng việc sử dụng các hàm chính tắc ta có $Au^*(x) = b(x)$ nên

$$\begin{aligned}
P_{\Phi, X}(x) &= \sqrt{\Phi(x, x) - (u^*(x))^T b(x)} \\
&= \sqrt{\Phi(x, x) - (u^*(x))^T A u^*(x)} \\
&= \sqrt{\Phi(x, x) - (b(x))^T A^{-1} b(x)}.
\end{aligned}$$

Do A là ma trận xác định dương và Φ là hàm xác định dương chặt nên suy ra

$$0 \leq P_{\Phi, X}(x) \leq \sqrt{\Phi(x, x)}.$$

Định lý 1.5.2 (Xem [24], Định lý 14.2, tr. 117). Cho $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ là miền mở và $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subseteq \Omega$ là tập các tâm rời rạc, $\Phi \in C(\Omega \times \Omega)$ là hàm xác định dương chặt trên Ω . Ký hiệu F là nội suy của hàm $f \in \mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)$ trên X . Khi đó

$$|f(x) - F(x)| \leq P_{\Phi, X}(x) \|f\|_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)}, \quad x \in \Omega.$$

Định lý 1.5.3 (Xem [61], Định lý 11.4, tr. 176). Cho $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ là miền mở và $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subseteq \Omega$ là tập các tâm rời rạc, $\Phi \in C^{2k}(\Omega \times \Omega)$ là hàm xác định dương chặt. Ký hiệu F là nội suy của hàm $f \in \mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)$ trên X . Khi đó

$$|D^\alpha f(x) - D^\alpha F(x)| \leq P_{\Phi, X}^{(\alpha)}(x) \|f\|_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)}, \quad \forall x \in \Omega, \forall \alpha \in \mathbb{N}_0^d, |\alpha| \leq k.$$

Sử dụng khoảng cách đây ta có định lý sau:

Định lý 1.5.4 (Xem [61], Định lý 11.14, tr. 183). Cho $X := \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ là tập các tâm rời rạc. Gọi $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_d)^T \in \mathbb{N}_0^d$ thỏa mãn $|\beta| = \sum_{i=1}^d \beta_i$, với \mathbb{N}_0 là tập hợp số nguyên không âm. Giả sử toán tử vi phân D^β cho bởi công thức

$$D^\beta := \frac{\partial^{|\beta|}}{\partial x_1^{\beta_1} \partial x_2^{\beta_2} \dots \partial x_d^{\beta_d}}.$$

Cho Φ là hàm số khả vi vô hạn, như hàm Gauss và hàm IMQ, là hàm xác định dương bậc m . Ký hiệu F là nội suy của hàm $f \in \mathcal{N}_\Phi(\Omega)$ trên X . Khi đó với mọi $l \in \mathbb{N}$ và $l \geq \max\{|\beta|, m-1\}$ tồn tại hằng số $h_0(l), C_l > 0$ sao cho

$$\left| D^\beta f(x) - D^\beta F(x) \right| \leq C_l h_{X,\Omega}^{l-|\beta|} |f|_{N_\Phi(\Omega)},$$

trong đó $f \in N_\Phi(\Omega)$, $h_0(l) > h_{X,\Omega}$, β là bậc của đạo hàm.

1.5.2 Số điều kiện và sự ổn định của nội suy RBF

Định nghĩa 1.5.4. Cho ma trận vuông A khả nghịch. Khi đó, số điều kiện của ma trận A tính theo $\|\cdot\|_p$ ($1 \leq p \leq \infty$) cho trước là

$$\text{cond}(A) = \|A\|_p \|A^{-1}\|_p.$$

Bài toán nội suy dữ liệu phân tán dẫn đến (1.3), tức là hệ số c thỏa mãn $Ac = y$, suy ra

$$\|y\|_p \leq \|A\|_p \|c\|_p. \quad (1.15)$$

Năm 1995, Robert Schaback ([53, Phần 2]) đã chỉ ra, với mức độ nhiễu cộng (tức là nhiễu do các yếu tố bên ngoài gây ra), khi tính toán $y + \Delta y$ cho kết quả tương ứng là $c + \Delta c$, với $\Delta c = c^* - c$, c^* là nghiệm xấp xỉ của (1.3). Khi đó

$$A(c + \Delta c) = y + \Delta y.$$

Do $Ac = y$ nếu $A\Delta c = \Delta y$, suy ra $\Delta c = A^{-1}\Delta y$, do đó

$$\|\Delta c\|_p \leq \|A^{-1}\|_p \|\Delta y\|_p. \quad (1.16)$$

Nhân hai vế của (1.15) và (1.16) ta được

$$\frac{\|\Delta c\|_p}{\|c\|_p} \leq \|A\|_p \|A^{-1}\|_p \frac{\|\Delta y\|_p}{\|y\|_p} = \text{cond}(A) \frac{\|\Delta y\|_p}{\|y\|_p}. \quad (1.17)$$

Với nội suy RBF, ma trận nội suy A trên tập các tâm rời rạc $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ có dạng (1.14). Do Φ là hàm cơ sở bán kính nên A là ma trận xác định dương và

$$\text{cond}(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\lambda_{\max}(A_{\Phi, X})}{\lambda_{\min}(A_{\Phi, X})},$$

trong đó $\lambda_{\max}(A_{\Phi, X}), \lambda_{\min}(A_{\Phi, X})$ là các giá trị riêng lớn nhất và nhỏ nhất của A trên X [61, Phần 12, trang 207].

Số điều kiện của ma trận nội suy cho biết độ ổn định của quá trình nội suy. Do đó, ta cần xem xét các giá trị riêng lớn nhất và nhỏ nhất. Giá trị riêng lớn nhất λ_{\max} được đánh giá bởi định lý Gershgorin trong [61, tr. 207] như sau: Cho tập các tâm rời rạc $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ với

$$|\lambda_{\max}(A_{\Phi, X}) - \Phi(x_j, x_j)| \leq \sum_{k=1, k \neq j}^n |\Phi(x_j, x_k)|, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

khi đó

$$\lambda_{\max}(A_{\Phi, X}) \leq n \|\Phi(\cdot, \cdot)\|_{L_\infty(X, X)}.$$

Nếu Φ là hàm xác định dương thì

$$\lambda_{\max}(A_{\Phi, X}) \leq n \Phi(0).$$

Định lý 1.5.5 ([53], Định lý 2.1). Cho $u_j^*(x)$, $1 \leq j \leq n$ là các hàm chính tắc sinh bởi Φ trên $X \subseteq \Omega \subset \mathbb{R}^d$. Khi đó với mọi $x \in \Omega \setminus X$ ta có

$$1 \leq 1 + \sum_{j=1}^n [u_j^*(x)]^2 \leq P_{\Phi, X}^2(x) / \lambda_{\min}(A_{\Phi, X \cup \{x\}}),$$

trong đó

$$\lambda_{\min}(A_{\Phi, X}) = \inf_{c \neq 0} \frac{c^T A_{\Phi, X} c}{c^T c}$$

và $A_{\Phi, X}$ là ma trận nội suy của Φ trên $X \cup \{x\}$.

1.6 Phương pháp lưới giải phương trình đạo hàm riêng

Trước khi giới thiệu một số phương pháp lưới, chúng tôi trình bày một số khái niệm sau:

Định nghĩa 1.6.1 (Véc tơ trọng số hay stencil). Cho D là toán tử vi phân tuyến tính xác định trên \mathbb{R}^d và $X = \{x_i\}_{i=1}^n \subset \mathbb{R}^d$ là tập các tâm phân tán được chọn. Một xấp xỉ đối với toán tử D ,

$$Du(x) \approx \sum_{i=1}^n w_i u(x_i),$$

được xác định bởi các hệ số

$$w_i = w_i(x), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

Véc tơ $w = [w_1, w_2, \dots, w_n]^T$ được gọi là véc tơ trọng số hay stencil.

Định nghĩa 1.6.2 (Giá véc tơ trọng số Ξ_ζ). Cho $\Xi \subset \bar{\Omega}$ là tập hữu hạn các tâm rời rạc có biên là $\partial\Xi := \Xi \cap \partial\Omega$. Với mỗi $\zeta \in \Xi \setminus \partial\Xi$ ta chọn được tập các tâm Ξ_ζ gồm ζ và các điểm lân cận của ζ . Tập Ξ_ζ được gọi là giá véc tơ trọng số.

Đối với phương pháp lưới, tập giá véc tơ trọng số Ξ_ζ có thể được chọn gồm ζ và đỉnh của các tam giác có chung đỉnh ζ trong không gian 2 chiều, hoặc nó gồm ζ và đỉnh của các tứ diện có chung đỉnh ζ trong không gian 3 chiều. Đối với phương pháp không lưới cần một thuật toán chọn tập Ξ_ζ , và được gọi là thuật toán chọn tâm hay thuật toán chọn giá véc tơ trọng số [16, 41, 48, 55].

Định nghĩa 1.6.3 (Tập các tâm trùng khớp Θ). Cho $\Xi \subset \bar{\Omega}$ là tập hữu hạn các tâm rời rạc có biên là $\partial\Xi := \Xi \cap \partial\Omega$. Với mỗi $\zeta \in \Xi \setminus \partial\Xi$ ta chọn được một giá véc tơ trọng số Ξ_ζ . Gọi Θ_ζ là tập các trọng tâm của tam giác trong giá véc tơ trọng số Ξ_ζ , với quy tắc các điểm xung quanh ζ được xếp theo chiều ngược chiều kim đồng hồ và tạo thành các tam giác có chung đỉnh ζ . Khi đó tập

$$\Theta = \bigcup_{\zeta \in \Xi \setminus \partial\Xi} \Theta_\zeta$$

được gọi là tập các tâm trùng khớp.

Trong phần tiếp theo, chúng tôi sẽ giới thiệu hai phương pháp lưới truyền thống giải số bài toán (1), đó là phương pháp sai phân hữu hạn và phương pháp phần tử hữu hạn.

1.6.1 Phương pháp sai phân hữu hạn

Xét bài toán (1) với D là toán tử Laplace cho bởi công thức

$$D := \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}. \quad (1.18)$$

Phương pháp sai phân hữu hạn rời rạc bài toán (1) như sau: Cho $\Xi \subset \bar{\Omega}$ là tập hữu hạn các tâm rời rạc và $\partial\Xi := \Xi \cap \partial\Omega$. Với mỗi $\zeta \in \Xi \setminus \partial\Xi$, ta chọn được tập giá véctơ trọng số $\Xi_\zeta \subset \Xi$, $\zeta \in \Xi_\zeta$ và xấp xỉ toán tử vi phân bởi công thức

$$Du(\zeta) \approx \sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} u(\xi), \quad (1.19)$$

trong đó $[w_{\zeta, \xi}]_{\xi \in \Xi_\zeta}$ là véctơ trọng số. Khi đó bài toán (1) được rời rạc thành hệ phương trình

$$\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} \hat{u}(\xi) = f(\zeta), \quad \zeta \in \Xi \setminus \partial\Xi, \quad (1.20)$$

$$\hat{u}(\xi) = g(\xi), \quad \xi \in \partial\Xi. \quad (1.21)$$

Nếu hệ phương trình (1.20)-(1.21) không suy biến, giải hệ ta tìm được nghiệm xấp xỉ $\hat{u} : \Xi \rightarrow \mathbb{R}$ của bài toán (1).

Trong không gian 2 chiều, các tác giả của [16] đã giới thiệu lược đồ sai phân tổng quát với 2 tập hữu hạn các tâm rời rạc là $\Xi \subset \bar{\Omega}$ và $\Theta \subset \bar{\Omega}$ tập các tâm trùng khớp (tập các trọng tâm của các tam giác). Với mỗi $\zeta \in \Xi \setminus \partial\Xi$, $\partial\Xi := \Xi \cap \partial\Omega$, chọn 2 tập các tâm $\Xi_\zeta \subset \Xi$, $\zeta \in \Xi_\zeta$ và $\Theta_\zeta \subset \Theta$ ứng với các trọng số $w_{\zeta, \xi} \in \mathbb{R}$, $\xi \in \Xi_\zeta$ và $\sigma_{\zeta, \theta} \in \mathbb{R}$, $\theta \in \Theta_\zeta$ như Hình 1.1, để tính toán tử vi phân tuyến tính D trên Θ_ζ bởi công thức

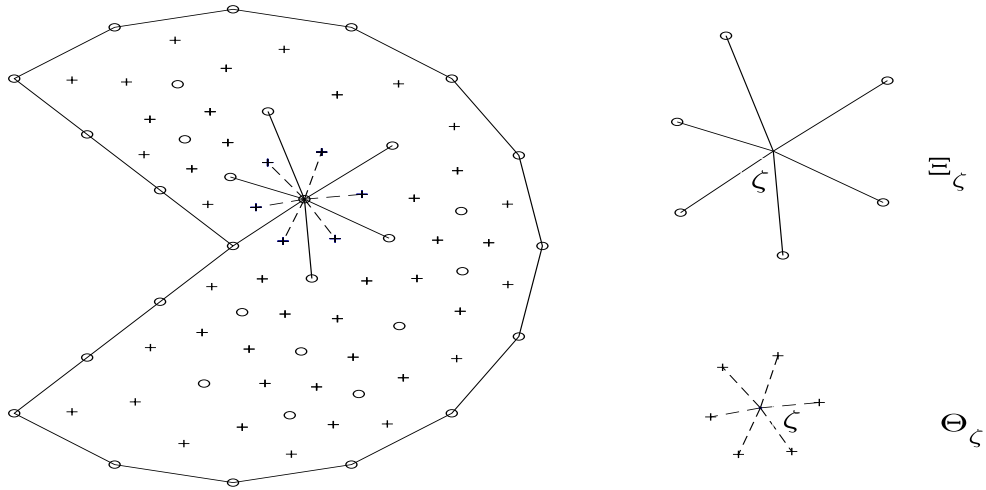
$$\sum_{\theta \in \Theta_\zeta} \sigma_{\zeta, \theta} Du(\theta) \approx \sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} u(\xi), \quad (1.22)$$

với trọng số $w_{\zeta, \xi}$, $\xi \in \Xi_\zeta$. Khi đó, bài toán (1) được rời rạc bởi hệ phương trình tuyến tính

$$\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} \hat{u}_\xi = \sum_{\theta \in \Theta_\zeta} \sigma_{\zeta, \theta} f(\theta), \quad \zeta \in \Xi \setminus \partial\Xi, \quad (1.23)$$

$$\hat{u}_\xi = g(\xi), \quad \xi \in \partial\Xi. \quad (1.24)$$

Trường hợp miền $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ là hình vuông và Ξ , Θ là tập các điểm lưới đều có bước lưới h . Giá véctơ trọng số khuôn 5- điểm và véctơ trọng số là $\Theta_\zeta = \{\zeta\}$, $\sigma_{\zeta, \zeta} = 1$,



Hình 1.1: Miền Ω cùng với các điểm của tập Ξ (dấu "o" nhỏ) và các điểm của tập Θ (dấu "+" nhỏ). Các tâm thuộc tập Ξ_ζ có liên kết với ζ bởi đường nét liền và các điểm thuộc Θ_ζ có liên kết với ζ bởi đường nét đứt.

$\Xi_\zeta = \{\zeta, \zeta \pm (h, 0), \zeta \pm (0, h)\}$, $w_{\zeta, \zeta} = -4/h^2$ và $w_{\zeta, \xi} = 1/h^2$, $\xi \in \Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$, xem Hình. 1.2. Nếu D là toán tử Laplace thì phương pháp sai phân hữu hạn tính D bởi công thức

$$\Delta u(\zeta) \approx \sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} u(\xi).$$

Khi đó công thức (1.23)-(1.24) là vi phân 5-điểm với

$$\Delta u(\zeta) \approx \frac{1}{h^2} \left(u(\zeta + (h, 0)) + u(\zeta - (h, 0)) + u(\zeta + (0, h)) + u(\zeta - (0, h)) - 4u(\zeta) \right).$$

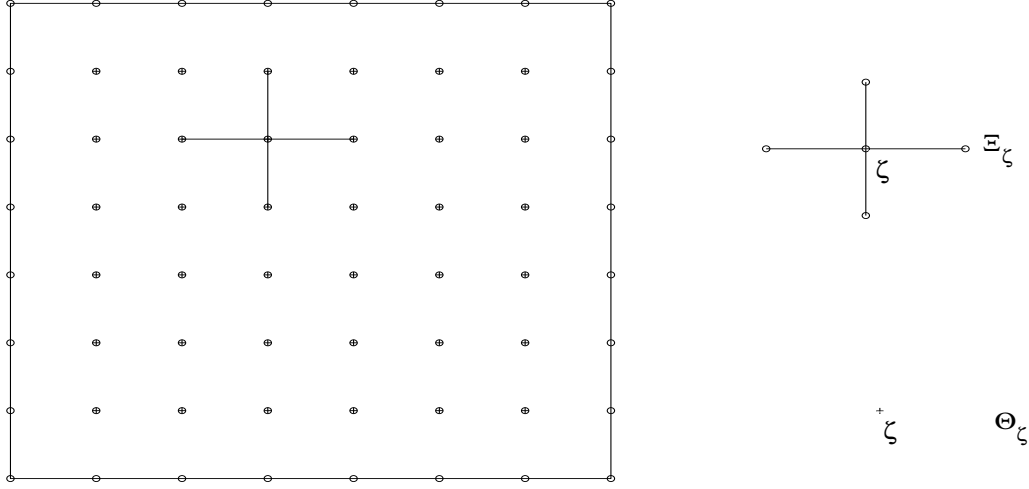
1.6.2 Phương pháp phần tử hữu hạn

Phương pháp phần tử hữu hạn rời rạc bài toán (1) với D là toán tử Laplace cho bởi (1.18), dựa trên bài toán biên phân như sau: Tìm $u \in H^1(\Omega)$ sao cho $u|_{\partial\Omega} = g$ và

$$-\int_{\Omega} \nabla u \nabla v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx \quad \text{với mọi hàm thử } v \in H_0^1(\Omega), \quad (1.25)$$

trong đó

$$\begin{aligned} H_1^0(\Omega) &= \{u \in H^1(\Omega) : u = 0 \text{ trên } \partial\Omega\}, \\ H_1(\Omega) &= \left\{ u \in L_2(\Omega) : \frac{\partial u}{\partial x_j} \in L_2(\Omega), j = 1, 2, \dots, d \right\}, \\ L_2(\Omega) &= \left\{ u : \int_{\Omega} |u(x)|^2 \, dx < \infty, x \in \mathbb{R}^d \right\}. \end{aligned}$$



Hình 1.2: Các tâm rời rạc, tập tâm trùng khớp Θ_ζ , khuôn trọng số 5-điểm Ξ_ζ của phương pháp sai phân hữu hạn.

Định lý Lax-Milgram (xem [11], Định lý 1.1.3, tr. 8) đã chỉ ra sự tồn tại và duy nhất nghiệm của Bài toán (1.25) và trong [50] đã giới thiệu cách rời rạc bài toán (1) bằng phương pháp phần tử hữu hạn.

Thật vậy, xét bài toán (1.25) trong không gian 2 chiều. Phương pháp phần tử hữu hạn rời rạc miền Ω bởi hữu hạn các phần tử tam giác. Gọi Ξ là tập đỉnh của các tam giác và hàm φ_ξ , $\xi \in \Xi$ là các hàm nón. Khi đó, nghiệm xấp xỉ của bài toán (1.25) được xác định bởi công thức

$$u(x) \approx \sum_{\xi \in \Xi} \hat{u}(\xi) \varphi_\xi(x), \quad x \in \Omega,$$

trong đó $\hat{u}(\xi)$ thỏa mãn $\hat{u}(\xi) = g(\xi)$ với $\xi \in \partial\Xi$ và

$$-\int_{\Omega} \nabla \left(\sum_{\xi \in \Xi} \hat{u}(\xi) \varphi_\xi \right) \nabla \varphi_\zeta dx = \int_{\Omega} f \varphi_\zeta dx, \quad \zeta \in \Xi \setminus \partial\Xi.$$

Thay $\xi \in \Xi$ ở vế trái bởi miền địa phương $\xi \in \Xi_\zeta$, trong đó Ξ_ζ gồm ζ và đỉnh của các tam giác có chung đỉnh ζ , (xem Hình 1.3), ta được

$$-\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} \hat{u}(\xi) \int_{\Omega} \nabla \varphi_\xi \nabla \varphi_\zeta dx = \int_{\Omega} f \varphi_\zeta dx, \quad \zeta \in \Xi \setminus \partial\Xi. \quad (1.26)$$

Tích phân ở vế trái của (1.26) xác định các phần tử của ma trận hệ số và được gọi là ma trận cứng. Đặt

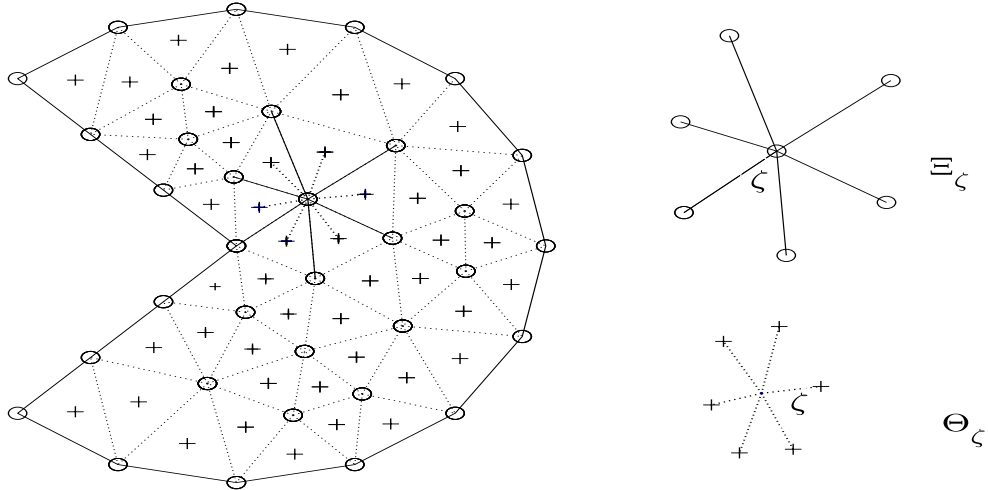
$$w_{\zeta, \xi} := -\int_{\Omega} \nabla \varphi_\xi \nabla \varphi_\zeta dx, \quad \xi \in \Xi_\zeta,$$

khi đó $w_{\zeta,\xi}$ là trọng số của phương pháp phần tử hữu hạn. Lược đồ thông thường của phương pháp phần tử hữu hạn tính tích phân ở vế phải của (1.26) là quy tắc trung điểm các cạnh của mỗi tam giác trong giá của φ_ζ . Gọi T_θ là tam giác có trọng tâm θ và Θ_ζ là tập các trọng tâm của các tam giác có chung đỉnh ζ (xem Hình 1.3), khi đó

$$\int_{\Omega} f \varphi_\zeta dx = \sum_{\theta \in \Theta_\zeta} \int_{T_\theta} f \varphi_\zeta dx \approx \sum_{\theta \in \Theta_\zeta} \frac{\text{area}(T_\theta)}{3} f(\theta).$$

Vì vậy, phương pháp phần tử hữu hạn cũng rời rạc Bài toán (1) ở dạng (1.23)-(1.24), với

$$w_{\zeta,\xi} = - \int_{\Omega} \nabla \varphi_\xi \nabla \varphi_\zeta dx, \quad \xi \in \Xi_\zeta, \quad \sigma_{\zeta,\theta} := \frac{\text{area}(T_\theta)}{3}.$$



Hình 1.3: Rời rạc miền Ω bởi các tam giác và các điểm của các tập Ξ , Θ , Ξ_ζ và Θ_ζ của phương pháp phần tử hữu hạn.

1.7 Giải phương trình đạo hàm riêng bằng nội suy RBF

Sử dụng hàm cơ sở bán kính giải phương trình đạo hàm riêng là cách tiếp cận không lưới, được đề xuất đầu tiên vào năm 1990 bởi Edward Kansa [39], bằng việc sử dụng nội suy RBF để tính gần đúng đạo hàm, sau đó phát triển để giải gần đúng phương trình đạo hàm riêng [40]. Đây là cách tiếp cận theo hướng trùng khớp toàn cục được phát triển sau này trong [28] (được gọi là “phương pháp Kansa”). Tư tưởng chính là thay u bằng hàm nội suy RBF và giải hệ phương trình bằng nội suy RBF để tìm nghiệm xấp xỉ, cụ thể như sau:

Giả sử miền Ω được rời rạc bởi tập các tâm trùng khớp $\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n\}$. Tìm nghiệm xấp xỉ của Bài toán (1) bởi nội suy RBF có dạng

$$\hat{u}(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi(\|x - \xi_i\|), \quad x \in \Xi. \quad (1.27)$$

Khi đó Bài toán (1) có dạng

$$\begin{aligned} D\hat{u}(\zeta) &= f(\zeta), \quad \zeta \in \Xi \setminus \partial\Xi, \\ \hat{u}(\xi) &= g(\xi), \quad \xi \in \partial\Xi. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Giả sử tập Ξ có m điểm trong miền với chỉ số từ 1 đến m ($m < n$) và $n - m$ điểm biên có chỉ số tương ứng là $m + 1$ đến n . Thay (1.27) vào (1.28) ta được

$$\begin{bmatrix} D\varphi(\|\xi_1 - \xi_1\|) & \cdots & D\varphi(\|\xi_1 - \xi_n\|) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ D\varphi(\|\xi_m - \xi_1\|) & \cdots & D\varphi(\|\xi_m - \xi_n\|) \\ \varphi(\|\xi_{m+1} - \xi_1\|) & \cdots & \varphi(\|\xi_{m+1} - \xi_n\|) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi(\|\xi_n - \xi_1\|) & \cdots & \varphi(\|\xi_n - \xi_n\|) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(\xi_1) \\ \vdots \\ f(\xi_m) \\ g(\xi_{m+1}) \\ \vdots \\ g(x_n) \end{bmatrix}. \quad (1.29)$$

Giải hệ phương trình (1.29) ta tìm được các hệ số α , thay trở lại (1.27) ta tìm được nghiệm xấp xỉ \hat{u} . Câu hỏi đặt ra là chọn hàm φ như thế nào để ma trận của hệ phương trình (1.29) không suy biến. Kansa đã kỳ vọng rằng, với cách tiếp cận như vậy thì ma trận A sẽ không suy biến nhưng thực tế thì không phải như vậy. Do đó, đây chính là nhược điểm của phương pháp. Hơn nữa phần đắt nhất của phương pháp Kansa là chi phí tính toán rất lớn, $O(n^3)$ là chi phí giải hệ tìm nghiệm xấp xỉ, $O(n^3)$ cho mỗi lần tìm hệ số, nên phương pháp không phù hợp với bài toán có dữ liệu lớn.

1.8 Kết luận

Trong chương đã trình bày một số các khái niệm cơ bản làm cơ sở để xây dựng phương pháp không lưới RBF-FD giải phương trình đạo hàm riêng. Đồng thời trình bày một số phương pháp lưới truyền thống như phương pháp sai phân hữu hạn, phương pháp phần tử hữu hạn.

Phương pháp không lưới trùng khớp trên toàn miền gặp khó khăn với bài toán có dữ liệu lớn, vì khi đó số điều kiện của ma trận hệ số và chi phí tính toán của phương pháp tăng. Đây là động lực chính cho sự ra đời của phương pháp không lưới RBF-FD dựa trên sự rời rạc giống như phương pháp sai phân hữu hạn và sử dụng nội suy RBF với các tiếp cận địa phương để tính trọng số.

Chương 2

PHƯƠNG PHÁP KHÔNG LƯỚI THÍCH NGHI RBF-FD GIẢI BÀI TOÁN DIRICHLET CHO PHƯƠNG TRÌNH ELLIPTIC

Phương pháp RBF-FD là phương pháp không lưới dựa trên sự rời rạc giống như phương pháp sai phân hữu hạn để tìm nghiệm xấp xỉ tại các điểm rời rạc trong miền và sử dụng nội suy RBF với cách tiếp cận địa phương để tính trọng số. Cách tiếp cận địa phương được Oleg Davydov và Đặng Thị Oanh đề xuất vào năm 2011 [16], các tác giả này đã giới thiệu phương pháp RBF-FD dựa trên nội suy đơn điểm, nội suy đa điểm, thuật toán chọn giá véc tơ trọng số (chọn tâm) và thuật toán sinh tâm (làm mịn) thích nghi. Năm 2017, các tác giả Đặng Thị Oanh, Oleg Davydov và Hoàng Xuân Phú [48] đã tiếp tục phát triển thuật toán chọn tâm hỗ trợ phương pháp không lưới RBF-FD, thuật toán sinh tâm thích nghi trên các bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm có độ dao động lớn. Trong chương này, bên cạnh việc trình bày cách rời rạc bài toán trên miền rời rạc có tâm phân bố bất kỳ bởi phương pháp sai phân hữu hạn, chúng tôi còn giới thiệu cách tính trọng số bằng nội suy RBF, các thuật toán chọn tâm trong không gian 2 chiều và phát triển thuật toán chọn tâm trong không gian 3 chiều, đồng thời trình bày các thuật toán sinh tâm thích nghi cho phương pháp RBF-FD. Các thuật toán mới do chúng tôi đề xuất đều cho thấy sự hiệu quả trong các thử nghiệm số của Chương 3 và có thể đối sánh với kết quả của FEM và các thuật toán đã công bố trước đó.

2.1 Rời rạc bài toán

Phương pháp không lưới RBF-FD dựa trên sự rời rạc bài toán (1) với D là toán tử Laplace, giống như phương pháp sai phân hữu hạn tổng quát như sau: Giả sử $\Xi \subset \bar{\Omega}$ tập hữu hạn các tâm rời rạc. Gọi $\Xi_{\text{int}} := \Xi \cap \Omega$ là tập các tâm trong miền, $\partial\Xi := \Xi \cap \partial\Omega$ là tập các tâm trên biên. Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, ta chọn tập giá véc tơ trọng

số $\Xi_\zeta := \{\xi_0, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\} \subset \Xi$, với $\xi_0 = \zeta$ và xấp xỉ $Du(\zeta)$ bởi công thức

$$Du(\zeta) \approx \sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} u(\xi), \quad \zeta \in \Xi_{\text{int}}, \quad (2.1)$$

trong đó $w_{\zeta, \xi}$ là véc tơ trọng số và công thức (2.1) được gọi là *công thức vi phân số*. Khi đó, bài toán (1) được rời rạc bởi hệ phương trình

$$\begin{aligned} \sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} \hat{u}(\xi) &= f(\zeta), \quad \zeta \in \Xi_{\text{int}}; \\ \hat{u}(\xi) &= g(\xi), \quad \xi \in \partial\Xi, \end{aligned} \quad (2.2)$$

với $\hat{u}(\xi)$ là nghiệm xấp xỉ của nghiệm u của bài toán (1) tại điểm $\xi \in \Xi$.

Để giải được hệ phương trình (2.2) bằng phương pháp RBF-FD ta cần giải quyết 3 vấn đề sau:

- Làm thế nào để tạo ra được tập các tâm rời rạc Ξ ?
- Chọn tập các tâm hỗ trợ Ξ_ζ (giá véc tơ trọng số) như thế nào?
- Cách tính véc tơ trọng số $w_{\zeta, \xi}$ phù hợp?

Các tác giả của [16] đã đưa vào tập các tâm trùng khớp $\Theta \subset \bar{\Omega}$ và rời rạc Bài toán (1) trong không gian 2 chiều thành hệ phương trình (1.23)-(1.24). Tuy nhiên chúng tôi không nghiên cứu mở rộng nghiệm của bài toán, mà nghiên cứu thuật toán sinh tâm thích nghi của miền Ξ và thuật toán chọn giá véc tơ trọng số Ξ_ζ cho phương pháp RBF-FD trong không gian 2 chiều và phát triển trong không gian 3 chiều.

Tập các tâm rời rạc Ξ có thể được tạo ra bằng cách giống nhau là sử dụng phương pháp lưới (phương pháp sai phân hữu hạn, phương pháp phần tử hữu hạn hoặc phương pháp thể tích hữu hạn). Tuy nhiên trong các ứng dụng việc tạo lưới thường rất khó khăn, đặc biệt là cho các mô hình 3D phức tạp. Động lực chính cho các phương pháp không lưới là không cần đường liên kết giữa các điểm trong Ξ , điều này giúp đơn giản hóa hơn trong việc tạo các tâm của miền rời rạc.

Trong không gian 2 chiều, việc tạo các tâm của miền rời rạc cho phương pháp RBF-FD đã được giới thiệu lần đầu tiên trong [16] bằng thuật toán sinh tâm thích nghi, đó là thuật toán sinh tâm trung điểm (xem Thuật toán D02, Phần 2.5). Thuật toán này tiếp tục được phát triển cho các bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm có kỳ dị, hoặc có độ dao động mạnh trong [48], đó là thuật toán sinh 5 tâm thích nghi (xem

Thuật toán ODP2, Phần 2.5). Đối với một thuật toán sinh tâm thích nghi không lưới, bốn công đoạn chính ảnh hưởng đến kết quả sinh tâm là: Cách tính độ lệch, ngưỡng của độ lệch, khoảng cách tách biệt địa phương và cấu trúc của các tâm ứng viên. Phương pháp tính độ lệch tốt đóng một vai trò rất quan trọng trong quá trình sinh tâm thích nghi, như trong [48] đã sử dụng cách tính tốt với chi phí tính toán là tuyến tính và đã chứng minh tính hiệu quả bằng các thử nghiệm số, đặc biệt nghiệm xấp xỉ phương pháp RBF-FD có độ chính xác tốt với cả bài toán có nghiệm dao động mạnh như Bài toán 6, Chương 3 với tham số $\alpha = 100000$. Trong thuật toán sinh tâm thích nghi cải tiến, chúng tôi tiếp tục sử dụng cách tính độ lệch này. Ngưỡng độ lệch xác định các cạnh có chèn thêm tâm mới hay không, trong thuật toán sinh tâm thích nghi cải tiến chúng tôi giới thiệu kỹ thuật xác định ngưỡng độ lệch dựa trên sự dao động của bài toán. Kỹ thuật này tránh được việc giảm ngưỡng nhanh có thể dẫn đến việc chèn các tâm tại vị trí không cần thiết. Với bài toán có hàm dao động mạnh, nên ưu tiên cho mật độ của các tâm hơn là sự phân bố đều. Do đó, thuật toán sinh tâm thích nghi cải tiến có bước điều chỉnh giảm tham số hệ số khoảng cách tách biệt địa phương để các tâm ứng viên được chèn vào nhiều hơn (xem Thuật toán OT2, Phần 2.5).

Mỗi phương pháp không lưới đều đưa ra thuật toán chọn tập các tâm rời rạc Ξ để tính véc tơ trọng số, đó là việc chọn các tập giá véc tơ trọng số Ξ_ζ , $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$ để tính các trọng số $w_{\zeta, \xi}$, $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, $\xi \in \Xi_\zeta$ tương ứng. Việc chọn giá véc tơ trọng số Ξ_ζ , $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$ ảnh hưởng đến kết quả tính véc tơ trọng số. Các thuật toán chọn giá véc tơ trọng số cho phương pháp RBF-FD được giới thiệu trong [3, 10, 37, 41, 44, 45, 51, 55, 62] cho kết quả không tốt qua thử nghiệm số trên lưới thích nghi trong [16] và trong [16] các tác giả đã đề xuất thuật toán chọn tâm mới cho phương pháp RBF-FD, với một điều kiện dừng về góc và giá véc tơ trọng số được chọn cố định với số tâm là $k = 6$ (xem Thuật toán D01, Phần 2.3.2). Trong [48] các tác giả tiếp tục đề xuất thuật toán chọn tâm với hai điều kiện dừng, ngoài điều kiện dừng về góc, thuật toán còn có thêm điều kiện dừng về khoảng cách (xem Thuật toán ODP1, Phần 2.3.2). Tuy nhiên việc chọn giá véc tơ trọng số với số tâm cố định $k = 6$ có thể loại bỏ một số điểm phù hợp hoặc chọn một số điểm không tốt, hơn nữa từ các Hình 1(d, f) trong [48] có thể chọn được giá véc tơ trọng số với $k = 4$ có các tâm phân phối đều và gần hơn, hoặc $k = 5$, thậm chí $k = 7$ hoặc $k = 8$, điều này đã thúc đẩy chúng tôi đề xuất thuật toán chọn giá véc tơ trọng số có số tâm không cố định và đưa ra tiêu chí mới để chọn một số điểm phù

hợp (xem Thuật toán OT1, Phần 2.3.2). Thử nghiệm số trên các bài toán có miền hình học phức tạp hoặc nghiệm có độ dao động lớn trong Chương 3, cho thấy, thuật toán chọn tâm mới chủ yếu chọn được giá véctơ trọng số 4 điểm ($k = 4$), nên mật độ ma trận hệ số nhỏ hơn mật độ ma trận cứng của FEM, hơn nữa sai số rms của phương pháp RBF-FD khi sử dụng thuật toán này ổn định và nhỏ hơn sai số rms của phương pháp RBF-FD sử dụng thuật toán chọn tâm trong [48] và cũng nhỏ hơn sai số rms của FEM. Bên cạnh đó chi phí tính toán của thuật toán chọn tâm mới đề xuất cũng nhỏ hơn so với thuật toán chọn tâm trong [48], điều này được thể hiện dựa vào việc so sánh 2 giá trị là số phần trăm thuật toán chọn tâm mới dừng lại ở Bước II (chọn được giá véctơ trọng số 4 điểm ($k = 4$)) từ 74% đến 90% và mật độ ma trận hệ số.

Các véctơ trọng số của bài toán (1) trong phương pháp RBF-FD có dạng tổng quát là công thức vi phân số (2.1), với D là toán tử Laplace Δ . Cách tính véctơ trọng số $w_{\zeta, \xi}$, $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, $\xi \in \Xi_{\zeta}$ ảnh hưởng đến độ chính xác của công thức (2.1), nó có thể được tính bằng cách sử dụng các đa thức có bậc nhất định hoặc hàm cơ sở bán kính (xem [26]). Độ chính xác của công thức vi phân số trên các tâm phân bố không đều của một số phương pháp được giới thiệu trong [21, 22, 23]. Trong [16] đã giới thiệu cách tính trọng số RBF đơn điểm, trọng số RBF đa điểm và trọng số RBF Hermite, tuy nhiên thử nghiệm số cũng cho thấy trọng số RBF đơn điểm có cách tính ít tốn kém và cũng hiệu quả, vì vậy cách tính này tiếp tục được sử dụng trong [48] trên các bài toán có miền hình học phức tạp, hoặc nghiệm có kỳ dị, hoặc có độ dao động lớn. Do đó, chúng tôi không nghiên cứu và mở rộng cách tính trọng số mà chỉ nghiên cứu thuật toán chọn tâm hỗ trợ tính véctơ trọng số, cùng với thuật toán sinh tâm thích nghi cho phương pháp RBF-FD. Trong phần tiếp theo chúng tôi sẽ giới thiệu một số cách tính véctơ trọng số đơn điểm dựa trên nội suy RBF.

2.2 Nội suy RBF tính véctơ trọng số

2.2.1 Véctơ trọng số

Trong phần này, chúng tôi sẽ trình bày cách tính trọng số bằng nội suy RBF được giới thiệu trong [49].

Mệnh đề 2.2.1. Cho $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ là hàm xác định dương, xác định bởi $\Phi(x) = \varphi(\|x\|)$, $x \in \mathbb{R}^d$, trong đó $\varphi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ và $\|\cdot\|$ là chuẩn Euclid trong \mathbb{R}^d . Giả sử

$X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^d$ là tập các tâm rời rạc và hàm số liên tục $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ có hàm nội suy RBF là

$$s(x) = \sum_{j=1}^n a_j \Phi(x - x_j), \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

Khi đó véc tơ trọng số trong công thức (2.1) được tính bằng nội suy RBF bởi công thức

$$w := [w_1, w_2, \dots, w_n]^T = (\Phi_X)^{-1} D\Phi(x - \cdot)|_X, \quad (2.3)$$

với D là toán tử vi phân và

$$\begin{aligned} \Phi_X &:= [\Phi(x_i - x_j)]_{i,j=1}^n, \\ D\Phi(x - \cdot)|_X &:= [D\Phi(x - x_1), D\Phi(x - x_2), \dots, D\Phi(x - x_n)]^T, \quad x \in \mathbb{R}^d. \end{aligned}$$

Chứng minh. Giả sử $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^d$ là tập các tâm rời rạc, khi đó hàm nội suy RBF s của hàm $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ có dạng

$$\begin{aligned} s(x) &= \sum_{j=1}^n a_j \Phi(x - x_j), & \Phi(x) &:= \varphi(\|x\|), \quad x \in \mathbb{R}^d, \\ s(x_i) &= u(x_i), & i &= 1, 2, \dots, n, \end{aligned}$$

trong đó $a_j, j = 1, 2, \dots, n$ là các hệ số nội suy. Từ điều kiện nội suy ta có

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

hay

$$\Phi_X a = u|_X,$$

trong đó

$$a := \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad u|_X := \begin{pmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_n) \end{pmatrix},$$

và

$$\begin{aligned} \Phi_X &:= \begin{pmatrix} \Phi(x_1 - x_1) & \Phi(x_1 - x_2) & \cdots & \Phi(x_1 - x_n) \\ \Phi(x_2 - x_1) & \Phi(x_2 - x_2) & \cdots & \Phi(x_2 - x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi(x_n - x_1) & \Phi(x_n - x_2) & \cdots & \Phi(x_n - x_n) \end{pmatrix} \\ &= [\Phi(x_i - x_j)]_{i,j=1}^n, \end{aligned}$$

là ma trận đối xứng xác định dương. Do đó

$$a = (\Phi_X)^{-1} u|_X.$$

Giả sử D là toán tử vi phân. Từ công thức nội suy, ta xấp xỉ $Du(x)$ bởi công thức

$$\begin{aligned} Du(x) \approx Ds(x) &= \sum_{j=1}^n a_j D\Phi(x - x_j) \\ &= a^T D\Phi(x - \cdot)|_X \\ &= \left\{ (\Phi_X)^{-1} u|_X \right\}^T D\Phi(x - \cdot)|_X \\ &= u|_X^T (\Phi_X)^{-1} D\Phi(x - \cdot)|_X \\ &= \sum_{i=1}^n w_i u(x_i) \\ &= [w_i u(x_i)]_{i=1}^n, \end{aligned} \tag{2.4}$$

trong đó

$$w := [w_1, w_2, \dots, w_n]^T = (\Phi_X)^{-1} D\Phi(x - \cdot)|_X,$$

gọi là véc tơ trọng số và

$$D\Phi(x - \cdot)|_X := [D\Phi(x - x_1), D\Phi(x - x_2), \dots, D\Phi(x - x_n)]^T.$$

□

Tham khảo thêm tính chất, ví dụ về hàm xác định dương trong [7, 24, 61] và lý thuyết về nội suy RBF trong [16, 26, 48].

2.2.2 Véc tơ trọng số với thành phần hằng số

Cách tính véc tơ trọng số cho phương pháp RBF-FD bằng nội suy RBF với thành phần hằng số, đã được các tác giả giới thiệu trong [16] như sau:

Mệnh đề 2.2.2. Cho $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ là hàm xác định dương, xác định bởi $\Phi(x) = \varphi(\|x\|)$, $x \in \mathbb{R}^d$, trong đó $\varphi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ và $\|\cdot\|$ là chuẩn Euclid trong \mathbb{R}^d . Giả sử $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^d$ là tập các tâm rời rạc và hàm số liên tục $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ có hàm nội suy RBF với thành phần hằng số là

$$s(x) = \sum_{j=1}^n a_j \Phi(x - x_j) + c, \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

Khi đó véc tơ trọng số w trong công thức (2.1) được tính bằng nội suy RBF bởi công thức

$$\begin{bmatrix} \Phi_X & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D\Phi(x-\cdot)|_X \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

trong đó $v \in \mathbb{R}^n$, D là toán tử vi phân và

$$\begin{aligned} \Phi_X &:= [\Phi(x_i - x_j)]_{i,j=1}^n, \\ D\Phi(x-\cdot)|_X &:= [D\Phi(x-x_1), D\Phi(x-x_2), \dots, D\Phi(x-x_n)]^T, \quad x \in \mathbb{R}^d. \end{aligned}$$

Chứng minh. Giả sử $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^d$ là tập các tâm rời rạc. Khi đó hàm nội suy RBF s của hàm $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ với thành phần hằng số có dạng

$$s(x) = \sum_{j=1}^n a_j \Phi(x-x_j) + c, \quad \Phi(x) := \varphi(\|x\|), \quad x \in \mathbb{R}^d \quad (2.6)$$

$$s(x_j) = u(x_j), \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (2.7)$$

trong đó c là hằng số và a_j là các hệ số nội suy thỏa mãn điều kiện nội suy (2.7), suy ra

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n a_j \Phi(x_l - x_j) + c &= u(x_l), \quad l = 1, 2, \dots, n; \\ \sum_{j=1}^n a_j &= 0, \end{aligned}$$

hay

$$\begin{bmatrix} \Phi_X & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u|_X \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.8)$$

trong đó

$$\begin{aligned} \mathbf{1}^T &:= \underbrace{[1 \ 1 \ \dots \ 1]}_n, \\ \Phi_X &:= \begin{pmatrix} \Phi(0) & \dots & \Phi(x_1 - x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi(x_n - x_1) & \dots & \Phi(0) \end{pmatrix}, \\ a &:= \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad u|_X := \begin{pmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_n) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Vì φ là hàm xác định dương trên X nên Φ_X là ma trận đối xứng xác định dương, do đó giải phương trình (2.8) ta luôn tìm được duy nhất hệ số tương ứng là

$$\begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Phi_X & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} u|_X \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.9)$$

Cho D là toán tử vi phân. Ta xấp xỉ $Du(x)$ bởi công thức

$$\begin{aligned} Du(x) &\approx Ds(x) = \sum_{j=1}^n a_j D\Phi(x - x_j) \\ &= \begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} D\Phi(x - \cdot)|_X \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Thay (2.9) vào (2.10) ta được

$$\begin{aligned} Du(x) &\approx \begin{bmatrix} u|_X \\ 0 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \Phi_X & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D\Phi(x - \cdot)|_X \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} u|_X \\ 0 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix} \\ &= \sum_{j=1}^n w_j u(x_j), \end{aligned}$$

với

$$D\Phi(x - \cdot)|_X := \begin{pmatrix} D\Phi(x - x_1) \\ D\Phi(x - x_2) \\ \vdots \\ D\Phi(x - x_n) \end{pmatrix}$$

và véc tơ trọng số w thỏa mãn phương trình

$$\begin{bmatrix} \Phi_X & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D\Phi(x - \cdot)|_X \\ 0 \end{bmatrix}.$$

□

Khi hằng số $c = 0$ thì ta được Mệnh đề 2.2.1. Các tác giả trong [16] đã sử dụng công thức (2.5) để tính trọng số đơn điểm và trọng số đa điểm (tức là sử dụng thêm các tâm trùng khớp), còn trong [49], chúng tôi đã tính trọng số bằng nội suy RBF bởi công thức (2.3).

2.2.3 Véc tơ trọng số với thành phần đa thức

Trong [18], chúng tôi đã giới thiệu cách tính véc tơ trọng số RBF-FD bằng nội suy RBF với thành phần đa thức như sau:

Mệnh đề 2.2.3. Cho $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ là hàm xác định dương, xác định bởi $\Phi(x) = \varphi(\|x\|)$, $x \in \mathbb{R}^d$, trong đó $\varphi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ và $\|\cdot\|$ là chuẩn Euclid trong \mathbb{R}^d . Giả sử

$X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^d$ là tập các tâm rời rạc và hàm số liên tục $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ có hàm nội suy RBF với thành phần đa thức là

$$s(x) = \sum_{j=1}^n a_j \Phi(x - x_j) + \sum_{j=1}^k c_j p_j(x), \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

với $\{p_1, \dots, p_k\}$ là một cơ sở của không gian tuyến tính các đa thức có bậc nhỏ hơn hoặc bằng ℓ . Khi đó véc tơ trọng số $w \in \mathbb{R}^n$ trong công thức (2.1) được tính bởi công thức

$$\begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Phi_X & P_X \\ P_X^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D\Phi(x - \cdot)|_X \\ DP(x) \end{bmatrix},$$

trong đó $v \in \mathbb{R}^k$, D là toán tử vi phân và

$$\begin{aligned} \Phi_X &:= [\Phi(x_i - x_j)]_{i,j=1}^n, \\ P_X &:= [p_j(x_i)]_{i,j=1}^{n,k}, \quad DP := [Dp_1, Dp_2, \dots, Dp_k]^T, \\ D\Phi(x - \cdot)|_X &:= [D\Phi(x - x_1), D\Phi(x - x_2), \dots, D\Phi(x - x_n)]^T, \quad x \in \mathbb{R}^d. \end{aligned}$$

Nếu $k = 1$ và p_1 là hằng số thì ta nhận được Mệnh đề 2.2.2.

Chứng minh. Giả sử $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subset \mathbb{R}^d$ là tập các tâm rời rạc. Khi đó hàm nội suy RBF s của hàm $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ với thành phần đa thức bậc ℓ có dạng

$$s(x) = \sum_{j=1}^n a_j \Phi(x - x_j) + \sum_{j=1}^k c_j p_j(x), \quad (2.11)$$

trong đó $\{p_1, \dots, p_k\}$ là một cơ sở của không gian tuyến tính các đa thức có bậc nhỏ hơn hoặc bằng ℓ và a, c là các hệ số xác định bởi các điều kiện nội suy

$$\sum_{j=1}^n a_j \Phi(x_i - x_j) + \sum_{j=1}^k c_j p_j(x_i) = u(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (2.12)$$

$$\sum_{j=1}^n a_j p_i(x_j) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k. \quad (2.13)$$

Phương trình (2.12) là thỏa mãn điều kiện nội suy

$$s(x_i) = u(x_i), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Phương trình (2.13) là điều kiện của hệ số nội suy. Đặc biệt, nếu $k = 0$ và $\ell = -1$ thì đó là trường hợp nội suy không thành phần đa thức. Hệ phương trình tuyến tính

(2.12)–(2.13) được viết dưới dạng ma trận là

$$\begin{aligned}\Phi_X a + P_X c &= u|_X, \\ P_X^T a &= 0,\end{aligned}\tag{2.14}$$

trong đó

$$a := \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \quad c := \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_k \end{bmatrix}, \quad u|_X := \begin{bmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_n) \end{bmatrix},$$

và

$$\begin{aligned}\Phi_X &:= [\Phi(x_i - x_j)]_{i,j=1}^n = \begin{bmatrix} \Phi(x_1 - x_1) & \Phi(x_1 - x_2) & \cdots & \Phi(x_1 - x_n) \\ \Phi(x_2 - x_1) & \Phi(x_2 - x_2) & \cdots & \Phi(x_2 - x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi(x_n - x_1) & \Phi(x_n - x_2) & \cdots & \Phi(x_n - x_n) \end{bmatrix}, \\ P_X &:= [p_j(x_i)]_{i,j=1}^{n,k} = \begin{bmatrix} p_1(x_1) & p_2(x_1) & \cdots & p_k(x_1) \\ p_1(x_2) & p_2(x_2) & \cdots & p_k(x_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ p_1(x_n) & p_2(x_n) & \cdots & p_k(x_n) \end{bmatrix}.\end{aligned}$$

Do φ là hàm xác định dương có bậc nhỏ hơn hoặc bằng $\ell + 1$ và P_X có hạng bằng số cột [7] nên ma trận của hệ (2.14) là đối xứng, xác định dương. Điều kiện sau của hệ được thỏa mãn nếu $n \geq k$ và tương đương với điều kiện $p \equiv 0$, tức là đa thức bậc ℓ bị triệt tiêu trên X . Giả sử các điều kiện được thỏa mãn và nội suy (2.11) được xác định duy nhất, khi đó các hệ số a, c tìm được từ (2.14) là

$$\begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Phi_X & P_X \\ P_X^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} u|_X \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Để tìm công thức vi phân của toán tử $Du(x)$, ta xấp xỉ $Du(x)$ bởi $Ds(x)$, khi đó ta có công thức vi phân

$$\begin{aligned}Du(x) &\approx Ds(x) = \sum_{j=1}^n a_j D\Phi(x - x_j) + \sum_{j=1}^k c_j Dp_j(x) \\ &= \begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} D\Phi(x - \cdot)|_X \\ DP(x) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} u|_X \\ 0 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^n w_i u(x_i),\end{aligned}$$

trong đó

$$DP := [Dp_1, \dots, Dp_k]^T$$

và các véc tơ $w \in \mathbb{R}^n$, $v \in \mathbb{R}^k$ được xác định bởi

$$\begin{bmatrix} w \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Phi_X & P_X \\ P_X^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} D\Phi(x - \cdot)|_X \\ DP(x) \end{bmatrix}.$$

Khi đó véc tơ trọng số w thỏa mãn hệ phương trình

$$\begin{aligned} \Phi_X w + P_X v &= D\Phi(x - \cdot)|_X, \\ P_X^T w &= DP(x). \end{aligned}$$

Ma trận của hệ phương trình này trùng với ma trận của hệ (2.14), do đó nó không suy biến.

Vậy, các véc tơ trọng số w_i , $i = 1, \dots, n$ của phương pháp RBF-FD trong công thức (2.1) tìm được bằng cách giải hệ phương trình đối xứng, xác định dương

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n w_j \Phi(x_i - x_j) + \sum_{j=1}^k v_j p_j(x_i) &= D\Phi(x - x_i), \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ \sum_{j=1}^n w_j p_i(x_j) &= Dp_i(x), \quad i = 1, 2, \dots, k, \end{aligned} \quad (2.15)$$

trong đó $\Phi(x) = \varphi(\|x\|)$, $x \in \mathbb{R}^d$ là hàm cơ sở bán kính, xác định dương có bậc $\leq \ell + 1$ và đa thức bậc ℓ với hạng của ma trận P_X bằng số cột. \square

Trong [16, 48], để tính trọng số bằng nội suy RBF cho phương pháp RBF-FD, các tác giả sử dụng hàm Gauss $\Phi(x) = \varphi(r) = e^{-\varepsilon^2 r^2}$ với hằng số $\ell = 0$ hoặc $\ell = -1$ cho trường hợp không thành phần đa thức, nó rất hiệu quả cho Bài toán Dirichlet trong không gian 2 chiều, kể cả với bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm u có kỳ dị hoặc dao động mạnh, với tập các tâm rời rạc Ξ được sinh thích nghi. Tuy nhiên, cách tiếp cận này là phải chọn tham số hình dạng ε phù hợp, như trong [27] sử dụng một giá trị rất nhỏ $\varepsilon = 10^{-5}$ cho phương pháp Gauss-QR, còn trong [17] cũng đưa ra một số cách chọn ε hiệu quả.

Trong không gian 3 chiều, khi sử dụng các tập giá véc tơ trọng số được chọn bởi các thuật toán chọn tâm, số điểm của tập X nhiều nhất là $n = 17$. Do P_X không suy biến nên phải hạn chế bậc của đa thức $\ell \leq 2$. Thật vậy, không gian các đa thức ba biến

số bậc ℓ có số chiều là $\binom{\ell+3}{3}$, do đó $k \geq 20 > n$ nếu $\ell \geq 3$ và hạng của P_X luôn nhỏ hơn k . Khi $\ell = 2$ thì $k = 10$ hoàn toàn thỏa mãn, nên P_X có hạng bằng số cột khi sử dụng giá véctơ trọng số tìm được bằng các thuật toán chọn tâm trong không gian 3 chiều. Trong các thử nghiệm số, sử dụng hàm RBF

$$\Phi(x) = \varphi(r) = r^5, \quad r = \|x\|, \quad x \in \mathbb{R}^d$$

và đa thức bậc $\ell = 2$. Hàm RBF $\Phi(x) = \varphi(r) = r^5$ là hàm xác định dương bậc 3 [61], không phụ thuộc vào tham số hình dạng, được sử dụng cho phương pháp RBF-FD trong [25].

2.3 Một số thuật toán chọn tâm trong không gian 2 chiều

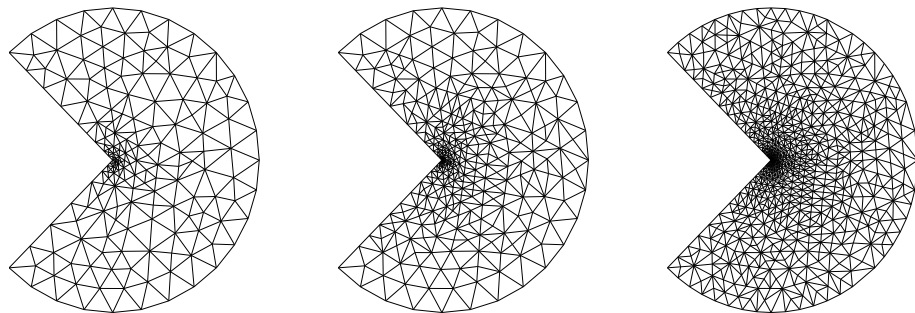
2.3.1 Một số thuật toán chọn tâm phổ biến

- 6near (6-nearest neighbours): Thuật toán này tìm tập Ξ_ζ gồm ζ và 6 điểm gần ζ nhất. Thuật toán được đề xuất trong [37] cho phương pháp sai phân hữu hạn. Với phương pháp RBF-FD, chọn $n = 6$ điểm lân cận để đảm bảo mật độ ma trận $[w_{\zeta, \xi}]$ gần với mật độ ma trận cứng của phương pháp phần tử hữu hạn và sử dụng hàm RBF φ_{IMQ} . Kết quả thử nghiệm số trên các tâm thích nghi của FEM được biểu diễn trong Hình 2.2(a, b).
- nn (Natural neighbours): Thuật toán chọn giá véctơ trọng số Ξ_ζ gồm ζ và đỉnh của các tam giác phân Delaunay có chung đỉnh ζ trong Ξ . Để thực hiện được thuật toán cần tạo lưới tam giác. Thuật toán được giới thiệu trong [10, 62] và mở rộng trong [51]. Kết quả thử nghiệm số trên các tâm thích nghi của phương pháp phần tử hữu hạn được biểu diễn trong Hình 2.2(a, b).
- 4quad (Four quadrants criterium): Thuật toán được đề xuất trong [44] và được sử dụng trong [3, 45]. Thuật toán này được áp dụng cho phương pháp sai phân suy rộng với giá véctơ trọng số $\Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$ được chọn là 8 điểm, trong đó các véctơ trọng số được tìm bằng phương pháp trùng khớp bình phương cực tiểu địa phương bởi các đa thức bậc hai trên Ξ_ζ . Vì số tâm được chọn của tập $\Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$ bằng 8, nên mật độ ma trận của phương pháp cao hơn các phương pháp khác, xem Hình 2.2(b).

- LLF: Thuật toán được giới thiệu trong [41], với bước đầu tiên là tìm khoảng cách lớn nhất d_ζ từ ζ đến các lân cận gần nhất của nó trong $\Xi \setminus \{\zeta\}$, tiếp theo xác định Ξ_ζ gồm các điểm trong Ξ sao cho khoảng cách từ điểm đó đến ζ không vượt quá ρd_ζ , với hằng số $\rho > 0$. Trong thử nghiệm số, ρ được chọn là $\rho = 1.4$ và sử dụng hàm RBF φ_{IMQ} như trong [41]. Kết quả thử nghiệm số trên các tâm thích nghi được biểu diễn trong Hình 2.2(a, b), mật độ ma trận của phương pháp trong Hình 2.2(b) cao hơn đáng kể mật độ ma trận cứng của phương pháp phần tử hữu hạn.
- SLS: Thuật toán được giới thiệu trong [55, Thuật toán A], tập $\Xi_\zeta = \{\zeta, \xi_1, \dots, \xi_5\}$ được chọn gồm 6 điểm, với các điểm ξ_i được chọn từng điểm một sao cho điểm được chọn gần ζ nhất và nằm trong một miền con nào đó xung quanh ζ , thuật toán này có thể xem như là một sự cải tiến của thuật toán 4quad. Kết quả thử nghiệm số trên tâm thích nghi của FEM cho thấy, mật độ ma trận hệ số của thuật toán nhỏ hơn mật độ ma trận cứng của phương pháp phần tử hữu hạn.

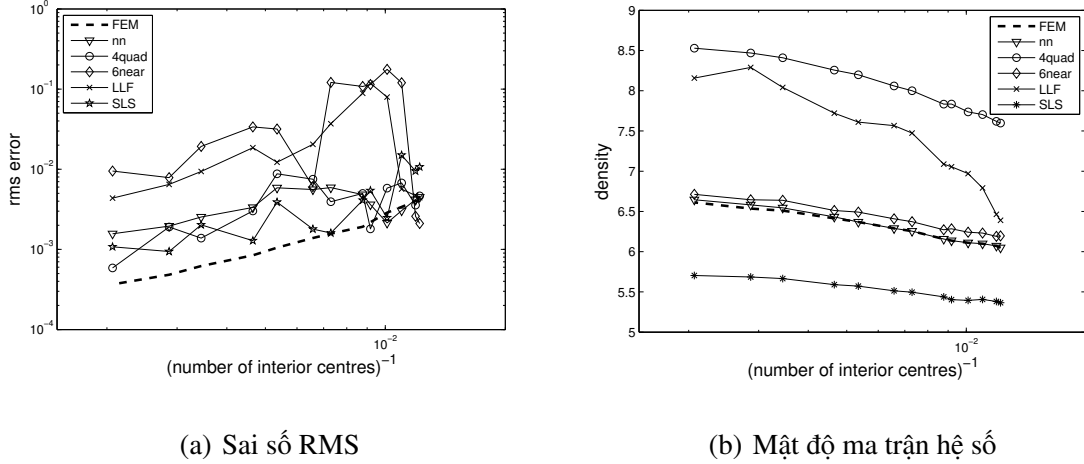
Các thuật toán: 6near, nn, 4quad, LLF, SLS, áp dụng cho phương pháp không lưới RBF-FD được các tác giả giới thiệu trong [16] với bài toán:

Bài toán 1. [50, function adaptmesh] Xét bài toán Dirichlet với phương trình Laplace $\Delta u = 0$ trong miền hình quạt Ω được xác định bởi bất phương trình $r < 1$, $-3\pi/4 < \varphi < 3\pi/4$ trong tọa độ cực, với điều kiện biên Dirichlet được cho bởi $u(r, \varphi) = \cos(2\varphi/3)$ dọc theo cung cong và $u(r, \varphi) = 0$ dọc theo hai đoạn thẳng. Bài toán có nghiệm giải tích là $u(r, \varphi) = r^{2/3} \cos(2\varphi/3)$.



Hình 2.1: Lưới tam giác thích nghi của Bài toán 1.

Các tâm thích nghi trên miền Ω là đỉnh của các tam giác, được tạo bởi PDE Toolbox trong MATLAB [50] của phương pháp phần tử hữu hạn. Tại vị trí lân cận của điểm kỳ dị của nghiệm chính xác thì các điểm lưới được tạo ra nhiều hơn như Hình 2.1.



(a) Sai số RMS

(b) Mật độ ma trận hệ số

Hình 2.2: Sai số RBF-FD trên các tâm thích nghi của FEM, sử dụng các thuật toán chọn giá véc tơ trọng số 6near, nn, 4quad, LLF, SLS. (a) Sai số rms với véc tơ trọng số RBF-FD được tìm bởi nội suy hàm RBF IMQ khi sử dụng các thuật toán chọn 6near và LLF và nội suy hàm RBF Gauss với các trường hợp khác. (b) Mật độ ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2) ứng với các phương pháp RBF-FD và của FEM.

Kết quả thử nghiệm số của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán 6near, nn, 4quad, LLF, SLS và của FEM được trình bày trong Hình 2.2. Hình 2.2(b) biểu diễn mật độ ma trận hệ số density của hệ phương trình (2.2). Mật độ của ma trận $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ là số đầu vào khác không trung bình trên mỗi hàng, được tính bởi công thức

$$\text{density} = \text{nnz}(A)/n, \quad (2.16)$$

trong đó $\text{nnz}(A)$ là tổng số các hệ số khác không của ma trận A . Kết quả của density cho thấy, Thuật toán SLS có mật độ ma trận hệ số nhỏ hơn so với mật độ ma trận hệ số của các thuật toán khác và của FEM.

Hình 2.2(a) là đồ thị biểu diễn sai số trung bình bình phương rms (root mean square) được tính bởi công thức

$$\text{rms} = \sqrt{\frac{1}{\#\mathcal{E}_{\text{int}}} \sum_{\zeta \in \mathcal{E}_{\text{int}}} (\hat{u}_{\zeta} - u(\zeta))^2}, \quad (2.17)$$

trong đó $\#\mathcal{E}_{\text{int}}$ là số tâm của tập \mathcal{E}_{int} . Từ đồ thị cho thấy sai số rms của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán chọn giá véc tơ trọng số 6near, nn, 4quad, LLF,

SLS đều cao hơn sai số rms của phương pháp phần tử hữu hạn, đây là động lực để các tác giả đề xuất thuật toán chọn tâm cho phương pháp RBF-FD trong không gian 2 chiều [16, 48, 49] và phát triển trong không gian 3 chiều [19, 18]. Trong phần tiếp theo chúng tôi sẽ giới thiệu các thuật toán này.

2.3.2 Các thuật toán chọn tâm cho phương pháp không lưới RBF-FD

Thuật toán chọn tâm cho phương pháp không lưới RBF-FD (hay chọn giá véc tơ trọng số Ξ_ζ) được đề xuất đầu tiên trong [16], sau đó được phát triển cho lớp bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm có kỳ dị, hoặc có độ dao động mạnh trong [48] và được cải tiến trong [49]. Kết quả trong các công bố này cho thấy nghiệm của phương pháp RBF-FD khi sử dụng các thuật toán chọn tâm có độ chính xác tốt hơn nghiệm của các phương pháp phần tử hữu hạn. Ý tưởng chung của các thuật toán như sau:

Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, chọn tập các tâm $\Xi_\zeta = \{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\} \subset \Xi$, trong đó các điểm $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ được sắp xếp theo chiều ngược chiều kim đồng hồ đối với ζ . Đặt

$$\mu(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) := \sum_{i=1}^k \alpha_i^2,$$

trong đó α_i là góc giữa hai tia $\zeta\xi_i$ và $\zeta\xi_{i+1}$ theo hướng ngược chiều kim đồng hồ, với chu trình $\xi_{k+i} := \xi_i$. Gọi

$$\underline{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) = \min\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k\}, \quad \bar{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) = \max\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k\},$$

là góc nhỏ nhất và góc lớn nhất. Vì $\sum_{i=1}^k \alpha_i = 2\pi$, nên $\sum_{i=1}^k \alpha_i^2$ đạt giá trị nhỏ nhất khi và chỉ khi $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_k = 2\pi/k$, tức là các tia $\zeta\xi_i$ cách đều nhau nếu $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ được chọn tùy ý trong \mathbb{R}^2 . Tuy nhiên, các điểm này phụ thuộc vào sự phân bố các tâm của tập Ξ , do đó mục tiêu của thuật toán là chọn được bộ tâm $\Xi_\zeta = \{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\} \subset \Xi$ sao cho $\mu(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k)$ đạt cực tiểu, đồng thời vẫn đảm bảo khoảng cách $\|\xi_i - \zeta\|, i = 1, 2, \dots, k$ nhỏ nhất có thể.

a) Thuật toán chọn với số tâm cố định và 1 điều kiện dừng D01

Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, thuật toán chọn tập các tâm địa phương $\Xi_\zeta = \{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\} \subset \Xi$ trong [16, Thuật toán 1] với số tâm được chọn cố định $k = 6$ (gọi tắt là thuật toán chọn D01). Để đạt được μ nhỏ và khoảng cách cũng nhỏ, thuật toán bắt đầu với m điểm

$\xi_i, i = 1, 2, \dots, m$ xung quanh và gần ζ nhất, thuật toán dừng nếu tập $\{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\}$ thỏa mãn

$$\bar{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) \leq v \underline{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k), \quad (2.18)$$

trong đó $m > k$ và $v > 1.0$ là các tham số.

Thuật toán 1 (Thuật toán D01, [16], Thuật toán 1).

Input: Ξ, ζ .

Output: Ξ_ζ .

Parameters: k (the target number of points ξ_i), $m > k$ (the number of points in the local cloud) and $v > 1$ (the angle uniformity tolerance). Parameter values used in our numerical experiments: $k = 6, m = 30, v = 3.0$.

- I. Find m nearest points $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m$ in $\Xi \setminus \{\zeta\}$, sorted by increasing distance to ζ , and initialise $\Xi_\zeta := \{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\}$. If

$$\bar{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) \leq v \underline{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k),$$

then STOP: return Ξ_ζ .

- II. For $i = n + 1, \dots, m$:

1. Compute the angles $\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_{k+1}$ formed by the extended set

$$\{\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_{k+1}\} = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k, \xi_i\}.$$

2. If both angles between $\zeta \xi_i$ and its two neighbouring rays are greater than the minimum angle $\underline{\alpha}' := \underline{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k, \xi_i)$ then:

- a. Find j such that $\alpha'_j = \underline{\alpha}'$. Choose $p = j$ or $p = j + 1$ depending on whether $\alpha'_{j-1} < \alpha'_{j+1}$ or $\alpha'_{j-1} \geq \alpha'_{j+1}$.

- b. If $\mu(\{\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_{k+1}\} \setminus \{\xi'_p\}) < \mu(\xi_1, \dots, \xi_k)$ then:

- i) Update $\{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\} = \{\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_{k+1}\} \setminus \{\xi'_p\}$.

- ii) If $\bar{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) \leq v \underline{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k)$ then

STOP: return the current set $\Xi_\zeta = \{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\}$.

III. Observe that

$$\bar{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) > v\underline{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k)$$

must hold for the current set $\Xi_\zeta = \{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\}$ if the algorithm has not been terminated earlier. Find j such that $\alpha_j = \underline{\alpha}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k)$. Choose $p = j$ or $p = j + 1$ depending on whether $\alpha_{j-1} < \alpha_{j+1}$ or $\alpha_{j-1} \geq \alpha_{j+1}$. STOP: return $\Xi_\zeta = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{k+1}\} \setminus \{\xi_p\}$.

Nhận xét:

Nếu thuật toán kết thúc trước Bước III thì Ξ_ζ có $k + 1$ điểm (bao gồm cả ζ). Trái lại, số điểm là k . Thuật toán chọn $k = 6$ để mật độ ma trận hệ số $[w_{\zeta, \xi}]_{\zeta \in \Xi_{\text{int}}, \xi \in \Xi \setminus \{\zeta\}}$ của hệ phương trình (2.2) xấp xỉ mật độ ma trận cứng của FEM.

Việc chọn p trong Bước II(2)a đảm bảo rằng

$$\mu(\{\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_{k+1}\} \setminus \{\xi'_p\}) = \min \left\{ \mu(\{\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_{k+1}\} \setminus \{\xi'_j\}), \mu(\{\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_{k+1}\} \setminus \{\xi'_{j+1}\}) \right\}.$$

Độ phức tạp của thuật toán chọn tâm D01:

Mệnh đề 2.3.1. Đặt $n := \#\Xi$ là số các tâm rời rạc của Ξ , $N_{\text{int}} := \#\Xi_{\text{int}}$, k là số tâm cần chọn của tập Ξ_ζ và $m > k$ là số tâm gần ζ nhất. Khi đó, độ phức tạp của Thuật toán 1 là $\mathcal{O}(N_{\text{int}} m \log n)$.

Chứng minh. Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$,

- I. Tính chi phí tính toán tại Bước I: Độ phức tạp khi sử dụng thuật toán k-d tree để tìm m điểm ban đầu gần ζ nhất là $\mathcal{O}(m \log n)$ [6, 38, 60], với $n := \#\Xi$.
- II. Chi phí tính toán để loại bỏ điểm "xấu" và kết nạp điểm "tốt" trong $m - k$ tâm còn lại, theo nghĩa các tia liên kề $\zeta \xi_i$ và $\zeta \xi_{i+1}$ tạo thành các góc đều nhất như có thể và đồng thời các tâm ξ_i với $i = 1, 2, \dots, k - 1$ gần tâm ζ nhất như là có thể.
 1. Chi phí tính toán tại Bước II.1 là $\mathcal{O}(k + 1)$.
 2. Chi phí tính toán tại Bước II:
 - a. Chi phí tính toán tại Bước II.2.a là $\mathcal{O}((k + 1)^2)$.
 - b. Chi phí tính toán tại Bước II.2.b là $\mathcal{O}(1)$.

Do đó chi phí tính toán tại Bước II là $\mathcal{O}((m - k) \log((k + 1)^2))$.

III. Chi phí tính toán khi thuật toán không kết thúc sớm là $\mathcal{O}(k^2)$.

Suy ra độ phức tạp thuật toán từ Bước I đến Bước III theo quy tắc cộng là:

$$\mathcal{O}(m \log n) + \mathcal{O}((m - k) \log((k + 1)^2)) + \mathcal{O}(k^2) = \mathcal{O}(m \log n).$$

Vậy độ phức tạp của thuật toán 1 là $\mathcal{O}(N_{\text{int}} m \log n)$, với $N_{\text{int}} = \#\Xi_{\text{int}}$. \square

b) Thuật toán chọn với số tâm cố định và 2 điều kiện dừng ODP1

Thuật toán D01 cùng với thuật toán sinh tâm thích nghi D02 đã được các tác giả đề xuất và đánh giá hiệu quả so với phương pháp phần tử hữu hạn trong [16]. Tuy nhiên với bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm có kỳ dị hoặc hàm vế phải có độ dao động lớn thì độ chính xác của nghiệm xấp xỉ giảm so với phương pháp phần tử hữu hạn sau mỗi lần sinh lưới thích nghi. Hơn nữa, Thuật toán D01 chỉ sử dụng điều kiện dừng về góc (2.18) nên có thể các điểm ở gần không được chọn. Vì vậy trong [48], nhóm tác giả đề xuất thuật toán chọn với số tâm cố định và 2 điều kiện dừng, là thuật toán cải tiến của Thuật toán D01, chúng tôi gọi thuật toán này là thuật toán chọn ODP1.

Thuật toán chọn ODP1 với số tâm cố định và 2 điều kiện dừng có ý tưởng giống như Thuật toán D01, đó là với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, chọn được tập $\Xi_{\zeta} = \{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\} \subset \Xi$ thỏa mãn μ nhỏ và khoảng cách $\|\xi_i - \zeta\|, i = 1, 2, \dots, k$ cũng nhỏ nhất có thể. Thuật toán này cũng dùng số tâm cần chọn cố định $k = 6$ và sử dụng điều kiện dừng về góc (2.18). Ngoài ra các điểm ở gần cũng có thể phù hợp, nên thuật toán chọn tâm trong [48] sử dụng thêm điều kiện dừng thứ hai

$$\|\zeta - \xi\| \geq \frac{c}{2k} \sum_{j=1}^k (\|\xi_j - \zeta\| + \|\xi_j - \xi_{j+1}\|), \quad (2.19)$$

với hệ số $c > 1.0$ và $\xi \in \Xi \setminus \Xi_{\zeta}$.

Thuật toán 2 (Thuật toán ODP1, [48], Thuật toán 1).

Input: Ξ, ζ .

Output: Ξ_{ζ} .

Parameters: k (the number of points in $\Xi_{\zeta} \setminus \{\zeta\}$), $\nu > 1.0$ (the angle uniformity tolerance), $c > 1.0$ (distance tolerance), and $m > k$ (the increment size of the local cloud). Parameter values used in our numerical experiments: $k = 6$, $\nu = 2.5$, $c = 3.0$ and $m = 50$.

I. Find m nearest points ξ_1, \dots, ξ_m in $\Xi \setminus \{\zeta\}$ to ζ , sorted by increasing distance to ζ , and initialize $\Xi_\zeta := \{\zeta, \zeta_1, \dots, \zeta_k\} = \{\zeta, \xi_1, \dots, \xi_k\}$ and $i := k + 1$.

II. While $i \leq m$:

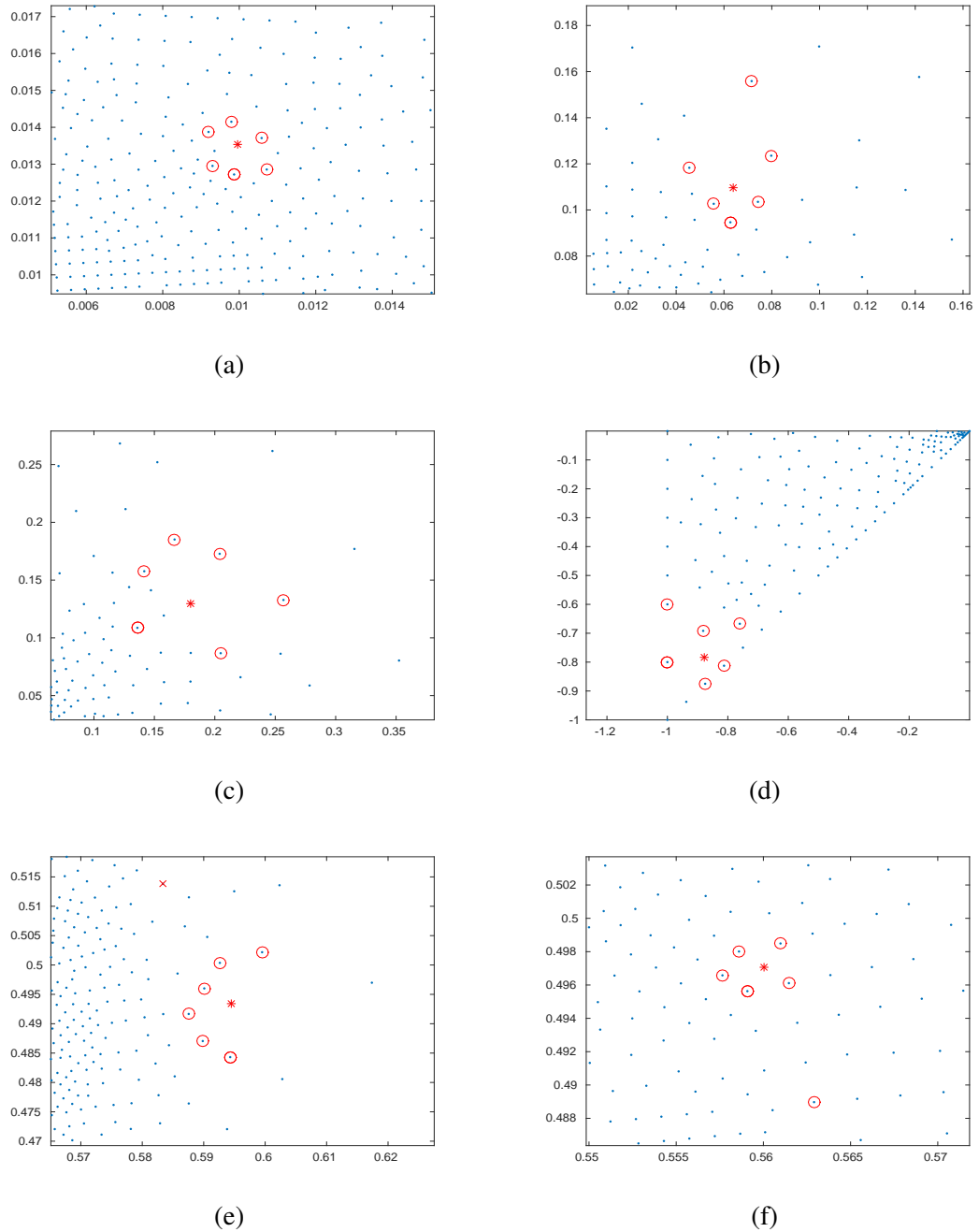
1. If $\|\zeta - \xi_i\| \geq \frac{c}{2k} \sum_{j=1}^k (\|\zeta_j - \zeta\| + \|\zeta_j - \zeta_{j+1}\|)$, then STOP and return Ξ_ζ .
2. Compute the angles $\alpha'_1, \dots, \alpha'_{k+1}$ formed by the extended set $\{\zeta'_1, \dots, \zeta'_{k+1}\} = \{\zeta_1, \dots, \zeta_k, \xi_i\}$. If both angles between $\zeta \xi_i$ and its two neighboring rays are greater than the minimum angle $\underline{\alpha}' := \underline{\alpha}(\zeta'_1, \dots, \zeta'_{k+1})$:
 - i. Find j such that $\alpha'_j = \underline{\alpha}'$. Choose $p = j$ or $p = j + 1$ depending on whether $\alpha'_{j-1} < \alpha'_{j+1}$ or $\alpha'_{j-1} \geq \alpha'_{j+1}$.
 - ii. If $\mu(\{\zeta'_1, \dots, \zeta'_{k+1}\} \setminus \{\zeta'_p\}) < \mu(\zeta_1, \dots, \zeta_k)$:
 - a. Update $\Xi_\zeta := \{\zeta, \zeta_1, \dots, \zeta_k\} = \{\zeta, \zeta'_1, \dots, \zeta'_{k+1}\} \setminus \{\zeta'_p\}$.
 - b. If $\bar{\alpha}(\zeta_1, \dots, \zeta_k) \leq v \underline{\alpha}(\zeta_1, \dots, \zeta_k)$, then STOP and return Ξ_ζ .
3. If $i = m$:

Find the next m nearest points $\xi_{m+1}, \dots, \xi_{2m}$ in $\Xi \setminus \{\zeta\}$ to ζ , sorted by increasing distance to ζ , and set $m := 2m$.
4. Set $i := i + 1$.

Nhận xét:

Các Hình 2.3(a–d) biểu diễn các cấu trúc của tập Ξ_ζ thu được từ Thuật toán ODP1 trong các thử nghiệm. Việc chọn các tham số c và v sao cho cải tiến được góc đều α_i và tránh kết nạp các điểm quá xa. Hình 2.3(e) là một ví dụ của tập Ξ_ζ thỏa mãn điều kiện dừng tại Bước II.1 của Thuật toán ODP1, tâm ξ_i ($i = 52$) hình chữ "x" thỏa mãn điều kiện dừng (2.19) và vì vậy không cải thiện độ đều của các góc, trong trường hợp này thì $\bar{\alpha}/\underline{\alpha} = 4.3343 > v$. Hình 2.3(f) minh họa một ví dụ khác, trong đó điều kiện dừng tại Bước II.2.ii.b sao cho $\bar{\alpha}/\underline{\alpha} = 2.4410 < v$, nó đạt được tập Ξ_ζ với một tâm ở xa (dấu chấm tròn gần cuối).

Để kiểm tra chất lượng phân bố đều các điểm trong $\Xi_\zeta = \{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n\}$ được chọn bởi Thuật toán ODP1, các tác giả đã đưa ra một số giá trị sau: v_{\max} là lớn nhất và v_{aver} là giá trị trung bình của tỉ số $\bar{\alpha}/\underline{\alpha}$ trên tất cả Ξ_ζ , c_{\max} và c_{aver} là giá trị lớn nhất



Hình 2.3: Cấu trúc Ξ_ζ thu được bởi Thuật toán ODP1. Dấu "*" biểu diễn vị trí của ζ và các hình tròn " \odot " là vị trí của các điểm $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_6$.

và giá trị trung bình của tỉ số

$$\max_{j=1,\dots,n} \|\zeta - \xi_j\| / \frac{1}{2n} \sum_{j=1}^n (\|\xi_j - \zeta\| + \|\xi_j - \xi_{j+1}\|). \quad (2.20)$$

Độ phức tạp của thuật toán chọn tâm ODP1:

Mệnh đề 2.3.2. Ký hiệu $n := \#\Xi$, $N_{\text{int}} := \#\Xi_{\text{int}}$, k là số tâm cần chọn của tập Ξ_ζ và $m > k$ là số tâm gần ζ nhất được chọn ban đầu. Khi đó, độ phức tạp của Thuật toán ODP1 là $\mathcal{O}(N_{\text{int}}m \log n)$.

Chứng minh. Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$,

I. Tương tự Thuật toán D01, chi phí tính toán khi sử dụng thuật toán k-d tree để tìm m điểm gần ζ nhất ban đầu là $\mathcal{O}(m \log n)$, với $n := \#\Xi$ [6, 38, 60]. Thời gian xác định tập ban đầu Ξ_ζ là $\mathcal{O}(1)$. Do đó chi phí tính toán tại Bước I là $\mathcal{O}(m \log n)$.

II. Chi phí tính toán tại Bước II:

1. Chi phí tính toán đối với bước II.1 là $\mathcal{O}(1)$.
2. Chi phí tính toán để chèn thêm một tâm mới tại Bước II.2 nếu thuật toán không dừng lại tại Bước II.1 là $\mathcal{O}(1)$.
3. Chi phí tính toán khi thuật toán không kết thúc tại Bước II.2 là $\mathcal{O}(m \log n)$.
4. Chi phí tính toán tại Bước II.4 là $\mathcal{O}(1)$.

Do đó độ phức tạp thuật toán tại Bước II theo quy tắc cộng là $\mathcal{O}(m \log n)$. Suy ra độ phức tạp thuật toán từ Bước I đến Bước II là $\mathcal{O}(m \log n)$.

Vậy độ phức tạp của Thuật toán ODP1 là $\mathcal{O}(N_{\text{int}}m \log n)$, với $N_{\text{int}} := \#\Xi_{\text{int}}$. □

c) Thuật toán chọn với số tâm thay đổi và 1 điều kiện dừng OT1

Thuật toán chọn D01 [16, Thuật toán 1] và Thuật toán chọn ODP1 [48, Thuật toán 1] chọn được tập Ξ_ζ với số tâm cố định là $k = 6$, đã cho các kết quả tốt. Tuy nhiên, quan sát các hình 2.3(d, f), tập các tâm Ξ_ζ sẽ đều và gần ζ hơn nếu chọn $k = 4$, hoặc $k = 5$, hơn nữa có thể chọn $k = 7$ hoặc $k = 8$. Vì vậy, trong thuật toán này chúng tôi đã cải tiến và không cố định giá trị của k . Thuật toán được công bố trong [49, Thuật

toán 2] và được gọi là Thuật toán chọn OT1 có số tâm cần chọn thay đổi với 1 điều kiện dừng.

Thuật toán cũng bắt đầu với m điểm $\Xi_0^m := \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m\} \subset \Xi \setminus \{\zeta\}$ thỏa mãn $\|\zeta - \xi_1\| \leq \|\zeta - \xi_2\| \leq \dots \leq \|\zeta - \xi_m\|$ và $\|\zeta - \xi_i\| \leq \|\zeta - \xi_j\|$ với $\xi_i \in \Xi_0^m, \xi_j \in \Xi \setminus \{\Xi_0^m \cup \{\zeta\}\}$, thuật toán sử dụng 1 điều kiện dừng

$$\bar{\alpha}(\Xi_\zeta) - \underline{\alpha}(\Xi_\zeta) \leq \delta, \quad (2.21)$$

trong đó hằng số $\delta \in (0, \pi/2)$, giá trị của δ thể hiện sự khác biệt giữa góc lớn nhất $\bar{\alpha}$ và góc nhỏ nhất $\underline{\alpha}$. Kỹ thuật này làm giảm sự chênh lệch giữa góc lớn nhất $\bar{\alpha}$ và góc nhỏ nhất $\underline{\alpha}$ so với điều kiện dừng của các thuật toán chọn tâm D01 và ODP1 (xem Bảng 3.3, Chương 3). Với mục đích là chọn được tập các điểm $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ có khoảng cách gần ζ nhất và phân bố đều xung quanh tâm ζ . Thuật toán gồm hai pha, cụ thể như sau:

- Đầu tiên là xác định số tâm k cần chọn của tập giá véctor trọng số Ξ_ζ , từ 4 điểm đến 8 điểm. Vì 4 điểm ứng với lược đồ của phương pháp sai phân hữu hạn, nên giá trị của δ trong (2.21) nhỏ (gần bằng 0). Giá trị của δ tăng khi k tăng từ 5 điểm lên 6 điểm và sau đó giảm khi k tăng từ 7 điểm lên 8 điểm.
- Pha 1 bắt đầu bằng việc chọn k điểm gần nhất ζ (bắt đầu với $k = 4$). Nếu tập này thỏa mãn điều kiện dừng (2.21) với giá trị δ ứng với $k = 4$, thì thuật toán dừng và chọn được tập giá véctor trọng số k điểm. Nếu không, tăng k lên một đơn vị và lặp lại cho đến khi tập các tâm ứng viên đáp ứng tiêu chí dừng (2.21) hoặc số lượng của chúng vượt ngưỡng cho trước. Nếu thuật toán dừng lại ở giai đoạn này thì tập giá véctor trọng số chọn được là tối ưu, tức là các tâm được chọn gần ζ nhất và phân phối đều xung quanh ζ . Giai đoạn này có chi phí thấp. Nếu không có bộ tâm ứng viên nào thỏa mãn (2.21) thì chuyển sang Pha 2.
- Pha 2, chúng tôi giảm số lượng tâm của bộ tâm ứng viên trong Pha 1 từng bước. Các tâm ứng viên ξ được chọn hoặc loại bỏ như trong Bước II.2.i.a của Thuật toán D01 hoặc Bước II.2.ii.a của Thuật toán ODP1 theo tiêu chí dừng (2.21). Nếu tất cả các tâm ứng viên ξ đã được xem xét nhưng không có tập Ξ_ζ nào thỏa mãn (2.21) thì

- Nếu không có tâm ứng viên ξ nào được thay thế trong Pha 2 hoặc $\bar{\alpha}(\Xi_\zeta) < \pi$, trong đó Ξ_ζ là tập các tâm cuối cùng trong Pha 1, thuật toán sẽ kết thúc và chọn tập các tâm này là giá vé tơ trọng số, nó có số tâm lớn nhất.
- Các trường hợp khác, thuật toán cũng trả về tập Ξ_ζ có số tâm lớn nhất với ít nhất một tâm đã được thay thế.

Bằng cách thay đổi k (số tâm được chọn của tập Ξ_ζ), thuật toán sẽ xác định được bộ tâm tốt nhất theo nghĩa khoảng cách từ các tâm được chọn đến gốc ζ không quá xa và có phân bố đều nhất có thể xung quanh ζ . Hơn nữa, có ít khả năng chèn một tâm ở xa ζ . Giả sử, đầu tiên chọn $k = 4$, với các tâm ứng viên $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ gần ζ nhất. Nếu 4 tâm này đáp ứng tiêu chí (2.21) thì thuật toán dừng và $\Xi_\zeta := \{\zeta\} \cup \{\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4\}$. Nếu ở bước thứ i , các tâm ứng viên $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{i+3}$ không thỏa mãn điều kiện (2.21), thuật toán giữ nguyên tập $\Xi^{(i)}$, tăng i thêm 1 và chọn $i+3$ tâm gần ζ nhất, Quá trình kết thúc khi tập $\Xi^{(i)}$ thỏa mãn (2.21) hoặc i đạt đến ngưỡng ν . Các bước này được gọi là Pha 1 của Thuật toán 3.

Pha 2 chỉ được thực hiện khi thuật toán không kết thúc tại Pha 1, thuật toán sẽ giảm số tâm của $\Xi^{(i)}$ từ $\nu + 3$ xuống còn 4 và các tâm ứng viên ξ được xem xét tương tự như trong các bước II.1, II.2.i và II.2.i.a của Thuật toán D01 hoặc các bước II.2.i và II.2.ii.a của Thuật toán ODP1 nhưng với điều kiện dừng (2.21). Pha 2 sẽ bắt đầu từ Bước IIa của Thuật toán 3.

Thuật toán 3 (Thuật toán OT1, [49], Thuật toán 1).

Input: Ξ, ζ .

Output: Ξ_ζ .

Parameters: m (the number of points in the local cloud), $\nu \in \{3, 4, 5\}$ (the number of points in $\Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$), and $\delta := \{\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_\nu\}$ (the angle uniformity tolerance). In our experiments, $m = 200$ and $\delta := \{0.0001, \pi/4, \pi/3, \pi/4, \pi/8\}$.

Ia. Determine the set $\Xi_0^m := \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m\}$. Initialize $I := \emptyset$ and $i := 0$.

Ib. *While* $i \leq \nu$:

1. Set $i := i + 1$ and $\Xi^{(i)} := \Xi_0^k \cup \{\zeta\}$ where $k = i + 3$ and $k_c^{(i)} := i + 4$.
2. *If* $\bar{\alpha}(\Xi^{(i)}) - \underline{\alpha}(\Xi^{(i)}) \leq \delta_i$, *then STOP* and return $\Xi_\zeta := \Xi^{(i)}$.

IIa. While $k_c^{(v)} \leq m$ and $i \geq 1$

1. Compute the angles $\alpha'_1, \dots, \alpha'_{i+4}$ formed by the extended set $\Xi'^{(i)} := \Xi^{(i)} \cup \{\xi_{k_c^{(i)}}\}$.
2. If angles between $\zeta \xi_{k_c^{(i)}}$ and its two neighboring rays are greater than $\underline{\alpha}'(\Xi'^{(i)})$, then:
 - i. Find j such that $\alpha'_j = \underline{\alpha}'(\Xi'^{(i)})$, and then choose $p = j$ or $p = j + 1$ depending on whether $\alpha'_{j-1} < \alpha'_{j+1}$ or $\alpha'_{j-1} \geq \alpha'_{j+1}$, respectively.
 - ii. If $\mu(\Xi'^{(i)} \setminus \{\xi'_p\}) < \mu(\Xi^{(i)})$, then:
 - a. Update $\Xi^{(i)} := \Xi'^{(i)} \setminus \{\xi'_p\}$ and $I := I \cup \{i\}$.
 - b. If $\bar{\alpha}(\Xi^{(i)}) - \underline{\alpha}(\Xi^{(i)}) \leq \delta_i$, then STOP and return $\Xi_\zeta := \Xi^{(i)}$.
3. If $i = 1$, then $k_c^{(v)} := k_c^{(v)} + 1$ and $i := v$, Else $i := i - 1$.

IIb. If $\bar{\alpha}(\Xi_0^k) < \pi$ or $I = \emptyset$, then $\Xi_\zeta = \Xi_0^k \cup \{\zeta\}$ where $k = v + 3$, Else $\Xi_\zeta := \Xi^{(i)}$ where $i := \max(\{I\})$.

Nhận xét:

1. Tại mỗi vòng lặp thứ i của Bước IIa, tập $\Xi^{(i)}$ gồm $k + 1$ điểm $\{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\}$, trong đó $k = i + 3$.
2. Nếu tập Ξ_ζ được trả về tại Bước Ib thì $\Xi_\zeta = \{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\}$, trong đó $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ là k điểm gần ζ nhất. Nếu Ξ_ζ được trả về tại Bước IIa thì Ξ_ζ có ít nhất 1 điểm ξ' được thay thế bằng điểm ξ với $\|\xi' - \zeta\| \leq \|\xi - \zeta\|$, điểm mới ξ giúp cho μ của tập các tâm mới nhỏ hơn, vì thế các điểm $\xi \in \Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$ có phân bố đều hơn xung quanh ζ .
3. Bước IIa chỉ thực hiện khi Bước Ib kết thúc nhưng $\bar{\alpha}(\Xi^{(i)}) - \underline{\alpha}(\Xi^{(i)}) > \delta_i$ với $i = v$, do đó nó không trả về tập Ξ_ζ . Vì vậy $i = v$ khi bắt đầu Bước IIa.
4. Trong trường hợp thuật toán không trả về tập Ξ_ζ hoặc không có tập $\Xi^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, v$ nào được cập nhật tại Bước IIa, thì Ξ_ζ vẫn gồm các điểm gần ζ nhất nếu nó thoả mãn $\bar{\alpha}(\Xi_0^{v+3}) < \pi$. Nếu không, Ξ_ζ là tập có số điểm được chọn lớn nhất, trong đó tâm gần ζ được thay thế bằng tâm xa ζ hơn và các điểm $\xi \in \Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$ được phân bố đều xung quanh ζ hơn.

5. Để đánh giá tính đều và chi phí tính toán khi tìm tập các tâm Ξ_ζ bởi Thuật toán 3, chúng tôi xác định một số giá trị sau. Với một bộ tâm $\Xi_\zeta = \{\zeta, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\}$, gọi

- $\underline{\alpha}_{\text{aver}}$ là giá trị trung bình của $\underline{\alpha}$ trên tất cả các Ξ_ζ , (xem Bảng 3.3, Chương 3).
- δ_{aver} là giá trị trung bình của hiệu $\bar{\alpha} - \underline{\alpha}$ trên tất cả các Ξ_ζ , (xem Bảng 3.3, Chương 3).
- c_{max} và c_{aver} lần lượt là giá trị lớn nhất và giá trị trung bình của thương, (xem [48, Section 4] và Bảng 3.3, Chương 3).

$$c_{\text{max}} := \max_{\zeta \in \Xi_{\text{int}}} \left\{ \max_{j=1, \dots, k} \|\zeta - \xi_j\| / \frac{1}{2k} \sum_{j=1}^k (\|\xi_j - \zeta\| + \|\xi_j - \xi_{j+1}\|) \right\},$$

$$c_{\text{aver}} := \frac{1}{\#\Xi_{\text{int}}} \sum_{\zeta \in \Xi_{\text{int}}} \left\{ \max_{j=1, \dots, k} \|\zeta - \xi_j\| / \frac{1}{2k} \sum_{j=1}^k (\|\xi_j - \zeta\| + \|\xi_j - \xi_{j+1}\|) \right\}. \quad (2.22)$$

- i_{aver} và k_{aver} là giá trị trung bình của $k_c^{(v)}$ và $\#(\Xi_\zeta \setminus \{\zeta\})$ trên tất cả ζ tương ứng, (xem Bảng 3.3, Chương 3).
- p_1 là phần trăm số lần Thuật toán 3 dừng ở Bước Ib. Giá trị này càng cao thì chi phí tính toán càng thấp. Giá trị thu được của p_1 tỷ lệ nghịch với i_{aver} , $k_c^{(i)}$ và δ_{aver} , (xem Bảng 3.3, Chương 3).

Độ phức tạp của thuật toán chọn tâm OT1:

Mệnh đề 2.3.3. Đặt $n = \#\Xi$, k là số tâm cần chọn của tập Ξ_ζ . Giả sử đầu vào của Thuật toán OT1 là các tập Ξ_0^m , ($m > k$). Khi đó độ phức tạp tính toán của Thuật toán OT1 là $\mathcal{O}(n)$.

Chứng minh. Để xác định độ phức tạp của Thuật toán OT1, ta xác định thời gian tính toán của hai công đoạn chính là bước khởi tạo và bước chọn tập các tâm Ξ_ζ .

- Bước khởi tạo:

Để xác định tập Ξ_0^m , thuật toán sử dụng thuật toán k-d tree để tìm m điểm gần ζ nhất ban đầu, nên độ phức tạp tính toán tại bước khởi tạo là $\mathcal{O}(mn \log n)$, với $n := \#\Xi$ [6, 38, 60].

- Thời gian chọn tập các tâm Ξ_ζ bằng Thuật toán OT1:

I. Tính chi phí tính toán tại Pha 1:

Bước Ia chỉ thực hiện 1 lần nên có thời gian tính toán là $\mathcal{O}(1)$.

Giả sử Bước Ib được thực hiện với $v \leq 5$, khi đó thời gian tính toán của nó cũng $\mathcal{O}(1)$.

Do đó tổng thời gian tính toán tại Bước Ia và Ib là $\mathcal{O}(1)$. Bảng 3 cho thấy các thử nghiệm số của chúng tôi có 70% trường hợp thuật toán kết thúc tại Bước Ib của Pha 1.

II. Tính chi phí tính toán tại Pha 2:

Với những trường hợp thuật toán thực hiện Bước IIa: Kết thúc Pha 1 thì $k_c^{(v)} \leq 8$, Bảng 3 cho thấy các giá trị trung bình của i_{aver} và $k_c^{(v)}$ thường nhỏ hơn 8. Vì vậy, thời gian trung bình của Bước IIa là $\mathcal{O}(1)$.

Bước IIb chỉ thực hiện một lần, vì vậy chi phí tính toán là $\mathcal{O}(1)$. Bảng 3 cho thấy có khoảng 30% các trường hợp trong các thử nghiệm Thuật toán OT1 kết thúc tại Bước IIb (Pha 2).

Do đó nếu phải thực hiện các Bước IIa và IIb thì tổng thời gian để chọn bộ tâm Ξ_ζ khi sử dụng Thuật toán OT1 là $\mathcal{O}(1)$.

Vậy nếu đầu vào của thuật toán là các tập Ξ_0^m (tập m gần ζ nhất), thì tổng thời gian tìm tập Ξ_ζ của thuật toán OT1 là $\mathcal{O}(n)$.

□

2.4 Một số thuật toán chọn tâm trong không gian 3 chiều

Các tập giá véctơ trọng số Ξ_ζ có thể được chọn với cấu trúc đơn giản là k điểm gần ζ nhất (thuật toán k láng giềng gần). Để đảm bảo độ chính xác của nghiệm xấp xỉ \hat{u} thì số điểm lân cận k được chọn phải đủ lớn, trừ khi Ξ là tập đều địa phương, đây là vấn đề lớn khi tạo các điểm của miền rời rạc trong không gian 3 chiều. Số k điểm lân cận cũng ảnh hưởng trực tiếp đến mật độ ma trận của hệ (2.2), thường là $k + 1$ điểm khác không trên mỗi hàng của hệ phương trình (2.2). Do đó một trong những mục tiêu quan trọng của các phương pháp không lưới là giữ k nhỏ nhất có thể. Ngay cả khi sử dụng thuật toán chọn Ξ_ζ tốt kém hơn, thì tính toán song song để giải hệ phương trình tuyến tính thưa (2.2) sẽ giải quyết vấn đề này đối với các bài toán có dữ liệu lớn.

Tương tự như trong không gian 2 chiều [16, 48, 49], mục tiêu của các thuật toán chọn tâm trong không gian 3 chiều như sau: Với mỗi tâm $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, chọn được tập các tâm hỗ trợ $\{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\}$ xung quanh gốc ζ thỏa mãn 2 điều kiện đều và gần ζ nhất có thể. Trong phần này chúng tôi sẽ trình bày một số thuật toán chọn tâm hỗ trợ phương pháp không lưới RBF-FD trong không gian 3 chiều được công bố trong [19, 18].

2.4.1 Thuật toán k -near

Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, thuật toán chọn giá véc tơ trọng số $\Xi_\zeta = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\}$ là k điểm thuộc $\Xi \setminus \{\zeta\}$ gần ζ nhất. Đây là thuật toán có chi phí rẻ nhất và được sử dụng phổ biến nhất. Thuật toán này đã được các tác giả giới thiệu cho phương pháp RBF-FD trong không gian 2 chiều trong [16] với $k = 6$. Trong không gian 3 chiều [18], k được chọn bằng 16 để mật độ ma trận hệ số $[w_{\zeta, \xi}]$ xấp xỉ mật độ của ma trận cứng của FEM, k nhỏ hơn dẫn đến sai số lớn hơn đáng kể. Trong [19] các thử nghiệm số được thực hiện với $k = 20$, nên mật độ ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2) xấp xỉ 20, bên cạnh đó, trong một số thử nghiệm số chúng tôi còn kiểm tra hiệu quả của thuật toán với $k = 30$ (30near) và $k = 40$ (40near).

2.4.2 Thuật toán dựa trên các tứ diện tet

Thuật toán dựa trên kết quả rời rạc miền Ω bằng các tứ diện và tập Ξ là tập gồm tất cả các đỉnh của tứ diện. Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, thuật toán chọn giá véc tơ trọng số Ξ_ζ gồm ζ và các điểm $\{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k\} \subset \Xi \setminus \{\zeta\}$ là đỉnh của tất cả các tứ diện có chung đỉnh ζ . Điều đó dẫn đến mật độ ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2) bằng mật độ của ma trận cứng của phương pháp phần tử hữu hạn [18]. Thuật toán đơn giản, dễ thực hiện và cho kết quả khá tốt với các bài toán có miền hình học phức tạp, tuy nhiên với miền có tâm phân bố đều thì thuật toán cho kết quả không tốt và không ổn định. Mặc dù cách tiếp cận này không thực hiện được khi miền rời rạc không có lưới vì nó dựa trên lưới tứ diện, nhưng có thể thu được Ξ_ζ tương tự bởi các tứ diện có thể được tạo ra trong lân cận của ζ , điều này có thể vượt qua các rào cản chính của việc tạo lưới. Thuật toán chọn tập Ξ_ζ trung bình khoảng 16 điểm trong các thử nghiệm số.

2.4.3 Thuật toán dựa trên các Octant

Trong các nghiên cứu [16, 48], các tác giả đã phát triển các thuật toán chọn tâm và sinh tâm thích nghi cho phương pháp không lưới RBF-FD giải phương trình elliptic trong không gian 2 chiều, với các tập giá véctơ trọng số được chọn gồm 7 điểm (tức là $k = 6$), điều đó dẫn đến mật độ ma trận của hệ phương trình (2.2) tương tự như mật độ ma trận cứng của phương pháp phần tử hữu hạn với các hàm tuyến tính.

Trong phần này, chúng tôi sẽ giới thiệu các thuật toán chọn giá véctơ trọng số dựa trên các Octant trong không gian 3 chiều, được công bố trong [18], là tổng quát của thuật toán trong không gian 2 chiều được giới thiệu trong [44], đó là thuật toán chia 8 Octant và thuật toán chia 16 Octant. Với thuật toán chia 8 Octant, hai điểm gần nhất trong mỗi Octant có tâm tại ζ sẽ được chọn hoặc với thuật toán chia 16 Octant, điểm gần nhất trong mỗi Octant sẽ được chọn. Trong cả hai trường hợp đều chọn $k = 16$, nên trong các thử nghiệm số mật độ ma trận hệ số của hệ (2.2) xấp xỉ mật độ ma trận cứng của phương pháp phần tử hữu hạn trong không gian 3 chiều.

a) Thuật toán 8-Octants

Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, mục tiêu của thuật toán là chọn các điểm $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k \in \Xi$ xung quanh gốc ζ sao cho khoảng cách $\|\zeta - \xi_i\|$, $i = 1, 2, \dots, k$ là nhỏ, trong khi vẫn giữ được các điểm $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ đều nhất có thể. Để đạt được mục tiêu đó, chúng tôi tính toán và phân hoạch tập m điểm gần nhất $\{\xi_1, \dots, \xi_m\} \subset \Xi \setminus \{\zeta\}$ vào 8 Octant có gốc tại ζ , sau đó chọn 2 điểm gần nhất trên mỗi Octant. Khi đó Ξ_ζ gồm ζ và các điểm đã được chọn.

Trong hệ trục tọa độ Euclide 3 chiều, mỗi Octant trong 8 Octant có gốc ζ được xác định bởi dấu của các thành phần tọa độ của véctơ $\vec{\zeta\xi}_i = \xi_i - \zeta := (x_i, y_i, z_i)$, $i = 1, 2, \dots, m$ ($m > k$), trong đó $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m$ là m điểm gần ζ nhất trong $\Xi \setminus \{\zeta\}$. Ký hiệu Octant thứ j là O_j , $j = 1, 2, \dots, 8$, mỗi Octant được xác định bằng dấu của véctơ $\xi_i - \zeta$ tương ứng trong Bảng 2.1, trong đó dấu '+' chứa cả giá trị bằng 0.

Ý tưởng của thuật toán 8-Octants là chọn 2 điểm gần ζ trong mỗi Octant cho tập Ξ_ζ . Ta bắt đầu với m điểm $\{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m\} \subset \Xi \setminus \{\zeta\}$ gần ζ nhất (trong thử nghiệm $m = 99$ để tập này có 100 điểm gồm cả ζ). Các điểm này được phân hoạch trên các Octant và 2 điểm gần nhất sẽ được chọn vào tập Ξ_ζ (nếu có). Nếu tất cả các Octant có đủ 2 điểm thì tập Ξ_ζ có 17 điểm kể cả ζ . Nếu các Octant không chứa điểm nào hoặc

Bảng 2.1: Bảng chia 8 Octant

Các Octant	x	y	z
O ₁	+	+	+
O ₂	+	+	-
O ₃	+	-	+
O ₄	+	-	-
O ₅	-	+	+
O ₆	-	+	-
O ₇	-	-	+
O ₈	-	-	-

có 1 điểm thì tập Ξ_ζ có ít hơn 17. Nếu đoạn thẳng nối ζ với điểm ξ_i chứa điểm không thuộc Ω thì ξ_i được thay thế bằng điểm gần nhất trên biên (điều này chỉ xảy ra khi Ω là miền không lồi, xem ví dụ Bài 9 phía sau). Các điểm biên được chọn nằm trong tập Ξ'_ζ và được thêm vào miền rời rạc Ξ sau khi kết thúc quá trình tìm tập Ξ_ζ với tất cả các điểm ζ nằm trong miền.

Thuật toán 4 (Thuật toán 8-Octants, [18], Thuật toán 1).

Input: $\Xi, \zeta \in \Xi_{\text{int}}$.

Output: Ξ_ζ, Ξ'_ζ .

Parameter: $m \geq 16$ (the number of nodes in the local cloud excluding ζ); we use $m = 99$ in our numerical experiments.

Initialization: $\Xi_\zeta := \{\zeta\}, \Xi'_\zeta := \emptyset$.

- I. Find m points $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m$ in $\Xi \setminus \{\zeta\}$ closest to ζ .
- II. Distribute the points $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m$ into eight sets $O_j = \{\xi_{j1}, \xi_{j2}, \dots\}$, $j = 1, 2, \dots, 8$, corresponding to the octants in Table 2.1, such that $\|\xi_{j1} - \zeta\| \leq \|\xi_{j2} - \zeta\| \leq \dots$.
- III. For $j = 1$ to 8
 - a. If $\#O_j = 1$ then $\Xi_\zeta := \Xi_\zeta \cup \{\xi_{j1}\}$.
 - b. ElseIf $\#O_j > 1$ then $\Xi_\zeta := \Xi_\zeta \cup \{\xi_{j1}, \xi_{j2}\}$.
- IV. For each $\xi \in \Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$ consider the segment $(\zeta, \xi) = \{\zeta + \alpha(\xi - \zeta) : 0 < \alpha < 1\}$.
If $(\zeta, \xi) \cap \partial\Omega \neq \emptyset$, then $\Xi_\zeta := \Xi_\zeta \setminus \{\xi\} \cup \{\xi'\}$ and $\Xi'_\zeta := \Xi'_\zeta \cup \{\xi'\}$, where ξ' is the point in $(\zeta, \xi) \cap \partial\Omega$ closest to ζ .

Sau khi áp dụng Thuật toán 8-Octants cho tất cả các điểm $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, ta cập nhật tập Ξ bởi công thức

$$\Xi := \Xi \cup \bigcup_{\zeta \in \Xi_{\text{int}}} \Xi'_{\zeta}.$$

b) Thuật toán 16-Octants

Bằng cách tương tự, chúng tôi chia đôi mỗi Octant trong 8 Octant bởi một mặt phẳng, khi đó ta có thuật toán 16-Octants với một điểm gần nhất trong mỗi Octant sẽ được chọn. Cụ thể, phân hoạch các điểm $\{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m\}$ vào 16 Octant có gốc ζ được xác định bởi dấu của tọa độ véc tơ $\vec{\xi}_i \zeta = \zeta - \xi_i := (x_i, y_i, z_i)$, $i = 1, 2, \dots, m$ ($m > k$) và các giá trị $x_i - y_i$, $x_i - z_i$, $y_i - z_i$ tương ứng trong Bảng 2.2. Khi đó điểm gần nhất trên mỗi Octant không rỗng sẽ được chọn vào tập Ξ_{ζ} và Ξ_{ζ} có nhiều nhất 17 điểm.

Bảng 2.2: Bảng chia 16 Octant

Các Octant	x	y	z	Điều kiện
O_1	+	+	+	$x \geq y$
O_2	+	+	+	$x < y$
O_3	+	+	-	$x \geq y$
O_4	+	+	-	$x < y$
O_5	+	-	+	$x \geq z$
O_6	+	-	+	$x < z$
O_7	+	-	-	$-y \geq -z$
O_8	+	-	-	$-y < -z$
O_9	-	+	+	$y \geq z$
O_{10}	-	+	+	$y < z$
O_{11}	-	+	-	$-x \geq -z$
O_{12}	-	+	-	$-x < -z$
O_{13}	-	-	+	$-x \geq -y$
O_{14}	-	-	+	$-x < -y$
O_{15}	-	-	-	$-x \geq -z$
O_{16}	-	-	-	$-x < -z$

Thuật toán 5 (Thuật toán 16-Octants, [18], Thuật toán 2).

Input: $\Xi, \zeta \in \Xi_{\text{int}}$.

Output: Ξ_ζ, Ξ'_ζ .

Parameter: $m \geq 16$ (the number of nodes in the local cloud excluding ζ); we use $m = 99$ in our numerical experiments.

Initialization: $\Xi_\zeta := \{\zeta\}, \Xi'_\zeta := \emptyset$.

- I. Find m points $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m$ in $\Xi \setminus \{\zeta\}$ closest to ζ .
- II. Distribute the points $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m$ into 16 sets $O_j = \{\xi_{j1}, \xi_{j2}, \dots\}$, $j = 1, 2, \dots, 16$, corresponding to the half-octants in Table 2.2, such that $\|\xi_{j1} - \zeta\| \leq \|\xi_{j2} - \zeta\| \leq \dots$.
- III. For $j = 1$ to 16.
If $\#O_j \geq 1$ then $\Xi_\zeta := \Xi_\zeta \cup \{\xi_{j1}\}$.
- IV. For each $\xi \in \Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$ consider the segment (ζ, ξ) .
If $(\zeta, \xi) \cap \partial\Omega \neq \emptyset$, then $\Xi_\zeta := \Xi_\zeta \setminus \{\xi\} \cup \{\xi'\}$ and $\Xi'_\zeta := \Xi'_\zeta \cup \{\xi'\}$, where ξ' is the point in $(\zeta, \xi) \cap \partial\Omega$ closest to ζ .

Sau khi áp dụng Thuật toán 16-Octants cho tất cả các điểm $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, ta cập nhật Ξ bởi công thức

$$\Xi := \Xi \cup \bigcup_{\zeta \in \Xi_{\text{int}}} \Xi'_\zeta.$$

c) Độ phức tạp của các thuật toán chọn tâm 8-Octants và 16-Octants:

Mệnh đề 2.4.1. Đặt $n = \#\Xi$. Khi đó độ phức tạp tính toán của Thuật toán 4 và Thuật toán 5 là $\mathcal{O}(mn \log n)$, với m là số điểm được chọn ban đầu.

Chứng minh. • Bước khởi tạo: Độ phức tạp khi sử dụng thuật toán k-d tree để tìm m điểm gần ζ nhất ban đầu là $\mathcal{O}(mn \log n)$, với $n := \#\Xi$ [6, 38, 60].

- Thời gian phân bố m điểm vào 8 Octant hoặc 16 Octant là $\mathcal{O}(1)$.
- Thời gian để chọn 2 điểm trên 8 Octant hoặc 1 điểm trên 16 Octant là $\mathcal{O}(1)$.
- Thời gian để loại đi điểm ngoài miền địa phương là $\mathcal{O}(1)$ [34].

Vậy tổng thời gian tìm tập Ξ_ζ của Thuật toán 4 và Thuật toán 5 là $\mathcal{O}(mn \log n)$.

□

2.4.4 Thuật toán oct-dist

Mục tiêu của thuật toán là chọn được tập giá véctơ trọng số $\Xi_\zeta = \{\xi_1, \dots, \xi_k\} \subset \Xi$, $\xi_1 = \zeta$ phù hợp với k nhỏ nhất có thể, trong đó các điểm của Ξ được phân bố bất kỳ. Thuật toán chọn tâm đơn giản nhất là Thuật toán k -near, tức là chọn Ξ_ζ gồm ζ và $k - 1$ điểm gần ζ nhất trong Ξ . Các thử nghiệm số trong [2], ngay cả với bộ tâm có phân phối đều được tạo bằng phương pháp tón kém, khi sử dụng Thuật toán k -near thì số điểm của tập Ξ_ζ ít nhất phải gấp đôi số chiều của đa thức bậc p để đạt được sự hội tụ là $\mathcal{O}(h^p)$, trong đó h khoảng cách của các điểm. Trong không gian 3 chiều, để có độ chính xác của nghiệm xấp xỉ tương đương với nghiệm xấp xỉ của phương pháp phần tử hữu hạn và có tốc độ hội tụ là $\mathcal{O}(h^2)$ thì Thuật toán k -near yêu cầu $k \geq 20$.

Các thuật toán chọn tâm D01, ODP1 và OT1 trong không gian 2 chiều, đã chọn tập giá véctơ trọng số Ξ_ζ đồng thời thoả mãn hai điều kiện là các tâm ξ_i , $i = 1, 2, \dots, k$ đều xung quanh ζ và gần ζ nhất có thể. Cũng với mục tiêu này, hai thuật toán dựa trên các Octant trong không gian 3 chiều đã chọn, $n = 2$ tâm lân cận gần nhất trên mỗi Octant trong 8 Octant xung quanh $\zeta \in \Xi$ [18, Thuật toán 1], hoặc một tâm gần nhất trên mỗi Octant trong 16 Octant xung quanh $\zeta \in \Xi$ [18, Thuật toán 2]. Các thuật toán này nhanh và cho kết quả tốt đối với các tùy chọn tương đối đẹp của miền rời rạc Ξ . Tuy nhiên, các tâm được chọn bằng các thuật toán này có thể có phân bố không đều xung quanh ζ hoặc thậm chí chứa các cụm, trong khi với phạm vi rộng theo các hướng từ ζ có thể không chọn được điểm nào cho tập Ξ_ζ nếu các tâm của Ξ được phân bố bất thường.

Chúng tôi coi một thuật toán chọn là thành công nếu nó thoả mãn (a) chọn được tập Ξ_ζ có k nhỏ hơn hoặc bằng 20 trên miền rời rạc Ξ được tạo với chi phí rẻ, mà không cần có sự cải tiến tón kém để cho các tâm được phân bố đều hơn như trong [2] và (b) đạt được độ chính xác tương tự như phương pháp phần tử hữu hạn với cùng mật độ ma trận hệ số. Các thuật toán chọn dựa trên các Octant trong [18] đã thành công theo nghĩa này với miền rời rạc Ξ là đỉnh của các tứ diện được tạo bởi PDE Toolbox trong MATLAB. Tuy nhiên, các tâm này có phân bố đặc biệt, do đó không thể hiện được nhiều ưu điểm của phương pháp RBF-FD. Thử nghiệm số trong Phần 3.2, Chương 3,

cho thấy, thuật toán đơn giản dựa trên các Octant trong [18] thường không thành công trên miền rời rạc Ξ có các điểm phân bố ít đều hơn. Điều đó là động lực để chúng tôi tiếp tục cải tiến thuật toán chọn tâm dựa trên các Octant và để nó hoạt động tốt trên cả miền rời rạc Ξ có các điểm phân bố ít đều hơn hoặc là kết hợp các nút lưới Descartes hoặc điểm Halton trong không gian 3 chiều, với một số tùy chọn các điểm trên biên, chúng tôi gọi là Thuật toán oct-dist.

Để có thể chọn được các tâm ξ_i , $i = 1, 2, \dots, k$ phân phối xung quanh ζ , Thuật toán oct-dist bắt đầu với việc chọn n ($n > 2$) tâm trên mỗi Octant trong 8 Octant xung quanh $\zeta \in \Xi$, các tâm này được gọi là các tâm ứng viên, khi đó các tâm ứng viên sẽ là các lân cận và bao phủ tất cả các hướng từ ζ . Công đoạn thứ hai của thuật toán sẽ xem xét các tâm ứng viên và chọn tối đa $k - 1$ điểm trong số các tâm này để kết nạp vào giá véctơ trọng số Ξ_ζ , các tâm được kết nạp phải có khoảng cách tách biệt so với các tâm đã được chọn, đồng thời cũng ưu tiên những tâm ứng viên gần ζ hơn.

Để đảm bảo khoảng cách tách biệt giữa các tâm được chọn trong giá véctơ trọng số Ξ_ζ , chúng tôi sử dụng *khoảng cách tách biệt* ρ_ζ xác định bởi công thức

$$\rho_\zeta := \frac{\delta}{6} \sum_{i=1}^6 \|\zeta - \xi_i\|,$$

trong đó ξ_1, \dots, ξ_6 là 6 nút gần ζ nhất trong $\Xi \setminus \{\zeta\}$, $\|\cdot\|$ là chuẩn Euclid trong \mathbb{R}^3 và δ là tham số thỏa mãn $0 < \delta < 1$.

Mỗi Octant có gốc tại ζ trong không gian 3 chiều là một hình nón gồm các điểm $(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ sao cho $\varepsilon_i x_i \geq 0$, $i = 1, 2, 3$, trong đó $\varepsilon_i \in \{-1, 1\}$. Các Octant không rời nhau, do đó chúng tôi giảm biên của một số Octant để đảm bảo mỗi điểm (ví dụ $x_1 = 0$) chỉ có một Octant chứa nó (xem Thuật toán 8-Octants và Thuật toán 16-Octants). Các điểm trong vùng lân cận của ζ được phân hoạch vào 8 Octant có gốc tại ζ . Trong Thuật toán 16-Octants [18, Thuật toán 2], chúng tôi chia mỗi Octant thành hai phần, dẫn đến việc chia không gian xung quanh ζ thành 16 hình nón rời nhau và trong thuật toán này mỗi Octant có thể được chia thành 3 phần, xác định bởi điều kiện $\max\{|x_1|, |x_2|, |x_3|\} = |x_i|$, $i = 1, 2, 3$, với mức giảm biên thích hợp, không gian xung quanh ζ được chia thành 24 hình nón phân biệt.

Thuật toán 6 (Thuật toán oct-dist).*Input:* Ξ and $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$.*Output:* Ξ_ζ .*Parameters:*

- m : the number of nodes in the initial local cloud including ζ ;
- k : the target number of nodes in Ξ_ζ ;
- $s \in \{1, 2, 3\}$: the number of subdivisions of octants;
- n : the number of candidate nodes in each octant, $n = s\nu$ for some $\nu \in \mathbb{N}$;
- $0 < \delta < 1$: the standard distance tolerance.

I. Choose a set $\Xi_{\text{cand}} \subset \Xi \setminus \{\zeta\}$ of candidate neighbors.

1. Choose the initial cloud $\Xi_{\text{Init}} := \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{m-1}\} \subset \Xi \setminus \{\zeta\}$ consisting of $m - 1$ nodes closest to ζ , sorted by increasing distance to ζ .
2. Compute $\rho_\zeta := \frac{\delta}{6} \sum_{i=1}^6 \|\zeta - \xi_i\|$.
3. Determine $8s$ sets \tilde{O}_j , $j = 1, 2, \dots, 8s$, corresponding to the octants, for $s = 1$, half-octants for $s = 2$, or one-third-octants for $s = 3$, by collecting in each \tilde{O}_j at most ν nodes in Ξ_{Init} closest to ζ and lying in the corresponding octant, half-octant or one-third-octant. We set $\Xi_{\text{cand}} := \bigcup_{j=1}^{8s} \tilde{O}_j$.
4. Determine subsets $O_j = \{\xi_1^j, \xi_2^j, \dots\}$, $j = 1, 2, \dots, 8$, of Ξ_{cand} consisting of the nodes lying in the eight octants as follows. If $s = 1$, then $O_j = \tilde{O}_j$; otherwise O_j is the union of s sets of the type \tilde{O}_i . Assume that the numbering of the nodes is such that $\|\zeta - \xi_1^j\| \leq \|\zeta - \xi_2^j\| \leq \dots \leq \|\zeta - \xi_{n_j}^j\|$, with $0 \leq n_j \leq n$. Note that some O_j may be empty.
5. If $\#\Xi_{\text{cand}} \leq k - 1$, then STOP and return $\Xi_\zeta := \Xi_{\text{cand}} \cup \{\zeta\}$.

II. Choose the influence set $\Xi_\zeta \subset \Xi_{\text{cand}} \cup \{\zeta\}$.*Initialization:* $\Xi_\zeta := \emptyset$.1. For $j = 1$ to 8:If $O_j \neq \emptyset$, then $\Xi_\zeta := \Xi_\zeta \cup \{\xi_1^j\}$.

2. Set $\Xi_{\text{cand}} := \Xi_{\text{cand}} \setminus \Xi_{\zeta}$, such that $\Xi_{\text{cand}} = \{\bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2, \dots\}$, where $\bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2, \dots$ are sorted by increasing distance to ζ .
3. For $i = 1$ to $\#\Xi_{\text{cand}}$:
 - If $\text{dist}(\bar{\xi}_i, \Xi_{\zeta}) \geq \rho_{\zeta}$, then:
 - a. $\Xi_{\zeta} := \Xi_{\zeta} \cup \{\bar{\xi}_i\}$.
 - b. If $\#\Xi_{\zeta} = k - 1$, then STOP and return $\Xi_{\zeta} := \Xi_{\zeta} \cup \{\zeta\}$.
4. Set $\rho_{\zeta} := \delta\rho_{\zeta}$ and GOTO II.2.

Nhận xét:

- Các thử nghiệm số cho thấy, $m = 100$ là một lựa chọn tốt cho tham số này, $s = 1$ với $n = 3$ thì thuật toán hoạt động tốt trong hầu hết các trường hợp, nhưng với trường hợp các tâm được phân phối ít đều hơn, các giá trị của s và n lớn hơn đôi khi có lợi. Chúng tôi đề xuất $k = 17$ là giá trị mặc định, với k nhỏ hơn đôi khi cho kết quả tốt hơn trên các tâm được phân bố tốt. Giá trị của δ được chọn từ 0.7 đến 0.9 và chọn giá trị cao hơn cho các bài toán có miền hình học phức tạp, xem Phần 3.2, Chương 3.

- Công đoạn đầu tiên của thuật toán, tập địa phương ban đầu có $m - 1$ điểm gần ζ nhất được giảm xuống tập Ξ_{cand} có nhiều nhất $8n$ tâm lân cận của tất cả các Octant có gốc ζ . Việc sử dụng tham số s lớn hơn làm cho các tâm ứng viên này được phân phối đều hơn, khoảng cách đến ζ có thể lớn hơn. Nếu Ξ_{cand} chứa ít hơn k điểm, thì thuật toán bỏ qua công đoạn thứ hai và trả về $\Xi_{\zeta} := \Xi_{\text{cand}} \cup \{\zeta\}$. Trong thử nghiệm số chúng tôi thường chọn $n \geq k/8$, nên trường hợp này chỉ xảy ra khi một số Octant chứa quá ít điểm của Ξ trong vùng lân cận của ζ .

- Công đoạn thứ hai, chọn nhiều nhất $k - 1$ tâm ứng viên của tập Ξ_{cand} kết nạp vào tập giá véctơ trọng số Ξ_{ζ} . Đầu tiên, điểm gần nhất trên mỗi Octant sẽ được chọn và xóa khỏi Ξ_{cand} . Bước II.3, sẽ xem xét các tâm ứng viên còn lại theo khoảng cách của chúng đến ζ và thêm vào tập Ξ_{ζ} nếu tâm đó tách biệt với các điểm đã được chọn ít nhất bằng khoảng cách ρ_{ζ} . Vòng lặp này sẽ kết thúc nếu chọn được $k - 1$ tâm ứng viên, khi đó thuật toán sẽ trả về tập giá véctơ trọng số Ξ_{ζ} có k điểm gồm ζ và $k - 1$ tâm được chọn. Nếu không, sẽ giảm khoảng cách tách biệt bằng cách thiết lập $\rho_{\zeta} := \delta\rho_{\zeta}$ và quay lại Bước II.3 với các tâm ứng viên còn lại. Vì số tâm ứng viên ở công đoạn thứ hai ít nhất là bằng k và điều kiện khoảng cách tách biệt giảm dần nên quá trình này sẽ kết thúc ở Bước II.3.b.

- Với Thuật toán 8-Octants và Thuật toán 16-Octants [18, Thuật toán 1 và 2] áp dụng cho các bài toán có miền Ω phức tạp (miền không lồi, xem Phần 3.2.2, Chương 3), sau khi chọn được tập Ξ_ζ chúng tôi đã kiểm tra và điều chỉnh như sau: Với mỗi $\xi \in \Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$ nằm ngoài miền địa phương, tức là đoạn thẳng (ζ, ξ) giao với $\partial\Omega$ tại điểm ξ' nằm giữa ζ và ξ , thì thay thế ξ bởi điểm $\xi' \in (\zeta, \xi) \cap \partial\Omega$ gần ζ hơn. Tuy nhiên trong thuật toán này không áp dụng, vì các điểm mới ξ' có xu hướng làm giảm đáng kể khoảng cách tách biệt các điểm trong Ξ_ζ và thường dẫn đến kết quả trọng số không tốt. Rõ ràng, việc sử dụng các điểm ξ với $(\zeta, \xi) \cap \partial\Omega \neq \emptyset$ có thể có hại trên các miền có lỗ hoặc vết nứt mỏng, với nghiệm trên miền này có bước nhảy lớn. Có thể cần một biện pháp xử lý đặc biệt trong trường hợp này, chẳng hạn như tập các điểm lân cận ban đầu Ξ_{Init} ở Bước I.1 được chọn sao cho nó chứa các lân cận ξ của ζ mà ζ và ξ không được nối bằng một đường ngắn nhất nằm trong Ω . Tuy nhiên, các điểm nằm ngoài miền địa phương không phải là vấn đề nếu tập Ξ có số tâm đủ dày trong Ω .

Độ phức tạp của thuật toán chọn tâm oct-dist:

Mệnh đề 2.4.2. *Đặt $n = \#\Xi$ và k là số tâm cần chọn của tập Ξ_ζ . Khi đó độ phức tạp tính toán của Thuật toán 6 là $\mathcal{O}(mn \log n)$, với m là số điểm được chọn ban đầu.*

Chứng minh. I. Thời gian chọn tập các tâm ứng viên lân cận Ξ_{cand} tại Bước I:

1. Độ phức tạp khi sử dụng thuật toán k-d tree để tìm m điểm của tập khởi tạo Ξ_{Init} tại Bước I.1 là $\mathcal{O}(mn \log n)$, với $n := \#\Xi$ [6, 38, 60].
2. Thời gian tính khoảng cách tách biệt ρ_ζ là $\mathcal{O}(1)$.
3. Thời gian xác định $8s$ tập \tilde{O}_j , $j = 1, 2, \dots, 8s$ tại Bước I.3 là $\mathcal{O}(1)$.
4. Thời gian xác định các tập con O_j và sắp xếp theo thứ tự tăng dần đến ζ tại Bước I.4 là $\mathcal{O}(m \log m)$.
5. Thời gian tính toán tại Bước I.5 là $\mathcal{O}(1)$.

Do đó thời gian tính toán của công đoạn chọn tập các tâm ứng viên lân cận Ξ_{cand} là $\mathcal{O}(mn \log n)$.

II. Xác định tập Ξ_ζ tại Bước II:

1. Thời gian xác định tập Ξ_ζ tại Bước II.1 là $\mathcal{O}(1)$.

2. Thời gian xác định tập Ξ_{cand} và sắp xếp theo thứ tự tăng dần đến ζ tại Bước II.2 là $\mathcal{O}((m-8)\log(m-8))$.
3. Thời gian xác định tập Ξ_ζ tại Bước II.3 là $\mathcal{O}(1)$.
4. Thời gian tính giá trị ρ_ζ tại Bước II.4 là $\mathcal{O}(1)$.

Do đó thời gian xác định tập Ξ_ζ là $\mathcal{O}((m-8)\log(m-8))$.

Vậy tổng thời gian tìm tập Ξ_ζ của của Thuật toán 6 là $\mathcal{O}(mn \log n)$. \square

2.4.5 Thuật toán pQR

Thuật toán pQR được Oleg Davydov và Mansour Safarpoor giới thiệu trong [15, 20], là thuật toán tìm tập giá véctơ trọng số Ξ_ζ và tính trọng số $w_{\zeta, \xi}$ bằng phương pháp đa thức. Trong phần này chúng tôi sẽ giới thiệu lại thuật toán và sử dụng nó tìm giá véctơ trọng số cho phương pháp RBF-FD. Ý tưởng và nội dung của thuật toán như sau:

Giả sử toán tử vi phân có dạng (2.1), trong đó D là toán tử vi phân tuyến tính

$$Du = \sum_{\substack{\alpha \in \mathbb{N}_+^d \\ |\alpha| \leq k}} c_\alpha \partial^\alpha u, \quad \partial^\alpha := \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}, \quad |\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_d,$$

với k là bậc của toán tử tuyến tính D , c_α là các hệ số và công thức (2.1) là kết quả chính xác với các u thuộc không gian các đa thức d biến Π_q^d có bậc nhỏ hơn hoặc bằng q ($q \geq 1$), tức là

$$Du(\zeta) = \sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} p(\xi), \quad \zeta \in \Xi_{\text{int}}, \quad \text{với mọi } p \in \Pi_q^d. \quad (2.23)$$

Trong [21, 23] đã đưa ra công thức sai số của (2.1)

$$\left| Du(\zeta) - \sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} u(\xi) \right|$$

bị chặn trong lân cận của ζ

$$\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} |w_{\zeta, \xi}| \|\zeta - \xi\|_2^q. \quad (2.24)$$

Hơn nữa, giá trị nhỏ nhất của (2.24) ứng với (2.23) trùng với hàm ρ được định nghĩa như sau

$$\rho_{q,D}(\zeta, \Xi_\zeta) = \sup \left\{ Dp(\zeta) : p \in \Pi_q^d, |p(\xi)| \leq \|\zeta - \xi\|_2^d, \forall \xi \in \Xi_\zeta \right\}$$

và nó được sử dụng để đánh giá sai số.

Để có được độ chính xác cao trong công thức vi phân số, ta cần tìm được giá trị trọng số $w_{\zeta, \xi}$ nhỏ nhất có thể trong công thức (2.24), điều này thực hiện được khi chọn được giá véctơ trọng số Ξ_ζ có vị trí tốt. Các tác giả trong [15] đã giới thiệu phương pháp pQR với việc phân tích QR của ma trận hệ số khi biến đổi (2.23) và đánh giá các trọng số bị chặn bởi công thức

$$\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} |w_{\zeta, \xi}| \|\zeta - \xi\|_2^q \leq C \rho_{q,D}(\zeta, \Xi_\zeta),$$

trong đó hằng số $C > 1$.

Để chọn được giá véctơ trọng số Ξ_ζ có vị trí tốt, trong [20] các tác giả bắt đầu thuật toán với tập gồm m điểm $\Xi_\zeta^{\text{init}} = \{y_1, y_2, \dots, y_m\}$ gần ζ nhất. Giả sử cơ sở của không gian Π_q^d là $\{p_1, p_2, \dots, p_v\}$, với $v = \dim \Pi_q^d = v_{q,d}$ và $\zeta = y_1, p_1 \equiv 1, p_2(y_1) = \dots = p_v(y_1) = 0$. Khi đó điều kiện (2.23) để tìm véctơ trọng số w_ζ cho ta hệ phương trình tuyến tính

$$Aw = b,$$

trong đó

$$A = [p_l(y_j)]_{l,j=2}^{v,m}, \quad w = [w_j]_{j=2}^m, \quad b = [Dp_l(\zeta)]_{l=2}^v.$$

Biến đổi A, w về dạng

$$\tilde{A} = A\Theta, \quad w = \Theta v$$

với

$$\Theta = \text{diag}(\theta_2, \theta_3, \dots, \theta_m), \quad \theta_j = \|y_j - \zeta\|_2^{-q}, \quad j = 2, 3, \dots, m, \quad (2.25)$$

ta được hệ phương trình $\tilde{A}v = b$. Trong [15], đã giới thiệu phương pháp phân tích QR tương tự trong [32, Phần 12.2.1], giải hệ phương trình này ta tìm trọng số w^* của (2.23) với nhiều nhất là $\text{rank}(A) + 1 \leq v_{q,d}$ thành phần khác 0. Bằng cách giữ lại những nút trong Ξ_ζ^{init} ứng với các trọng số $w_{\zeta, \xi}$ khác 0 ta có tập giá véctơ trọng số Ξ_ζ tương ứng có nhiều nhất $\text{rank}(A) + 1 \leq v_{q,d}$ điểm. Nội dung chi tiết của thuật toán như sau:

Thuật toán 7 (Thuật toán pQR bậc q , [20], Thuật toán 1).

Input: $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$ and $\Xi_{\zeta}^{\text{init}} = \{y_1, y_2, \dots, y_m\}$ such that $y_1 = \zeta$.

Output: $w^* \in \mathbb{R}^m$ and $\Xi_{\zeta} \subset \Xi_{\zeta}^{\text{init}}$.

1. Choose a basis $\{p_1, p_2, \dots, p_v\}$ for Π_q^d , such that $\zeta = y_1, p_1 \equiv 1, p_2(y_1) = \dots = p_v(y_1) = 0$, with $v = \dim \Pi_q^d = v_{q,d}$.
2. Compute the matrix $A = [p_l(y_j)]_{l,j=2}^{v,m}$ and vector $b = [Dp_l(\zeta)]_{l=2}^v$.
3. Compute $\tilde{A} = A\Theta$, where Θ is defined in (2.25).

4. Compute the QR decomposition with partial pivoting

$$\tilde{A}P = Q \begin{bmatrix} R & T \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

where P is a permutation matrix, Q an orthogonal matrix and $R \in \mathbb{R}^{r \times r}$ is upper triangular and nonsingular, $T \in \mathbb{R}^{m-r \times r}$, with $r = \text{rank}(\tilde{A}) = \text{rank}(A)$.

5. Compute $\tilde{v} \in \mathbb{R}^r$ such that $R\tilde{v} = \tilde{b}$, where $\tilde{b} \in \mathbb{R}^r$ consists of the first r components of $Q^T b$.
6. Compute the vector $w = \Theta P [\tilde{v}^T \ 0]^T \in \mathbb{R}^{m-1}$ that has at most r nonzero components.
7. Return the vector $w^* \in \mathbb{R}^m$ is defined by

$$w^* = \begin{bmatrix} c_0(y_1) - \sum_{j=1}^{m-1} w_j \\ w \end{bmatrix},$$

where $c_0(y_1) = Dp_1(y_1)$.

8. Return $\Xi_{\zeta} = \{y_j : j = 1, 2, \dots, m, w_j^* \neq 0\}$.

Trong [19] chúng tôi sử dụng Thuật toán pQR với 3 trường hợp:

- pQR4se1: Bắt đầu với 100 điểm gần ζ nhất, chúng tôi chọn tập giá véctơ trọng số Ξ_{ζ} bằng Thuật toán pQR bậc 4 và tính trọng số bằng phương pháp sử dụng nội suy RBF-FD như trong [19], nên số tâm chọn được của tập Ξ_{ζ} xấp xỉ 20 điểm. Do đó, chúng tôi cũng xem xét hai phương pháp chọn sau với trọng số pQR như trong Thuật toán 7 mà việc tính toán của chúng không dựa trên các hàm cơ sở bán kính.

- pQR3, pQR4: Chúng tôi áp dụng Thuật toán 7 cho cả việc chọn tập Ξ_ζ và tính véc tơ trọng số bằng đa thức trong 2 trường hợp bậc 3 (pQR3), bậc 4 (pQR4). Bắt đầu với 100 điểm gần ζ nhất, khi đó số lượng tâm của tập Ξ_ζ được chọn trong trường hợp bậc 4 trùng với trường hợp pQR4se1 và xấp xỉ 10 với pQR3.

2.5 Thuật toán làm mịn thích nghi không lưới

Để đánh giá hiệu quả của phương pháp RBF-FD trong không gian 2 chiều khi sử dụng các thuật toán chọn tâm D01, ODP1, OT1 trong các công bố [16, 48, 49], các tác giả đều kết hợp với một thuật toán *làm mịn thích nghi không lưới* hay thuật toán *sinh tâm không lưới thích nghi* (gọi tắt là thuật toán sinh tâm), tức là mật độ sinh tâm tại vị trí nghiệm có kỳ dị sẽ nhiều hơn những vị trí khác. Mỗi thuật toán sinh tâm không lưới thích nghi gồm 2 công đoạn chính:

- Tính các độ lệch và xác định ngưỡng của độ lệch τ ;
- Xem xét việc chèn thêm tâm mới đối với mỗi cạnh $\zeta\xi$ có giá trị độ lệch tương ứng lớn hơn hoặc bằng τ . Tâm ứng viên được thêm nếu thỏa mãn điều kiện về khoảng cách tách biệt địa phương so với các điểm lân cận.

Nếu kết thúc công đoạn 2 mà số tâm của miền rời rạc không đạt số tâm định trước thì giảm ngưỡng τ và lặp lại công đoạn này.

Trước khi mô tả nội dung của các thuật toán, chúng tôi sẽ trình bày một số khái niệm và sự thay đổi chính từ Thuật toán 2 trong [16] so với Thuật toán 2 trong [48] và kết quả công bố gần đây của chúng tôi Thuật toán 1 trong [49].

- *Độ lệch* (error indicator): Đây là công đoạn đầu tiên quan trọng của thuật toán sinh tâm thích nghi, nó cung cấp thông tin về đối tượng cần sinh tâm hoặc không cần sinh tâm, với ý tưởng sinh tâm tại những nơi có độ lệch vượt một ngưỡng định trước. Có một số cách tính độ lệch cho phương pháp RBF-FD khác nhau, như trong [16] nó được tính bởi sự khác nhau giữa nghiệm xấp xỉ tại hai điểm đầu và cuối của cạnh như sau:

Định nghĩa 2.5.1. Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, độ lệch (error indicator) $\varepsilon(\zeta, \xi)$ ứng với ‘cạnh’ $\zeta\xi$, $\xi \in \Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$ được tính bởi công thức

$$\varepsilon(\zeta, \xi) := |\hat{u}_\zeta - \hat{u}_\xi|, \quad (2.26)$$

trong đó \hat{u} là nghiệm xấp xỉ của Bài toán (1) được xác định bởi hệ phương trình (2.2) trên miền rời rạc Ξ .

Cùng với cách tính độ lệch theo cạnh, cách tính độ lệch tại các điểm cũng được sử dụng, như trong [43], cách tính này dựa trên các tam giác Delaunay được tạo bởi tập Ξ_ζ có công thức như sau

$$\varepsilon(\zeta) := \int_{\Omega_\zeta} \|Du - f\|_{L_2} d\Omega \approx \frac{1}{3} A_\zeta \|Du_\zeta - f_\zeta\|_{L_2} = \sqrt{\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} \left[\frac{1}{3} A_\xi (Du_\xi - f_\xi) \right]^2}, \quad (2.27)$$

trong đó Ω_ζ là các tam giác Delaunay được tạo bởi Ξ_ζ và $A_\xi, \xi \in \Xi_\zeta$ là diện tích của tam giác Delaunay tương ứng.

Cách tính độ lệch tại các điểm cũng được sử dụng trong [57] bởi công thức

$$\varepsilon(\zeta) := \sqrt{\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} |\hat{u}(\xi) - \bar{u}(\zeta)|^2}, \quad \bar{u}(\zeta) := \frac{1}{\#\Xi_\zeta} \sum_{\xi \in \Xi_\zeta} \hat{u}(\xi). \quad (2.28)$$

Ngưỡng làm mịn của nó cũng được xác định tương tự nhưng trên miền địa phương.

Tuy nhiên, các tác giả trong [48] đã chỉ ra, với một số trường hợp cách tính độ lệch bởi công thức (2.26) trên miền địa phương làm cho nghiệm xấp xỉ của phương trình đạo hàm riêng lớn, dẫn đến việc sinh tâm không hiệu quả. Vì vậy, trong [48, 49] đã thay thế bằng cách tính của Zienkiewicz và Zhu [64], đó là cách tính độ lệch theo cạnh được sử dụng phổ biến cho phương pháp FEM bởi công thức

Định nghĩa 2.5.2. Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, độ lệch $\varepsilon(\zeta, \xi)$ ứng với ‘cạnh’ $\zeta\xi$, $\xi \in \Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$ được tính bởi công thức

$$\varepsilon(\zeta, \xi) = \varepsilon_1(\zeta, \xi) := |(\hat{u}_\zeta - \hat{u}_\xi) - (\ell_\zeta(\zeta) - \ell_\zeta(\xi))|, \quad (2.29)$$

trong đó \hat{u} là nghiệm xấp xỉ của Bài toán (1) được xác định bởi hệ phương trình (2.2) trên miền rời rạc Ξ và

$$\ell_\zeta(x) := a + b^T(x - \zeta)$$

là đa thức tuyến tính ứng với dữ liệu $\{(\xi, \hat{u}_\xi) : \xi \in \Xi_\zeta\}$, với các hệ số $a \in \mathbb{R}$, $b \in \mathbb{R}^2$ được chọn thỏa mãn điều kiện

$$\sum_{\xi \in \Xi_\zeta} |\hat{u}_\xi - \ell_\zeta(\xi)|^2$$

đạt cực tiểu.

Trong [48], các tác giả đã đánh giá sự khác biệt giữa việc tính độ lệch bằng công thức (2.26) và công thức (2.29) trên Bài toán 5 với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$. Kết quả thử nghiệm cho thấy, nếu sử dụng công thức (2.29) để tính độ lệch thì các tâm được sinh ra nhiều hơn ở các vùng có độ cong cao (ở đỉnh và đáy của sóng) và bỏ qua vùng bằng phẳng giữa chúng như Hình 13 (g) trong [48], cách sinh tâm này tương tự như cách sinh lưới thích nghi của FEM (xem Hình 13 (h) trong [48]). Tuy nhiên, nếu sử dụng công thức (2.26) thì các tâm được sinh ra nhiều ở các vùng phẳng có nghiệm xấp xỉ cao như trong Hình 14 (b) trong [48], dẫn đến sai số lớn hơn và độ chính xác kém ở đỉnh và đáy của sóng, xem Hình 14 (c, d) trong [48].

- *Ngưỡng độ lệch và chiến lược đánh dấu* (Marking strategy): Đối với sinh tâm thích nghi không lưới, ngưỡng độ lệch là yếu tố quan trọng quyết định vị trí và chất lượng sinh tâm (làm mịn). Vì nếu giá trị ngưỡng quá lớn sẽ dẫn đến bỏ sót những vị trí cần phải sinh tâm, còn giá trị ngưỡng quá nhỏ thì sẽ dẫn đến việc sinh tâm tại những vị trí chưa cần thiết. Giá trị của ngưỡng độ lệch τ phụ thuộc vào giá trị $\max(\varepsilon(\Xi))$. Do đó điều kiện để cạnh $\zeta\xi$ được đánh dấu làm mịn là

$$\varepsilon(\zeta, \xi) \geq \tau. \quad (2.30)$$

Với cách tính độ lệch theo cạnh trong [16, 48] bởi công thức (2.26) và công thức (2.29), ngưỡng độ lệch là $\tau := \gamma\bar{\varepsilon}$, với

$$\bar{\varepsilon} = \bar{\varepsilon}(\Xi) := \max\{\varepsilon(\zeta, \xi) : \zeta \in \Xi, \xi \in \Xi_\zeta\}$$

và hệ số $\gamma \in (0, 1]$. Các giá trị này xác định trên toàn miền rời rạc Ξ . Còn với cách tính độ lệch theo tâm như trong [43, 57] bởi công thức (2.27) và công thức (2.28) cũng sử dụng ngưỡng độ lệch τ như trên nhưng $\gamma, \bar{\varepsilon}$ là các giá trị trên miền địa phương.

Để có thể sinh tâm ở những vị trí cần thiết, trong [49], chúng tôi xác định ngưỡng độ lệch τ 'hỗn hợp', cụ thể như sau:

- Ngưỡng độ lệch $\tau := \gamma\varepsilon_1$, với hệ số $\gamma \in (0, 1)$. Đây là chiến lược tối đa (Maximum strategy) và được áp dụng cho một trong ba trường hợp đặc biệt sau: Với tập khởi tạo Ξ hoặc $\varepsilon_1 \geq 2$ hoặc $\varepsilon_1 \geq 10^2\varepsilon_1^{\text{prev}}$, với $\varepsilon_1^{\text{prev}}$ là giá trị độ lệch lớn nhất của lần làm mịn trước và

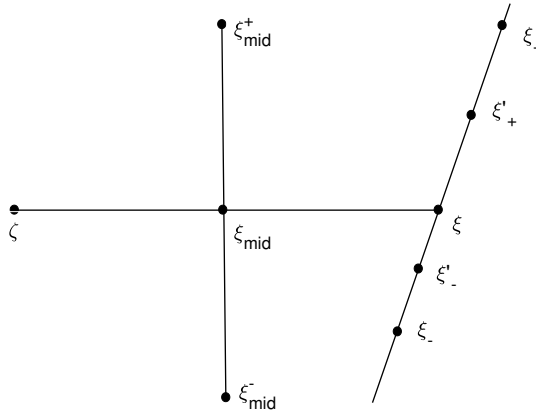
$$\varepsilon(\Xi) := \{\varepsilon(\zeta, \xi) : \zeta \in \Xi_{\text{int}}, \xi \in \Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}\}, \quad (2.31)$$

$$\varepsilon^{\text{D}} := \{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N\}, \text{ trong đó } \varepsilon_1 \geq \varepsilon_2 \geq \dots \geq \varepsilon_N, \varepsilon^{\text{D}} \subseteq \varepsilon(\Xi). \quad (2.32)$$

- Các trường hợp còn lại $\tau := \max(\gamma\tau^{\text{prev}}, \varepsilon_j)$, trong đó $\varepsilon_j \in \varepsilon^D$, $j := \lfloor \rho n \rfloor$, $\rho \in (0, 1)$, $n = \#\Xi_{\text{int}}\%$.

Chiến lược này tránh việc τ giảm nhanh dẫn đến việc sinh tâm mới tại những vị trí không cần thiết. Trong các thử nghiệm số, với lần lặp đầu tiên $\tau = \gamma\tau^{\text{prev}}$ và sau đó τ giảm rất nhanh.

- *Các tâm ứng viên*: Với mỗi cạnh được đánh dấu $\zeta\xi$, các tâm ứng viên khi sử dụng Thuật toán 2 trong [16] là trung điểm $\xi_{\text{mid}} = (\zeta + \xi)/2$ và 2 trung điểm ξ'_+ , ξ'_- trên biên nếu ξ là điểm biên. Để các tâm được phân bố đều xung quang ζ , ngoài tâm ứng viên là trung điểm thì các Thuật toán 2 trong [48] và Thuật toán 1 trong [49] còn có các ứng viên $\xi_{\text{mid}}^\pm := \xi_{\text{mid}} \pm d\bar{v}$, trong đó $d = \|\zeta - \xi\|/2$ và \bar{v} là véc tơ đơn vị vuông góc với cạnh $\zeta\xi$, xem Hình 2.4. Đối với các thuật toán sử dụng công thức độ



Hình 2.4: Các tâm ứng viên ξ_{mid} , ξ_{mid}^+ , ξ_{mid}^- , ξ'_+ , ξ'_- trong lân cận của cạnh được đánh dấu.

lệch theo tâm bởi công thức (2.27) và công thức (2.28) như trong [43, 57] thì các tâm ứng viên là 4 điểm $\xi_j := \zeta + h\bar{v}_j$, $j = 1, 2, 3, 4$, với h là khoảng cách ứng với điểm ζ , \bar{v}_j là véc tơ đơn vị theo tất cả các hướng.

- *Khoảng cách tách biệt*: Các tâm ứng viên có thể nằm ở vị trí rất gần điểm đã tồn tại hoặc một tâm khác được tạo ra khi làm mịn một cạnh khác. Để tránh điều này các thuật toán trong [16, 48, 49] đã giới thiệu khoảng cách tách biệt như sau

Định nghĩa 2.5.3. *Khoảng cách tách biệt của tâm ξ' với tập Ξ' được xác định bởi công thức*

$$\text{sep}_{\xi'}(\Xi') := \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 \text{dist}(\xi_i, \Xi' \setminus \{\xi_i\}), \quad (2.33)$$

trong đó $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_4$ là 4 điểm thuộc Ξ' gần ξ' nhất và

$$\text{dist}(x, Y) := \inf\{\|x - y\| : y \in Y\}$$

là khoảng cách từ x đến tập Y .

Trong [16], các tác giả sử dụng cách tính $\text{dist}(x, Y)$ bởi công thức

$$\text{dist}(x, Y) := \min\{\|x - y\| : y \in Y\}.$$

Tâm ứng viên ξ' được kết nạp nếu

$$\text{dist}(\xi', \Xi') \geq \mu \text{sep}_{\xi'}(\Xi'), \quad (2.34)$$

với $\mu \in (0, 1)$. Trong [43, 57] tâm ứng viên ξ' được kết nạp nếu nó thỏa mãn điều kiện $\|\xi' - \xi\| \geq h$, với ξ là điểm gần ξ' nhất.

Trong [49], với các trường hợp $\varepsilon_1 > 5$ hoặc $\varepsilon_1 \leq 10^{-10}$ hoặc $\varepsilon_1 > 10^2 \varepsilon_1^{\text{prev}}$, thì sẽ giảm $\mu := \mu - 0.2$ (xem Bước I.2 Thuật toán 10), để ưu tiên phân phối tâm với giá trị lớn nhất không đồng đều hơn phân phối đều.

2.5.1 Thuật toán sinh tâm trung điểm D02

Thuật toán đã được các tác giả giới thiệu trong [16, Thuật toán 2] (gọi tắt là thuật toán sinh tâm D02), với độ lệch xác định bởi công thức (2.26). Thuật toán làm mịn cạnh $\zeta\xi$ bằng cách chèn thêm tâm mới ξ_{mid} là trung điểm của cạnh này. Nếu $\xi \in \partial\Xi$ thì tìm 2 điểm lân cận $\xi_-, \xi_+ \in \partial\Xi$ và chèn thêm 2 trung điểm ξ'_-, ξ'_+ của các cạnh $\xi\xi_-$ và $\xi\xi_+$.

Thuật toán 8 (Thuật toán D02, [16], Thuật toán 2).

Input: The set of centres Ξ , stencil supports $\{\Xi_\zeta : \zeta \in \Xi_{\text{int}}\}$.

Output: The refined set of centres Ξ' and stencil supports $\{\Xi'_\zeta : \zeta \in \Xi' \setminus \partial\Xi'\}$.

Parameters: γ (error indicator tolerance), μ (separation tolerance).

I. Compute the maximum error indicator $\bar{\varepsilon} = \bar{\varepsilon}(\Xi)$ and mark all edges $\zeta\xi, \xi \in \Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}, \zeta \in \Xi_{\text{int}}$, such that $\varepsilon(\zeta, \xi) \geq \gamma\bar{\varepsilon}$. Initialise $\Xi' := \Xi$.

II. For each marked edge $\zeta\xi$:

1. Let $\xi' := (\zeta + \xi)/2$.

2. If $\text{dist}(\xi', \Xi') \geq \mu \text{sep}_{\xi'}(\Xi')$:

i. Set $\Xi' := \Xi' \cup \{\xi'\}$.

ii. If $\xi \in \partial \Xi$

Set $\Xi' := \Xi' \cup \{\xi'_-, \xi'_+\}$.

III. 1. For each $\zeta \in \Xi' \setminus \partial \Xi'$:

i. Apply Algorithm D01 to find $\Xi'_\zeta \subset \Xi'$.

ii. Compute the distances $d_\xi = \|\zeta - \xi\|_2, \xi \in \Xi'_\zeta \setminus \{\zeta\}$, and their average $d_{av} := \frac{1}{\ell} \sum_{\xi \in \Xi'_\zeta \setminus \{\zeta\}} d_\xi$, where $\ell = \#\Xi'_\zeta - 1$, and mark all edges $\zeta\xi, \xi \in \Xi'_\zeta \setminus \{\zeta\}$, such that $d_\xi > 2d_{av}$.

2. Repeat Step II for the edges marked in Step III.1 and collect all newly created centres in the set Ξ_{aux} .

3. Apply Algorithm D01 to compute Ξ'_ζ for all $\zeta \in \Xi_{aux}$ and recompute Ξ'_ζ for all $\zeta \in \Xi' \setminus \Xi_{aux}$ such that $\text{dist}(\zeta, \Xi_{aux}) < d(\Xi'_\zeta) := \max_{\xi \in \Xi'_\zeta} \|\zeta - \xi\|_2$.

Độ phức tạp của thuật toán sinh tâm D02:

Mệnh đề 2.5.1. Đặt $n = \#\Xi, N_{\text{int}} = \#\Xi_{\text{int}}, k$ là số tâm của $\Xi_\zeta, m > k$ là số tâm gần ζ nhất được chọn ban đầu và N_{mark} là số cạnh được đánh dấu để làm mịn. Khi đó, độ phức tạp của thuật toán sinh tâm D02 là $\mathcal{O}(m N_{\text{int}}^2 \log n)$.

Chứng minh. I. Do Bước I sử dụng Thuật toán D01 nên độ phức tạp là $\mathcal{O}(N_{\text{int}} m \log n)$.

II. Chi phí tính toán tại Bước II là $N_{\text{mark}} \mathcal{O}(n)$.

III. Tính chi phí tính toán tại Bước III

1. i. Chi phí tính toán là $\mathcal{O}(N_{\text{int}} m \log n)$ (Vì áp dụng Thuật toán D01).

ii. Chi phí tính toán là $\mathcal{O}(k)$.

Vì vậy chi phí tính toán tại Bước III.1 là $N_{\text{int}} \mathcal{O}(N_{\text{int}} m \log n)$.

2. Chi phí tính toán là $N_{\text{mark}} \mathcal{O}(N)$, với $N_{\text{mark}} < N_{\text{int}}$.

3. Chi phí tính toán là $\mathcal{O}(N_{\text{int}} m \log n)$.

Vì chi phí tính toán của Bước III là theo quy tắc cộng, nên độ phức tạp tính toán tại bước này là $\mathcal{O}(m N_{\text{int}}^2 \log n)$.

Vậy chi phí tính toán từ Bước I đến Bước III của Thuật toán 8 là theo quy tắc cộng nên độ phức tạp của thuật toán là $\mathcal{O}(m N_{\text{int}}^2 \log n)$. \square

2.5.2 Thuật toán sinh 5 tâm ODP2

Thuật toán sinh 5 tâm thích nghi cho phương pháp không lưới RBF-FD được các tác giả giới thiệu trong [48, Thuật toán 2], gọi tắt là thuật toán sinh tâm ODP2. Thuật toán sử dụng cách xác định độ lệch bởi công thức (2.29) và làm mịn cạnh $\zeta\xi$ bằng cách chèn thêm các tâm mới là: ξ_{mid} là trung điểm của cạnh, $\xi_{\text{mid}}^+, \xi_{\text{mid}}^-$ nằm trên đường trung trực của cạnh $\zeta\xi$ và đối xứng nhau qua ξ_{mid} . Tương tự Thuật toán D02, nếu $\xi \in \partial\Xi$ thì tìm 2 điểm lân cận $\xi_-, \xi_+ \in \partial\Xi$ và chèn thêm 2 trung điểm ξ'_-, ξ'_+ của các cạnh $\xi\xi_-$ và $\xi\xi_+$.

Thuật toán 9 (Thuật toán ODP2, [48], Thuật toán 2).

Input: The set of centers Ξ and stencil supports $\{\Xi_\zeta : \zeta \in \Xi_{\text{int}}\}$.

Output: The refined set of centers Ξ' .

Parameters: $\gamma = 0.5$ (error indicator tolerance), $\mu = 0.8$ (separation tolerance) and $n = 15$ (percentage of added centers).

- I. Compute the error indicator threshold $\bar{\varepsilon} = \gamma\bar{\varepsilon}(\Xi)$ and initialize $\Xi' := \Xi$.
- II. For each edge $\zeta\xi$, $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, $\xi \in \Xi_\zeta \setminus \{\zeta\}$, such that $\varepsilon(\zeta, \xi) \geq \bar{\varepsilon}$:
 1. Compute $\xi_{\text{mid}} := (\zeta + \xi)/2$, $\xi_{\text{mid}}^+ := \xi_{\text{mid}} + d\bar{\nu}$ and $\xi_{\text{mid}}^- := \xi_{\text{mid}} - d\bar{\nu}$, where $d := \|\zeta - \xi\|/2$ and $\bar{\nu}$ is the unit vector perpendicular to the edge $\zeta\xi$.
Initialize $\Xi_C := \emptyset$.
 2. If $\xi \in \Xi_{\text{int}}$, then for each $\xi' \in \{\xi_{\text{mid}}, \xi_{\text{mid}}^+, \xi_{\text{mid}}^-\}$:
If $\text{dist}(\xi', \partial\Omega) \geq d/2$ and $\text{dist}(\xi', \Xi') \geq \mu \text{sep}_{\xi'}(\Xi')$, then set $\Xi_C := \Xi_C \cup \{\xi'\}$.
 3. Elseif $\xi \in \partial\Xi$:
 - i. For each $\xi' \in \{\xi_{\text{mid}}, \xi_{\text{mid}}^+, \xi_{\text{mid}}^-\}$:
If $\text{dist}(\xi', \partial\Omega) \geq d/2$ and $\text{dist}(\xi', \Xi') \geq d/2$, then set $\Xi_C := \Xi_C \cup \{\xi'\}$.
 - ii. If $\Xi_C \neq \emptyset$ or $\text{dist}(\xi_{\text{mid}}, \partial\Omega) < d/2$:
Find two neighbors ξ_-, ξ_+ of ξ in $\partial\Xi$, one in each direction from ξ along

the boundary, and compute two middle points $\xi'_-, \xi'_+ \in \partial\Omega$ defined by the pairs ξ, ξ_- and ξ, ξ_+ , respectively. Set $\Xi_C := \Xi_C \cup \{\xi'_+, \xi'_-\}$.

4. Set $\Xi' := \Xi' \cup \Xi_C$.

III. If the number of centers in $\Xi'_{\text{int}} \setminus \Xi_{\text{int}}$ is less than $n\%$ of the number of centers in Ξ_{int} , then set $\bar{\Xi} := \gamma\bar{\Xi}$ and goto Step II.

Else STOP and return Ξ' .

Độ phức tạp của thuật toán sinh tâm ODP2:

Mệnh đề 2.5.2. Đặt $n = \#\Xi$ và N_c là số tâm ứng viên. Khi đó độ phức tạp tính toán của Thuật toán ODP2 là $\mathcal{O}(N_c \log n)$.

Chứng minh. I. Chi phí tính toán ngưỡng độ lệch tại Bước I: Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, việc tính độ lệch được thực hiện 1 lần là $\mathcal{O}(1)$, do đó tổng thời gian xác định tập $\varepsilon(\Xi)$ là $\mathcal{O}(n)$ với $n := \#\Xi$. Chi phí sắp xếp độ lệch bằng với độ phức tạp của thuật toán sắp xếp nhanh là $\mathcal{O}(n \log n)$.

II. Chi phí tính toán tại Bước II với mỗi cạnh ứng viên $\zeta\xi$:

1. Chi phí xác định 3 điểm tại Bước II.1 là $\mathcal{O}(1)$.

2. Chi phí để chèn thêm tâm ứng viên tại Bước II.2:

Chi phí để tính khoảng cách $\text{dist}(\xi', \Xi)$ là $\mathcal{O}(\log n)$ [6, 38, 60].

Để tính khoảng cách tách biệt $\text{sep}_{\xi'}(\Xi')$ ta phải sắp xếp các điểm bằng cây k-dtree nên chi phí tính toán là $\mathcal{O}(n \log n)$ [6].

Với mỗi tâm ứng viên ξ' , chi phí để chèn thêm tâm vào k-dtree là $\mathcal{O}(\log n)$ (xem [1, Chương 3, trang 19-20]).

Gọi N_{int} là số tâm ứng viên trong miền, khi đó chi phí để chèn thêm tâm ứng viên tại Bước II.2 là $\mathcal{O}(N_{\text{int}} \log n)$.

3. Chi phí chèn thêm tâm trên biên khi $\xi \in \partial\Xi$:

Tương tự Bước II.2, gọi N_b là số tâm ứng viên, khi đó chi phí để chèn thêm tâm ứng viên tại Bước II.3 là $\mathcal{O}(N_b \log n)$.

4. Chi phí tính toán tại Bước II.4 là $\mathcal{O}(1)$.

Do đó với N_c là số tâm ứng viên thì chi phí tính toán chèn thêm tâm tại Bước II là $\mathcal{O}(N_c \log n)$.

III. Bước III chỉ thực hiện 1 lần nên thời gian tính toán là $\mathcal{O}(1)$.

Vậy thời gian tính toán của Thuật toán ODP2 là $\mathcal{O}(N_c \log n)$.

□

2.5.3 Thuật toán cải tiến sinh 5 tâm OT2

Thuật toán này chúng tôi vẫn sử dụng cách tính *độ lệch, khoảng cách tách biệt địa phương* và *cấu trúc các tâm ứng viên* như Thuật toán ODP2 [48, Thuật toán 2]. Tuy nhiên, để ưu tiên về mật độ tâm đối với những trường hợp giá trị lớn nhất của độ lệch cao, chúng tôi xác định ngưỡng độ lệch τ trong công thức (2.30) theo cách 'hỗn hợp' và giảm giá trị của tham số khoảng cách tách biệt μ trong các trường hợp đặc biệt như đã trình bày ở trên, chúng tôi gọi thuật toán này là thuật toán sinh tâm OT2.

Thuật toán 10 (Thuật toán OT2, [49], Thuật toán 1).

Input: The set of centers Ξ and the stencil supports $\{\Xi_\zeta : \zeta \in \Xi_{\text{int}}\}$.

Output: The refined set of centers Ξ' .

Parameters: γ (error indicator tolerance), σ , ρ (ratios), μ (separation tolerance). Initialize $\Xi' := \Xi$.

I. Compute the error indicator threshold

1. Compute sets $\varepsilon(\Xi)$ (2.31) and set ε^D (2.32).
2. If $\varepsilon_1 \geq 5$, or $\varepsilon_1 \leq 10^{-10}$, or $\varepsilon_1 > 10^2 \varepsilon_1^{\text{prev}}$, then $\mu := \mu - 0.2$.
3. If Ξ is the initial set, or $\varepsilon_1 > 10^2 \varepsilon_1^{\text{prev}}$, or $\varepsilon_1 \geq 2$, then $\tau := \gamma \varepsilon_1$; Else $\tau := \max(\gamma \tau^{\text{prev}}, \varepsilon_j)$, where $j := \lfloor \rho n \rfloor$.

II. For each candidate edge $\zeta \xi$:

1. If $\xi \in \Xi_{\text{int}}$, then For each $\xi' \in \{\xi_{\text{mid}}, \xi_{\text{mid}}^+, \xi_{\text{mid}}^-\}$, if $\text{dist}(\xi', \Xi') \geq \mu \text{sep}_{\xi'}(\Xi')$, then $\Xi' := \Xi' \cup \{\xi'\}$.
2. Else:
 - i. For each $\xi' \in \{\xi_{\text{mid}}, \xi_{\text{mid}}^+, \xi_{\text{mid}}^-\}$, if $\min(\text{dist}(\xi', \partial\Omega), \text{dist}(\xi', \Xi')) \geq \sigma \|\zeta - \xi\|$, then $\Xi' := \Xi' \cup \{\xi'\}$.
 - ii. Determine two middle points $\xi'_-, \xi'_+ \in \partial\Omega$ and set $\Xi' := \Xi' \cup \{\xi'_+, \xi'_-\}$.

III. If $\Xi'_{\text{int}} = \Xi_{\text{int}}$, then $\tau := \gamma \tau$ and go to Step II, Else STOP and return Ξ' .

Nhận xét:

Thuật toán bắt đầu với tập các tâm Ξ không thích nghi. Trong các thử nghiệm số Phần 3.1, Chương 3, để đánh giá hiệu quả của các thuật toán sinh tâm với cùng bộ tâm ban đầu của miền rời rạc, tập các tâm Ξ ban đầu được tạo bởi PDE Toolbox trong MATLAB cho phương pháp phần tử hữu hạn.

Tương tự trong [48], các tâm ứng viên $\{\xi_{\text{mid}}, \xi_{\text{mid}}^+, \xi_{\text{mid}}^-, \xi_-, \xi_+\}$ trong Bước II được xác định như sau:

- $\xi_{\text{mid}} := (\zeta + \xi)/2$, $\xi_{\text{mid}}^+ := \xi_{\text{mid}} + d\bar{v}$ và $\xi_{\text{mid}}^- := \xi_{\text{mid}} - d\bar{v}$, trong đó $d := \|\zeta - \xi\|/2$ và \bar{v} là véc tơ đơn vị vuông góc với cạnh $\zeta\xi$.
- Các tâm ξ'_- hoặc ξ'_+ được xác định khi $\xi \in \partial\Xi$ như sau: Tìm các lân cận ξ_-, ξ_+ của ξ theo các hướng trên $\partial\Xi$, tính 2 trung điểm $\xi'_-, \xi'_+ \in \partial\Omega$ của các đoạn thẳng ξ, ξ_- và ξ, ξ_+ .

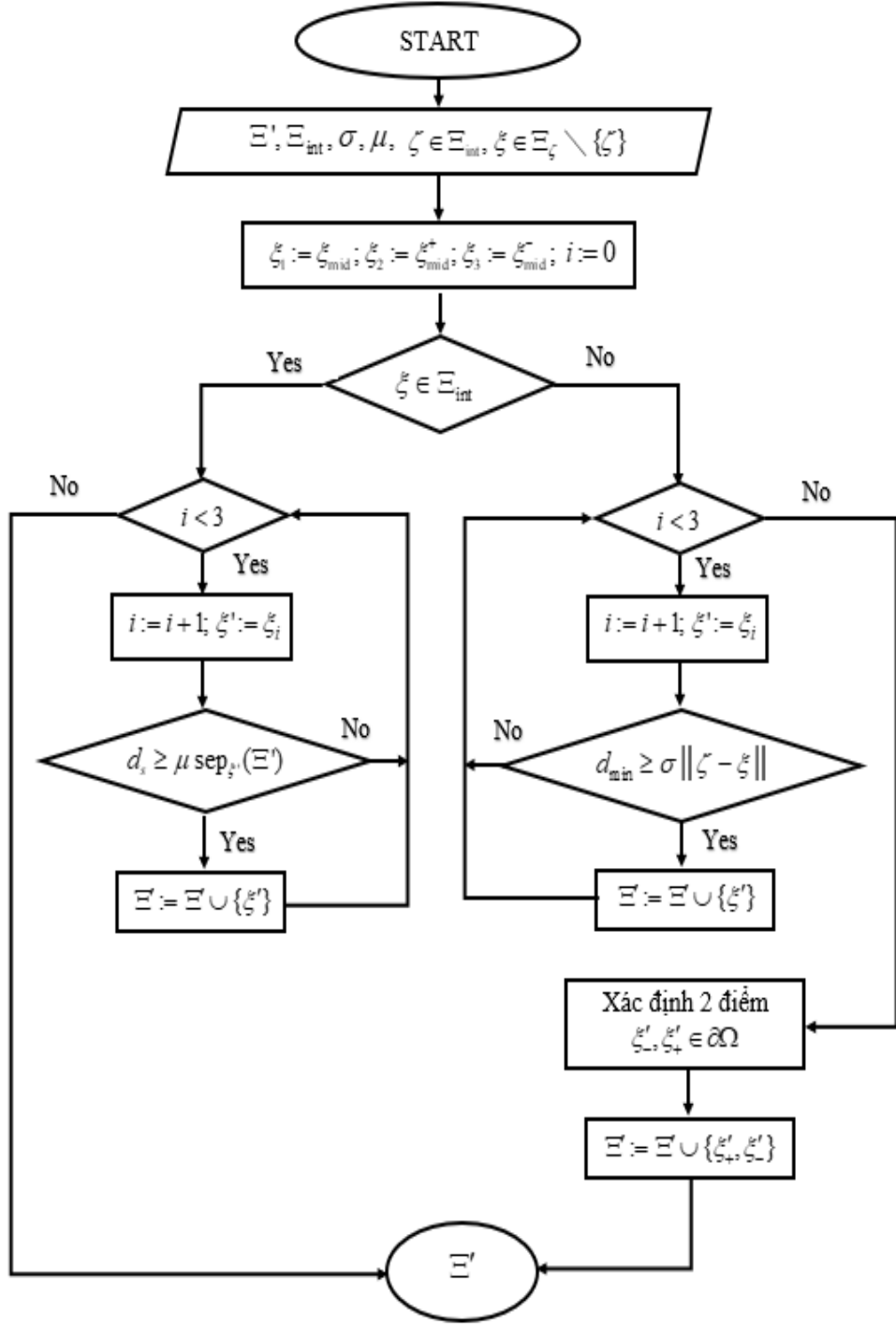
Giá trị của tham số σ tại Bước II2 được chọn bằng 0.5 (tương tự Thuật toán 2 trong [48]). Tuy nhiên đối với các Bài toán có miền hình học có góc nhọn như Bài toán 1 (xem Hình 3.2) và Bài toán 2b, 2c (xem Hình 3.7(c-f)) thì giá trị σ nên chọn khác, cụ thể là: Chọn $\sigma = 0.75$ cho Bài toán 1, $\sigma = 0.4$ cho Bài toán 2b và $\sigma = 0.8$ cho Bài toán 2c.

Giá trị của μ trong công thức 2.33 tỷ lệ thuận với tính đều, tức là nếu giá trị của μ càng cao thì việc sinh tâm sẽ ưu tiên kết nạp các tâm có tính đều. Trong các thử nghiệm số chủ yếu chọn là $\mu = 0.8$. Tuy nhiên, đối với những Bài toán có nghiệm là hàm có dao động lớn như Bài toán 6 thì giá trị tham số μ nên giảm, vì nó cần ưu tiên cho mật độ tâm cao hơn tính đều, nên chọn tham số $\mu = 0.5$ cho Bài toán 6b và $\mu = 0.75$ cho Bài toán 6a.

Hình 2.5 biểu diễn lưu đồ chèn thêm các tâm mới trên mỗi cạnh đánh dấu $\zeta\xi$ trong Bước II của thuật toán.

Độ phức tạp của thuật toán sinh tâm OT2

Mệnh đề 2.5.3. *Đặt $n = \#\Xi$ và N_c là số tâm ứng viên. Khi đó độ phức tạp tính toán của Thuật toán OT2 là $\mathcal{O}(N_c \log(n))$.*



Hình 2.5: Lưu đồ chèn thêm các tâm mới trên mỗi cạnh đánh dấu $\zeta \xi$ trong Bước II của Thuật toán OT2, với $d_s = \text{dist}(\xi', \Xi')$ và $d_{\min} = \min(\text{dist}(\xi', \partial\Omega), \text{dist}(\xi', \Xi'))$.

Chứng minh. I. Chi phí tính toán ngưỡng độ lệch tại Bước I:

1. Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, việc tính độ lệch được thực hiện 1 lần là $\mathcal{O}(1)$, do đó tổng thời gian xác định tập $\varepsilon(\Xi)$ là $\mathcal{O}(n)$ với $n := \#\Xi$.

Chi phí sắp xếp độ lệch bằng với độ phức tạp của thuật toán sắp xếp nhanh là $\mathcal{O}(n \log n)$.

2. Chi phí xác định μ tại Bước I.2 chỉ thực hiện 1 lần là $\mathcal{O}(1)$.

3. Chi phí xác định ngưỡng độ lệch τ tại Bước I.3 chỉ thực hiện 1 lần là $\mathcal{O}(1)$.

Do đó tổng thời gian tính toán tại Bước I là $\mathcal{O}(n \log n)$.

II. Chi phí tính toán tại Bước II với mỗi cạnh ứng viên $\zeta \xi$:

Giả sử sắp xếp các điểm bằng cây k-dtree đã được thực hiện với chi phí tính toán là $\mathcal{O}(n \log n)$ [6].

Với mỗi tâm ứng viên ξ' , chi phí để chèn thêm tâm vào k-dtree là $\mathcal{O}(\log n)$ (xem [1, Chương 3, trang 19-20]).

Chi phí để tính khoảng cách $\text{dist}(\xi', \Xi)$ là $\mathcal{O}(\log n)$ [6, 38, 60].

Do đó chi phí tính toán cho một tâm ứng viên trong trường hợp thực hiện tất cả các bước là $\mathcal{O}(\log n)$.

Gọi N_c là số tâm ứng viên, khi đó thời gian tính toán tại Bước II là $\mathcal{O}(N_c \log n)$.

III. Bước III chỉ thực hiện 1 lần nên thời gian tính toán là $\mathcal{O}(1)$.

Vậy thời gian tính toán của Thuật toán OT2 là $\mathcal{O}(N_c \log n)$. □

2.6 Kết luận

Trong chương này chúng tôi đã trình bày các kết quả:

- Cách tính trọng số RBF-FD bằng nội suy RBF với 3 trường hợp, trọng số RBF-FD không có thành phần hằng số, trọng số RBF-FD với thành phần hằng số và trọng số RBF-FD với thành phần đa thức. Các cách tính này là cơ sở của phương pháp không lưới RBF-FD.
- Các thuật toán chọn tâm (chọn giá véc tơ trọng số Ξ_ζ) cho phương pháp RBF-FD trong không gian 2 chiều, đồng thời đề xuất thuật toán mới OT1 cho các bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm có kỳ dị, hoặc có độ dao động mạnh. Thuật toán đề xuất có độ phức tạp $\mathcal{O}(n)$ nếu đầu vào của thuật toán là m điểm gần

nhất. So với các thuật toán đã công bố trước thì thuật toán được đề xuất có chi phí tính toán giảm.

- Đề xuất các thuật toán chọn giá véc tơ trọng số Ξ_ζ cho phương pháp RBF-FD trong không gian 3 chiều, như 8-Octants, 16-Octants, oct-dist, đồng thời giới thiệu các thuật toán tet, k-near, pQR4sel, pQR3, pQR4 áp dụng cho phương pháp RBF-FD.
- Các thuật toán sinh tâm thích nghi cho phương pháp RBF-FD trong không gian 2 chiều. Đề xuất thuật toán sinh tâm thích nghi mới OT2, có độ phức tạp là $\mathcal{O}(N_c \log n)$. Thuật toán được đề xuất có chi phí tính toán giảm so với các thuật toán trước đó.

Chương 3

THỬ NGHIỆM SỐ

Trong chương này chúng tôi sẽ trình bày các thử nghiệm số trong không gian 2 chiều và trong không gian 3 chiều để đánh giá hiệu quả của các thuật toán sinh tâm thích nghi và thuật toán chọn giá véc tơ trọng số được trình bày trong Chương 2. Với các thử nghiệm số trong không gian 2 chiều trên các bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm có kỳ dị, hoặc có độ dao động mạnh, chúng tôi đối sánh kết quả của phương pháp RBF-FD sử dụng kết hợp hai thuật toán mới được đề xuất đó là Thuật toán chọn tâm OT1 và Thuật toán sinh tâm OT2, với kết quả của FEM và kết quả của phương pháp RBF-FD khi sử dụng kết hợp Thuật toán chọn tâm ODP1 và Thuật toán sinh tâm ODP2. Trong không gian 3 chiều, chúng tôi so sánh kết quả của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán chọn tâm, như Thuật toán k-near, Thuật toán tet, Thuật toán 8-Octants, Thuật toán 16-Octants, Thuật toán oct-dist, Thuật toán pQR với các phiên bản pQR4se1, pQR3, pQR4, với kết quả của FEM bậc nhất và FEM bậc hai, trên các bài toán có miền lồi hoặc miền hình học phức tạp trong thực tế, trong đó tập $\Xi \subset \bar{\Omega}$ của các bài toán được rời rạc bởi các cách khác nhau, như đỉnh của các tứ diện, lưới đều hoặc điểm Halton.

3.1 Thử nghiệm số trong không gian 2 chiều

Để đánh giá độ chính xác của nghiệm xấp xỉ \hat{u} của (2.2) so với nghiệm chính xác u của (1) của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán khác nhau và của FEM, chúng tôi sử dụng sai số trung bình bình phương rms xác định bởi công thức (2.17) và ký hiệu là E_{rc} , cùng với giá trị lớn nhất của nó trên các tâm là E_{mc} , được tính bởi công thức

$$E_{rc} = \left(\frac{1}{N} \sum_{\zeta \in \Xi_{\text{int}}} (\hat{u}_{\zeta} - u(\zeta))^2 \right)^{1/2}, \quad (3.1)$$

$$E_{mc} = \max |\hat{u}_{\zeta} - u(\zeta)|, \quad (3.2)$$

trong đó $N = \#\Xi_{\text{int}}$ là số tâm trong miền rời rạc. Với FEM, tập Ξ_{int} là các đỉnh trong miền của các tam giác. Bên cạnh so sánh sai số trên các tâm, chúng tôi còn so sánh

sai số rms tại các nút lưới đều E_{mg} và giá trị lớn nhất tương ứng của nó là E_{mg} , với bước lưới 0.001.

Ngoài so sánh sai số, chúng tôi còn cung cấp thông tin về độ lệch lớn nhất, ngưỡng của độ lệch, số điều kiện của ma trận hệ số và mật độ ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2) được tính bởi công thức (2.16).

Các trọng số $w_{\zeta, \xi}$, $\xi \in \Xi_{\zeta}$ của phương pháp RBF-FD trong công thức (2.3) được tính bằng nội suy hàm Gauss

$$\varphi(r) = e^{-\varepsilon^2 r^2},$$

trong đó ε là tham số hình dạng được chọn cố định $\varepsilon = 10^{-5}$. Trong [17] đã chỉ ra kết quả tốt với giá trị tham số hình dạng ε nhỏ. Khi đó, với D là toán tử Laplace Δ , thì ma trận $\Phi_{\Xi_{\zeta}}$ và $\Delta\Phi_i(\zeta)$ là

$$\Phi_{\Xi_{\zeta}} = [e^{-\varepsilon^2 \|\xi_i - \xi_j\|^2}]_{i,j=0}^k, \quad \Delta\Phi_i(\zeta) = 4\varepsilon^2 e^{-\varepsilon^2 \|\zeta - \xi_i\|^2} (\varepsilon^2 \|\zeta - \xi_i\|^2 - 1).$$

Trong trường hợp toán tử vi phân D có dạng

$$Du(x) = \Delta u(x) + b(x)u(x), \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad (3.3)$$

với $b \leq 0$ là hàm số đủ trơn. Với mỗi $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$ và $\Xi_{\zeta} = \{\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_k\} \subset \Xi$, $\xi_0 = \zeta$, ta có

$$\Delta u(\zeta) \approx \Delta s(\zeta) = \sum_{j=0}^k w_j u(\xi_j),$$

khi đó

$$Du(\zeta) \approx \sum_{j=0}^k w_j u(\xi_j) + b(\zeta)u(\zeta).$$

Do vậy, trọng số $w_{\zeta, \xi}$, $\xi \in \Xi_{\zeta}$ trong công thức (2.3) được tính bởi công thức

$$w_{\zeta, \zeta} = w_0 + b(\zeta), \quad w_{\zeta, \xi_j} = w_j, \quad j = 1, 2, \dots, k.$$

Tương tự trong [16, 48], để thuận lợi trong việc so sánh kết quả của phương pháp không lưới RBF-FD với phương pháp FEM, trong các thử nghiệm số miền rời rạc khởi tạo ban đầu được tạo bởi các tâm rời rạc của FEM.

Các nhãn được sử dụng trong kết quả thử nghiệm số của các bài toán:

- rms FEM, max FEM, FEM lần lượt là sai số rms, sai số rms lớn nhất và kết quả của FEM sử dụng PDE Toolbox trong MATLAB với các tham số được giới thiệu như trong [50, function adaptmesh].

- rms RBF-FD 17, max RBF-FD 17, RBF-FD 17 lần lượt là sai số rms, sai số rms lớn nhất và kết quả của phương pháp RBF-FD sử dụng kết hợp Thuật toán ODP1 và Thuật toán ODP2 được đề xuất trong [48].
- rms RBF-FD, max RBF-FD, RBF-FD lần lượt là sai số rms, sai số rms lớn nhất và kết quả của phương pháp RBF-FD sử dụng kết hợp 2 thuật toán mới được đề xuất đó là Thuật toán OT1 và Thuật toán OT2.

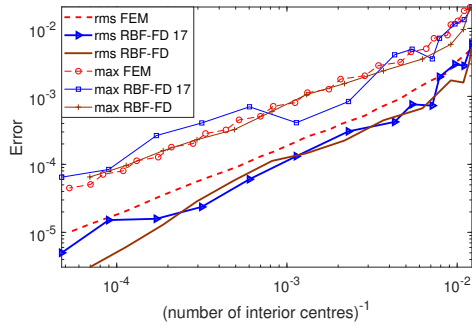
Giá trị của các tham số sử dụng trong Thuật toán OT2 với "TP" là tên bài toán:

Bảng 3.1: Giá trị các tham số μ , γ và ρ sử dụng trong Thuật toán OT2 của các bài toán.

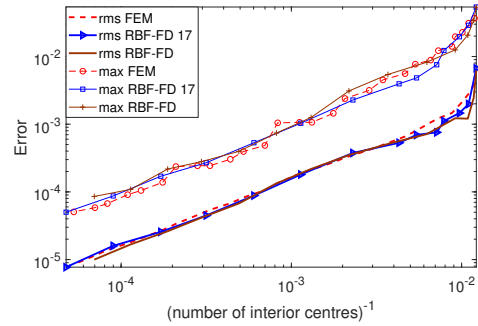
Tham số \ TP	1	2				3	4	5		6	
		a	b	c	d			a	b	a	b
γ	0.6	0.5				0.65	0.35	0.2		0.05	0.08
ρ	0.3	0.5	0.4	0.3	0.2	0.3	0.4	0.3		0.5	0.3
μ	0.8								0.75	0.7	

3.1.1 Bài toán có miền hình học phức tạp

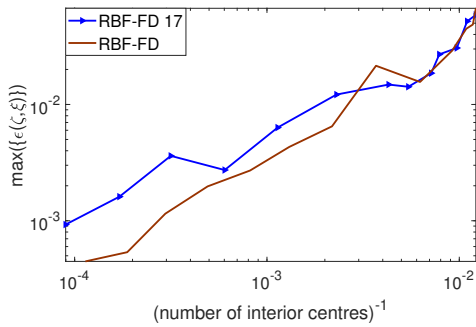
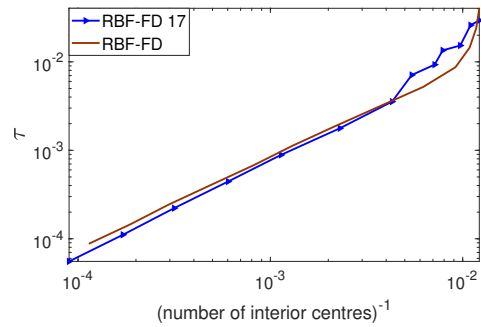
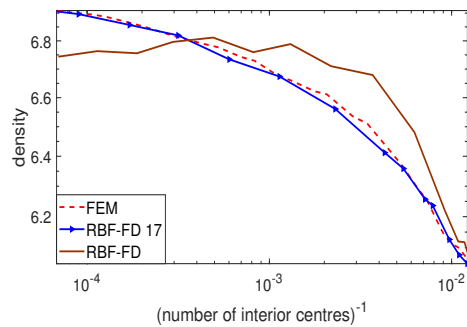
Chúng tôi tiếp tục thử nghiệm Bài toán 1 trên bộ tâm thích nghi của phương pháp RBF-FD 17 và RBF-FD. Kết quả thử nghiệm số được biểu diễn trong Hình 3.1 và Hình 3.2. Hình 3.1(a) cho thấy sai số rms trên tâm của RBF-FD luôn ổn định và nhỏ hơn của RBF-FD 17 và của FEM, kể cả khi số tâm trong miền tăng lên. Sự ổn định của RBF-FD còn được thể hiện bằng kết quả của đường cong max RBF-FD so với đường cong max RBF-FD 17 trên các tâm thích nghi. Hình 3.1(b) cho thấy sai số trên lưới của RBF-FD, RBF-FD 17 và của FEM luôn xấp xỉ nhau. Hình 3.1(c) cho thấy độ lệch lớn nhất $\max(\{\epsilon(\zeta, \xi)\})$ của RBF-FD giảm so với của RBF-FD 17 khi số tâm trong miền tăng lên, trong khi ngưỡng của độ lệch τ trong Hình 3.1(d) của RBF-FD tăng so với của RBF-FD 17, điều đó chứng tỏ RBF-FD đã chèn tâm vào những vị trí tốt. Hơn nữa Hình 3.1(e) cho thấy mật độ ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2) của RBF-FD nhỏ hơn của RBF-FD 17 và cũng nhỏ hơn mật độ ma trận cứng của FEM, còn số điều kiện của ma trận hệ số của RBF-FD và của RBF-FD 17 trong Hình 3.1(f) xấp xỉ nhau. Hình 3.2(a, b) cho thấy sai số $u - \hat{u}$ ứng với nghiệm của RBF-FD trên 575 tâm như trong Hình 3.2(c) có độ mịn hơn sai số ứng với nghiệm của RBF-FD 17 trên 537 tâm như trong Hình 3.2(d).



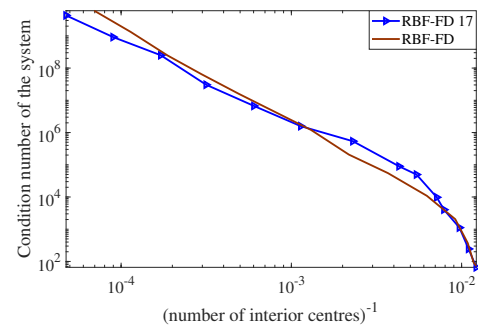
(a) Sai số trên tâm



(b) Sai số trên lưới đều

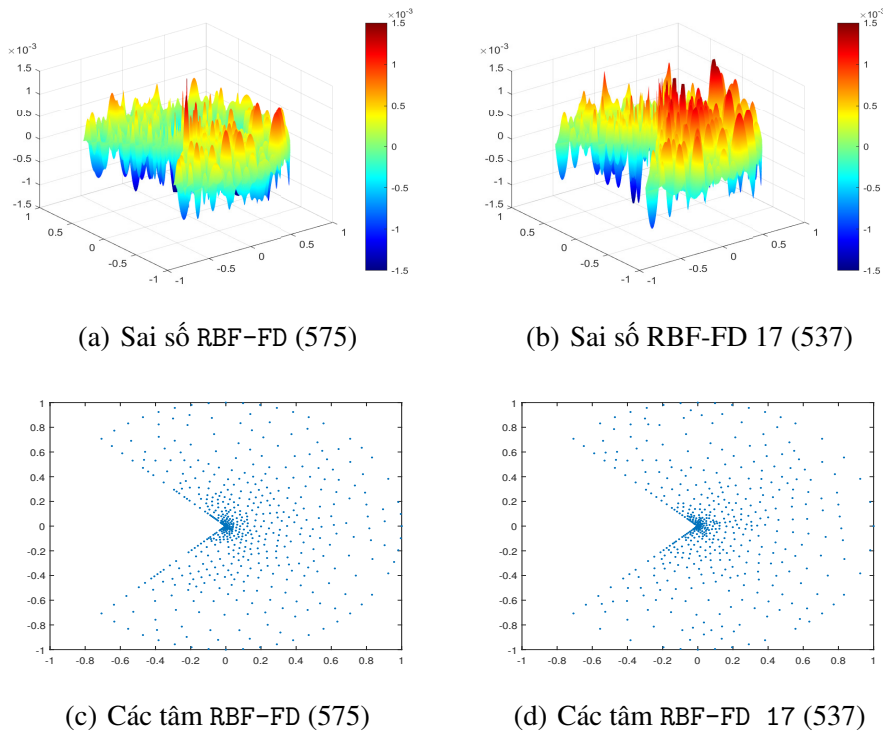
(c) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$ (d) Ngưỡng của độ lệch τ 

(e) Mật độ ma trận hệ số



(f) Số điều kiện ma trận hệ số

Hình 3.1: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 1: (a) Các sai số E_{rc} và E_{mc} trên tâm của FEM, RBF-FD 17, RBF-FD. (b) Sai số trên lưới đều E_{rg} và E_{mg} của các phương pháp FEM, RBF-FD 17, RBF-FD. (c) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$ của phương pháp RBF-FD 17, RBF-FD được tính tại Bước I.1. của các thuật toán ODP2, OT2. (d) Ngưỡng của độ lệch τ của phương pháp RBF-FD 17, RBF-FD được tìm tại Bước I.1. của Thuật toán ODP2 và tại Bước I.3. của Thuật toán OT2. (e) Mật độ ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2). (f) Số điều kiện ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2).



Hình 3.2: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 1: (ab) Hàm sai số $u - \hat{u}$ ứng với nghiệm của RBF-FD trên 575 tâm như trong Hình (c) và nghiệm của RBF-FD 17 trên 537 tâm như trong Hình (d).

Bài toán 2. [46, Section 2.2: Reentrant Corner] Xét bài toán Dirichlet với phương trình Laplace $\Delta u = 0$ trong miền $\Omega_\omega = (-1, 1)^2 \cap \{(r, \varphi) : 0 < \varphi < \omega\}$, trong đó r, φ là hệ tọa độ cực, với một số giá trị $\omega \in (0, 2\pi]$. Điều kiện biên Dirichlet được chọn thỏa mãn nghiệm giải tích $r^\alpha \sin(\alpha\varphi)$ trong hệ tọa độ cực, trong đó $\alpha = \pi/\omega$ trong các trường hợp sau

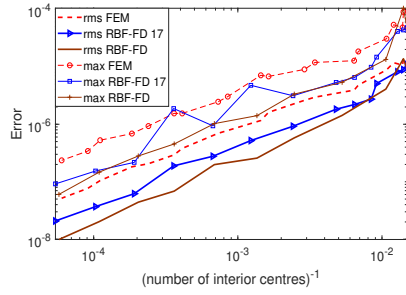
(a) $\omega = \pi + 0.01$.

(b) $\omega = 5\pi/4$.

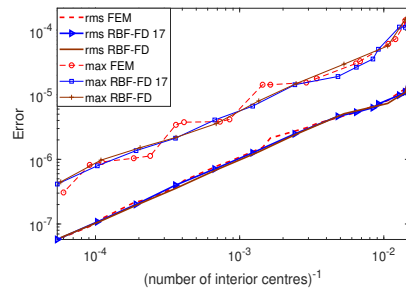
(c) $\omega = 7\pi/4$.

(d) $\omega = 2\pi$.

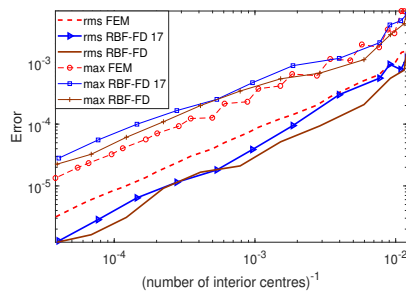
Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 2 được biểu diễn trong từ Hình 3.3 đến Hình 3.7. Chúng tôi không xét trường hợp $\omega = 3\pi/2$ vì miền này đã xét trong Bài toán 1. Với trường hợp $\omega = 2\pi$, chúng tôi loại bỏ một số tâm nằm trên khe trong các tâm ban đầu được tạo bởi PDE Toolbox trong MATLAB [50], vì vậy dẫn đến một số kết quả không ổn định trong Hình 3.3(g, h) và Hình 3.6(g, h).



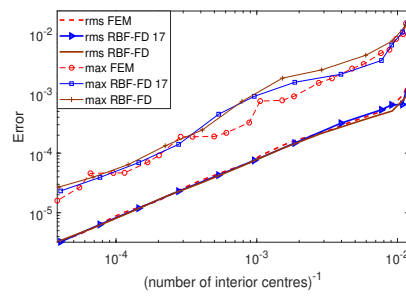
(a) Sai số trên tâm với $\omega = \pi + 0.01$



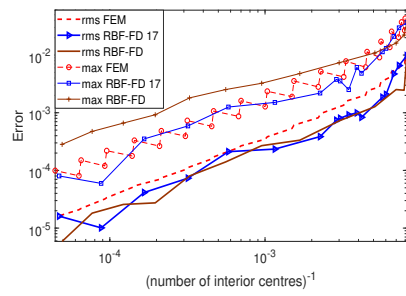
(b) Sai số trên lưới với $\omega = \pi + 0.01$



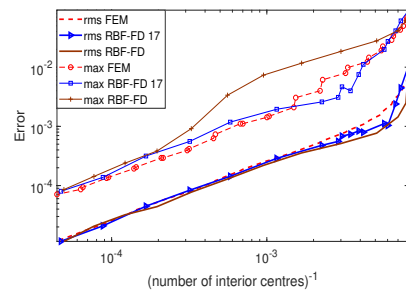
(c) Sai số trên tâm với $\omega = 5\pi/4$



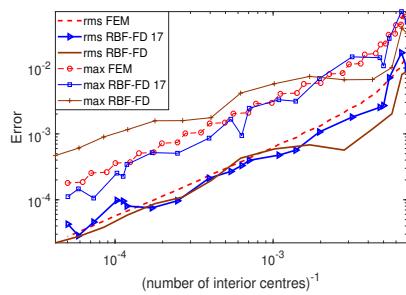
(d) Sai số trên lưới với $\omega = 5\pi/4$



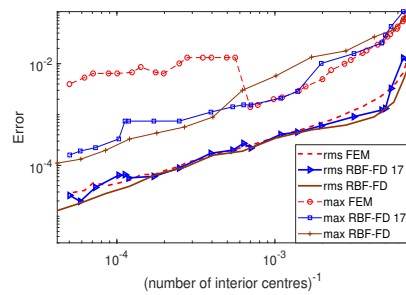
(e) Sai số trên tâm với $\omega = 7\pi/4$



(f) Sai số trên lưới với $\omega = 7\pi/4$

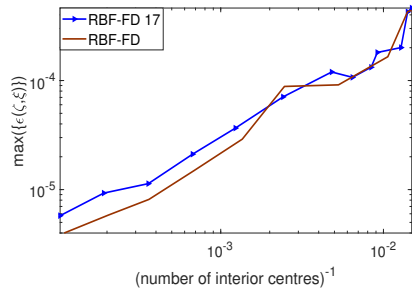


(g) Sai số trên tâm với $\omega = 2\pi$

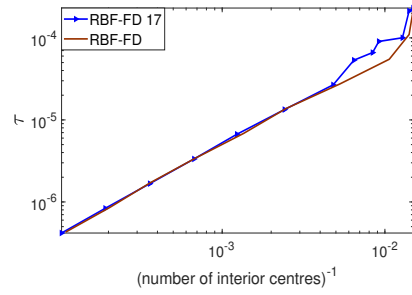


(h) Sai số trên lưới với $\omega = 2\pi$

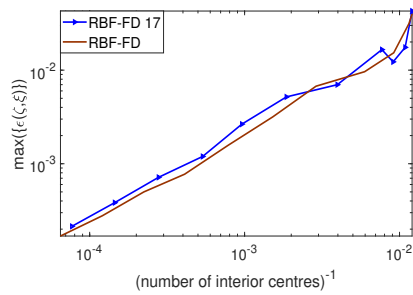
Hình 3.3: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 2: Các sai số E_{rc} và E_{mc} của nghiệm trên các tâm rời rạc được tạo bởi các lần làm mịn liên tiếp ứng với các giá trị của ω (bên trái) và các sai số E_{rg} và E_{mg} của nghiệm nội suy trên lưới đều (bên phải).



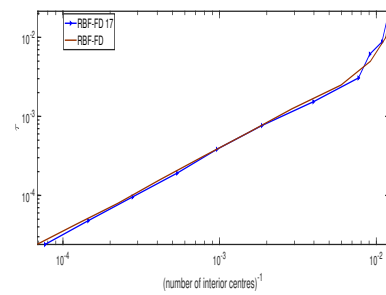
(a) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$ với $\omega = \pi + 0.01$



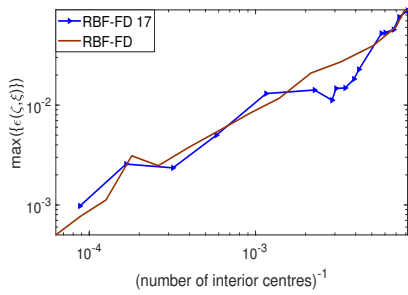
(b) Ngưỡng của độ lệch τ với $\omega = \pi + 0.01$



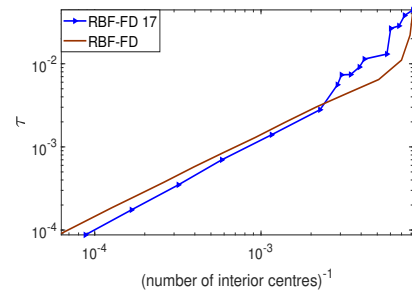
(c) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$ với $\omega = 5\pi/4$



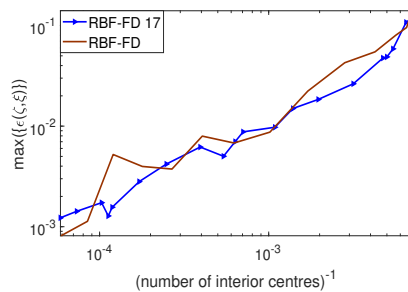
(d) Ngưỡng của độ lệch τ với $\omega = 5\pi/4$



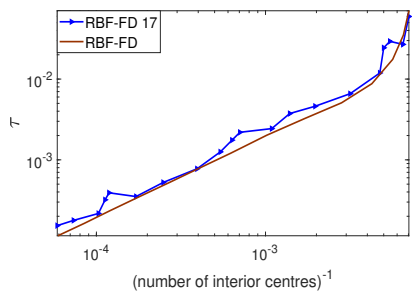
(e) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$ với $\omega = 7\pi/4$



(f) Ngưỡng của độ lệch τ với $\omega = 7\pi/4$

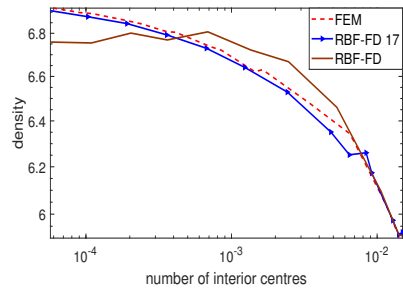
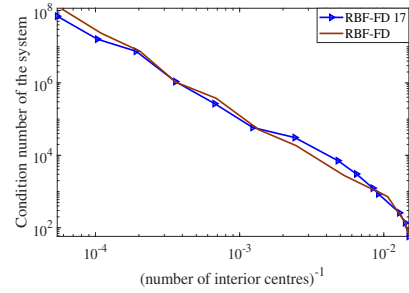
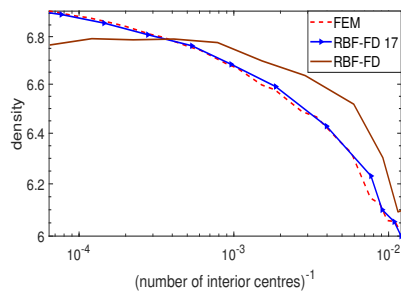
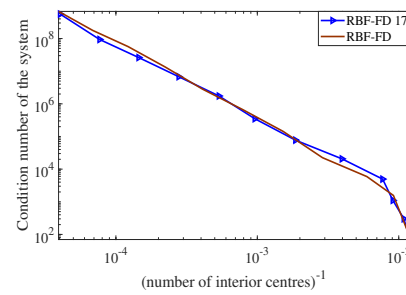
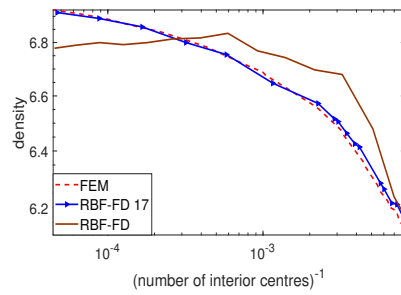
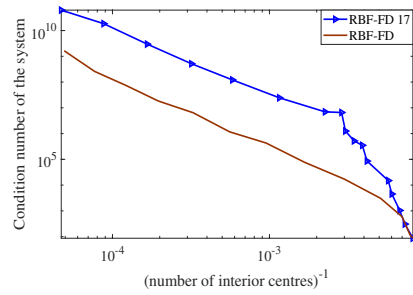
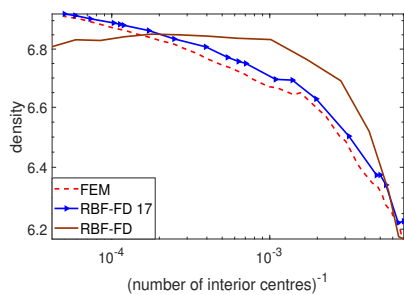
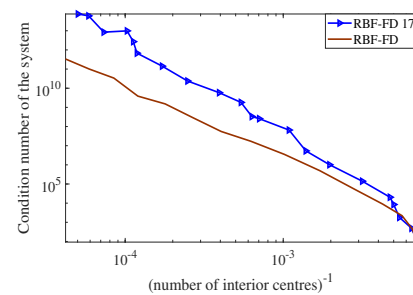


(g) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$ với $\omega = 2\pi$

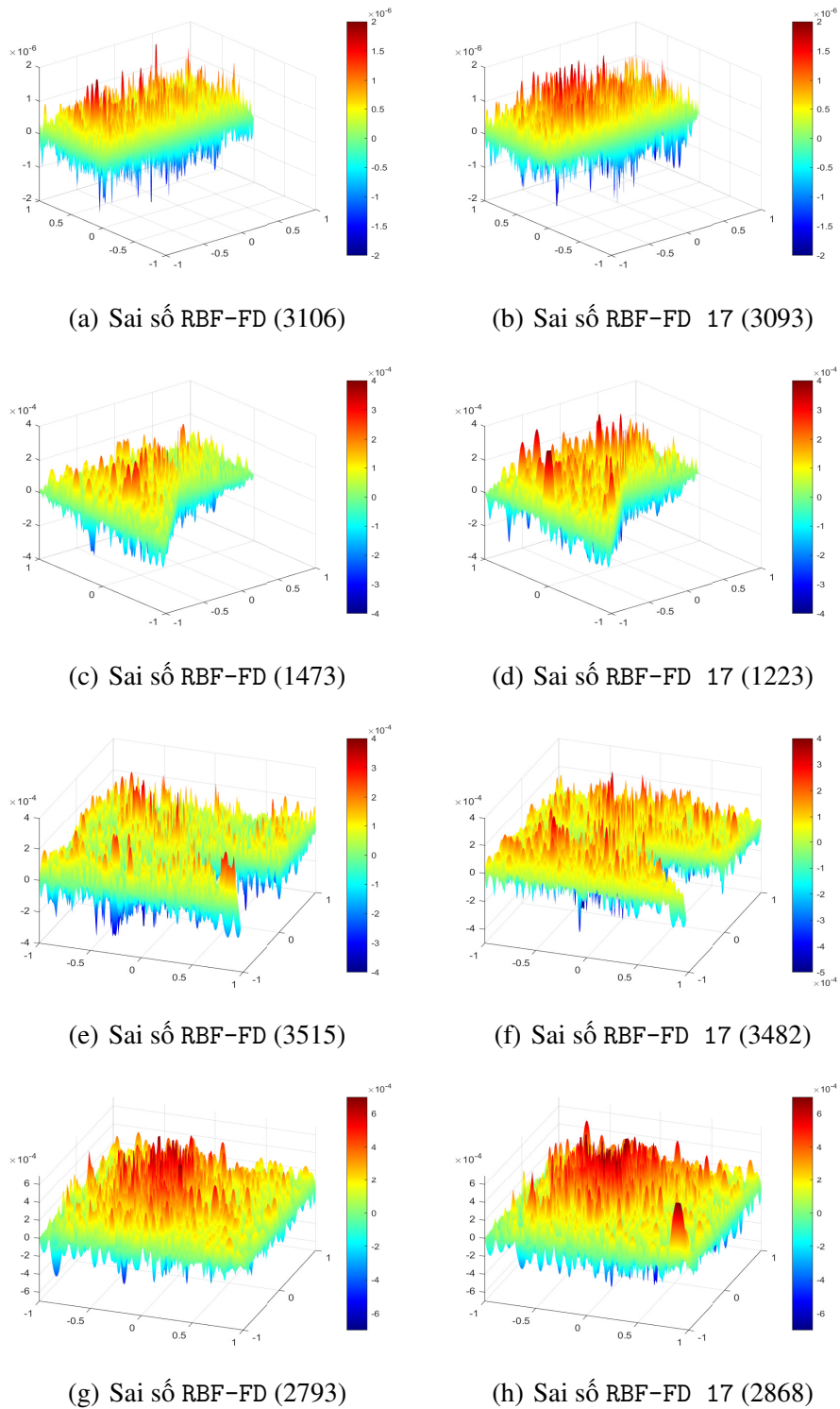


(h) Ngưỡng của độ lệch τ với $\omega = 2\pi$

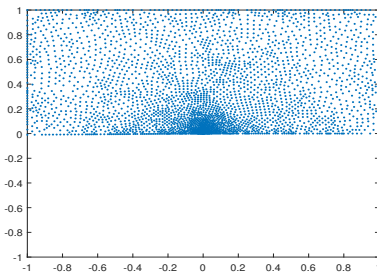
Hình 3.4: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 2: Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$ (bên trái) và ngưỡng của độ lệch τ (bên phải).

(a) Mật độ ma trận hệ số với $\omega = \pi + 0.01$ (b) Số điều kiện ma trận hệ số với $\omega = \pi + 0.01$ (c) Mật độ ma trận hệ số với $\omega = 5\pi/4$ (d) Số điều kiện ma trận hệ số với $\omega = 5\pi/4$ (e) Mật độ ma trận hệ số với $\omega = 7\pi/4$ (f) Số điều kiện ma trận hệ số với $\omega = 7\pi/4$ (g) Mật độ ma trận hệ số với $\omega = 2\pi$ (h) Số điều kiện ma trận hệ số với $\omega = 2\pi$

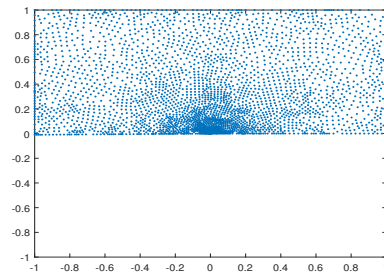
Hình 3.5: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 2: Mật độ ma trận hệ số và số điều kiện ma trận hệ số của Bài toán 2 ứng với các phương pháp FEM, RBF-FD 17, RBF-FD.



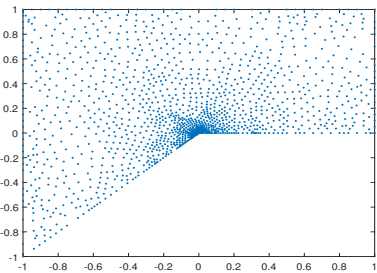
Hình 3.6: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 2: Hàm sai số $u - \hat{u}$ ứng với nghiệm của RBF-FD (bên trái) và nghiệm của RBF-FD 17 (bên phải) trên các miền ứng với số tâm như trong Hình 3.7.



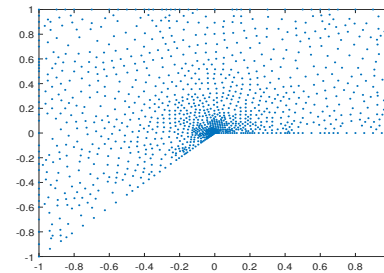
(a) 3106 tâm RBF-FD



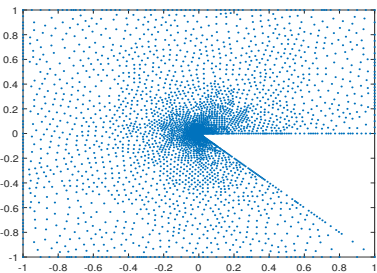
(b) 3093 tâm RBF-FD 17



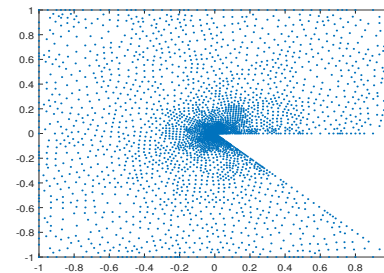
(c) 1473 tâm RBF-FD



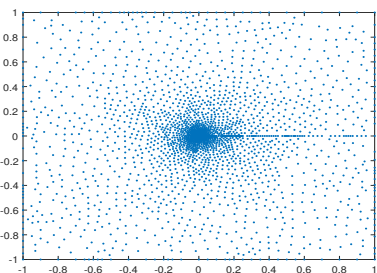
(d) 1223 tâm RBF-FD 17



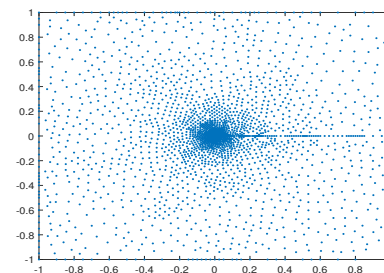
(e) 3515 tâm RBF-FD



(f) 3482 tâm RBF-FD 17



(g) 2793 tâm RBF-FD

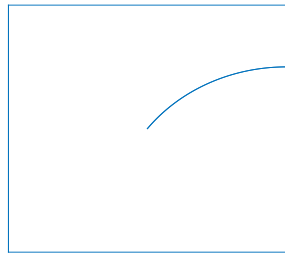


(h) 2868 tâm RBF-FD 17

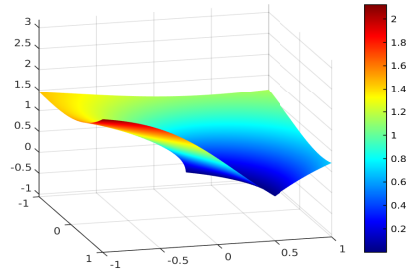
Hình 3.7: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 2: Các tâm thích nghi được tạo bởi phương pháp RBF-FD (bên trái) và RBF-FD 17 (bên phải) ứng với các sai số được biểu diễn trong Hình 3.6.

Tương tự Bài toán 1, kết quả thử nghiệm số cho thấy, sai số rms trên tâm của RBF-FD luôn ổn định và nhỏ hơn của RBF-FD 17 và của FEM, điều này cũng được thể hiện trong đồ thị biểu diễn sự phân bố của hàm sai số $u - \hat{u}$ (Hình 3.6) và các tâm tương ứng Hình 3.7, còn sai số trên lưới của RBF-FD, RBF-FD 17 và của FEM luôn xấp xỉ nhau. Bên cạnh đó mật độ ma trận hệ số của RBF-FD cũng nhỏ hơn của RBF-FD 17 và của FEM khi số tâm thích nghi tăng lên.

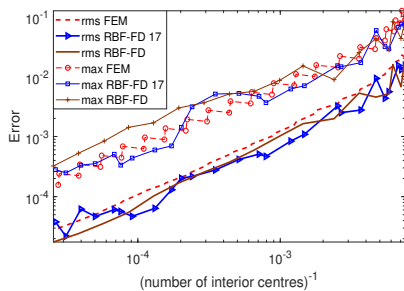
Bài toán 3. (Curved Slit) [48, Section 4: Numerical results] Xét bài toán Dirichlet với phương trình Laplace $\Delta u = 0$ trên miền $\Omega = (-1, 1)^2$ loại đi các điểm thuộc cung cong của đường tròn tâm tại $(1, -0.75)$ bán kính 1.25 từ điểm $(0, 0)$ đến $(1, 0.5)$ như Hình 3.8(a). Điều kiện biên Dirichlet thỏa mãn nghiệm giải tích của bài toán là $u(x, y) = \text{Re} \sqrt{(3 - 4i)z / (z - 2)}$, với $z = x + iy$.



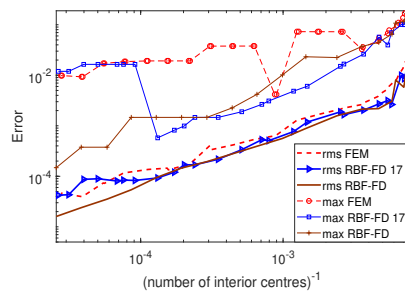
(a) Miền Ω của bài toán



(b) Nghiệm chính xác của bài toán

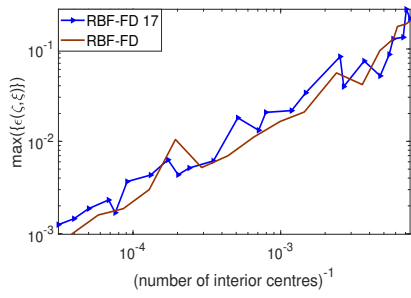


(c) Sai số trên tâm

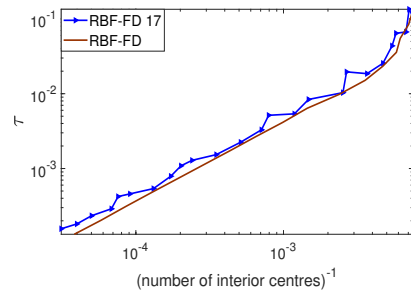


(d) Sai số trên lưới

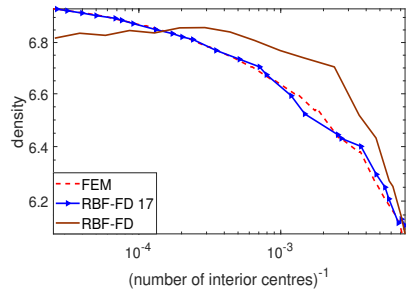
Hình 3.8: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 3: (a) Miền Ω với cung cong chia miền (trái) (b) Nghiệm chính xác (phải). (c) Các sai số E_{rc} và E_{mc} của nghiệm trên các tâm rời rạc được tạo bởi các lần làm mịn liên tiếp. (d) Các sai số E_{rg} và E_{mg} của nghiệm nội suy trên lưới đều.



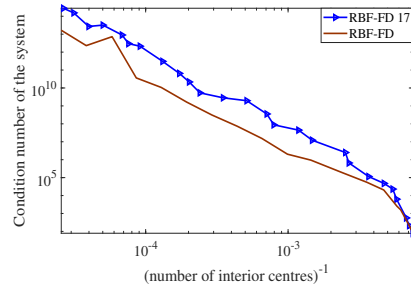
(a) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$



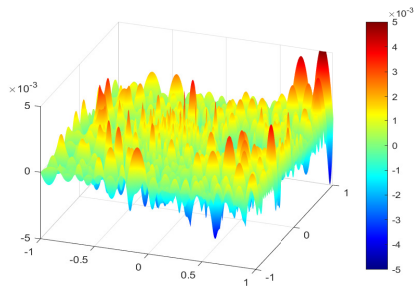
(b) Ngưỡng của độ lệch τ



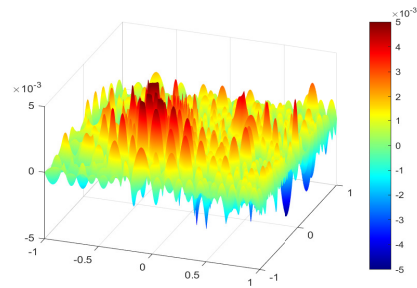
(c) Mật độ ma trận hệ số



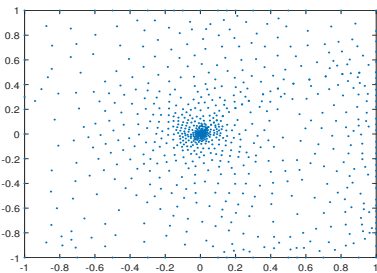
(d) Số điều kiện ma trận hệ số



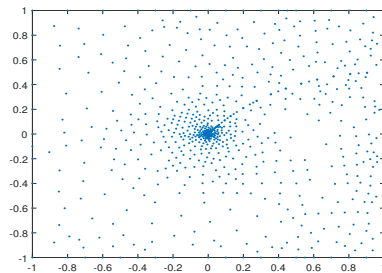
(e) Sai số RBF-FDr (841)



(f) Sai số RBF-FD 17 (839)



(g) Các tâm RBF-FD (841)



(h) Các tâm RBF-FD 17 (839)

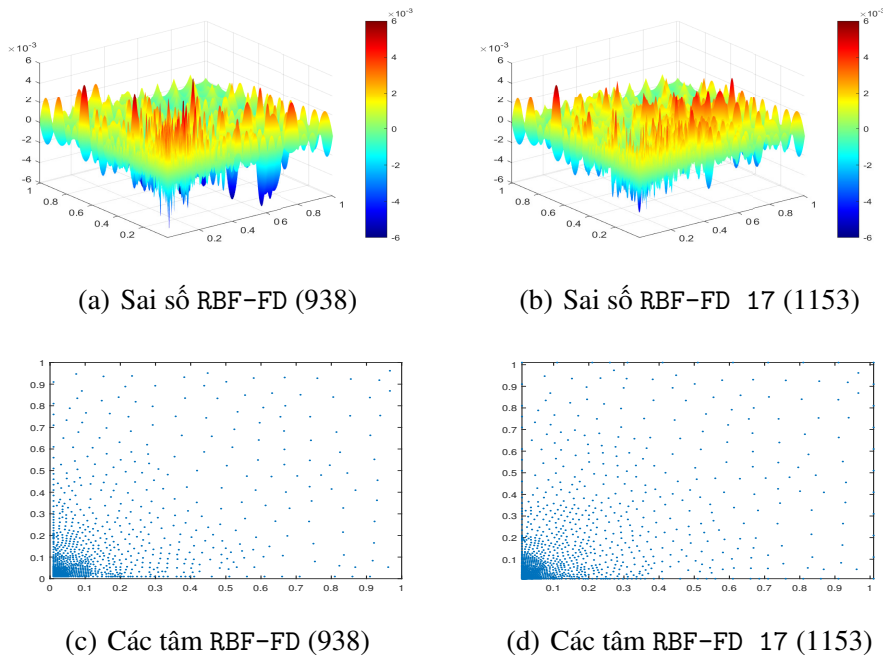
Hình 3.9: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 3: (a) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$. (b) Ngưỡng của độ lệch τ . (c) Mật độ ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2). (d) Số điều kiện ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2). (e, f) Hàm sai số $u - \hat{u}$ ứng với nghiệm của RBF-FD trên 841 tâm như trong Hình (g) và nghiệm của RBF-FD 17 trên 839 tâm như trong Hình (h).

Miền Ω và nghiệm chính xác u của Bài toán 3 được biểu diễn trong Hình 3.8(a). Nghiệm chính xác có dạng \sqrt{r} tại gốc tọa độ, nên điểm kỳ dị giống như đối với miền khe của Bài toán 2 với $\omega = 2\pi$. Kết quả thử nghiệm số được biểu diễn trong Hình 3.8 và Hình 3.9 tương tự như kết quả của Bài toán 2 với $\omega = 2\pi$, điều này cho thấy độ cong của khe không gây ra khó khăn đáng kể nào cho phương pháp RBF-FD.

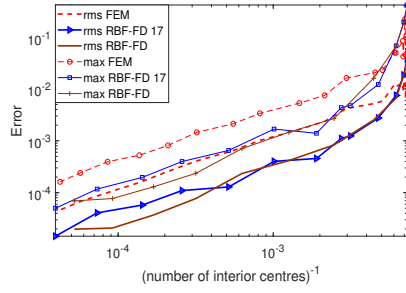
3.1.2 Bài toán nghiệm có kỳ dị hoặc có độ dao động mạnh

Bài toán 4. Xét phương trình Laplace $\Delta u = 0$ trong miền $\Omega = (0.01, 1.01)^2$ và điều kiện biên Dirichlet thỏa mãn nghiệm giải tích $u(x, y) = \log(x^2 + y^2)$.

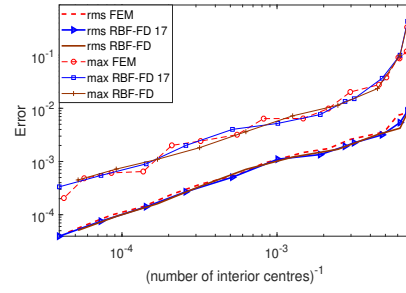
Nghiệm chính xác u của bài toán có kỳ dị tại gốc tọa độ được minh họa trong Hình 3.12(a). Kết quả thử nghiệm số của bài toán được biểu diễn trong Hình 3.10 và Hình 3.11 tương tự như kết quả của các bài toán 1, Bài toán 2 và Bài toán 3, đặc biệt Hình 3.11 cho thấy mật độ ma trận hệ số của RBF-FD nhỏ hơn đáng kể mật độ ma trận hệ số của RBF-FD 17 và của FEM khi số tâm trong miền lớn hơn 1000. Điều đó chứng tỏ với bài toán hàm có kỳ dị cũng không gây trở ngại đáng kể cho phương pháp RBF-FD.



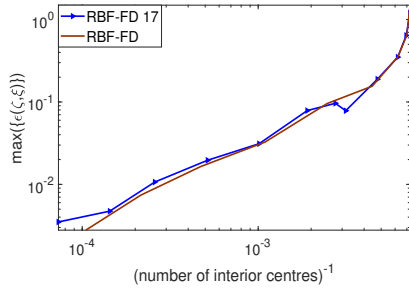
Hình 3.10: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 4: (a, b) Hàm sai số $u - \hat{u}$ ứng với nghiệm của RBF-FD trên 938 tâm như trong Hình (c) và nghiệm của RBF-FD 17 trên 1153 tâm như trong Hình (d).



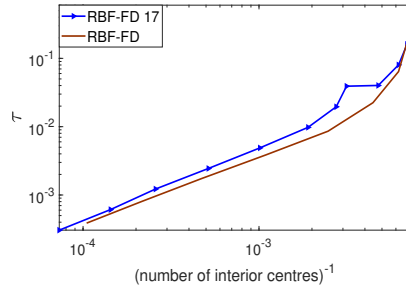
(a) Sai số trên tâm



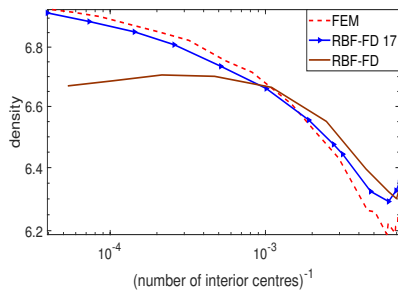
(b) Sai số trên lưới



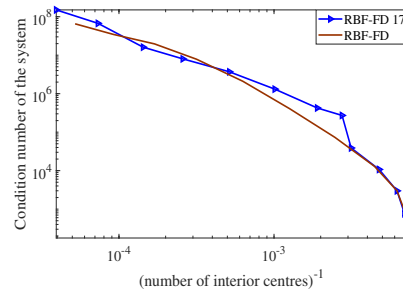
(c) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$



(d) Ngưỡng của độ lệch τ



(e) Mật độ ma trận hệ số



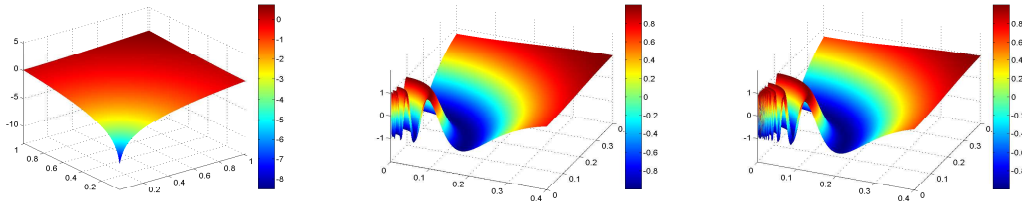
(f) Số điều kiện ma trận hệ số

Hình 3.11: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 4: (a) Các sai số E_{rc} và E_{mc} của nghiệm trên các tâm rời rạc thích nghi và lưới đều của các lần làm mịn liên tiếp. (b) Các sai số E_{rg} và E_{mg} của nghiệm nội suy trên lưới đều. (c) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$. (d) Ngưỡng của độ lệch τ . (e) Mật độ ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2). (f) Số điều kiện ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2).

Bài toán 5. [46, Section 2.8: Oscillatory] Xét bài toán Dirichlet với phương trình Helmholtz $-\Delta u - \frac{1}{(\alpha+r)^4}u = f$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, trên miền $\Omega = (0, 1)^2$, trong đó vế phải và điều kiện biên được chọn thỏa mãn nghiệm giải tích là $u = \sin(\frac{1}{\alpha+r})$ với các trường hợp

(a) $\alpha = \frac{1}{10\pi}$.

(b) $\alpha = \frac{1}{50\pi}$.

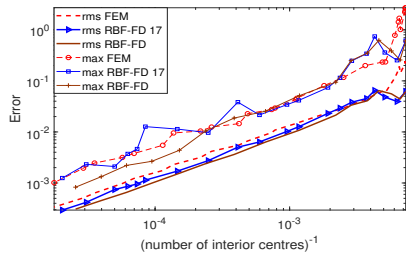


(a) Nghiệm chính xác của Bài toán 4

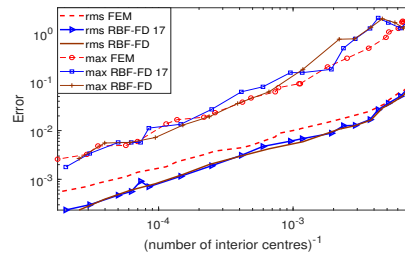
(b) $\alpha = \frac{1}{10\pi}$

(c) $\alpha = \frac{1}{50\pi}$

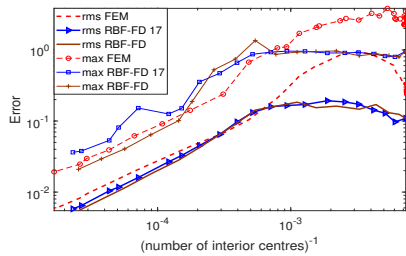
Hình 3.12: Nghiệm chính xác của Bài toán 4 (trái) và Bài toán 5 với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$ (giữa), với $\alpha = \frac{1}{50\pi}$ (phải).



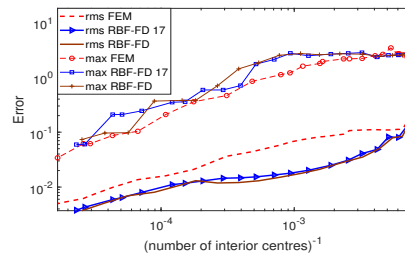
(a) Sai số trên tâm với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$



(b) Sai số trên lưới với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$

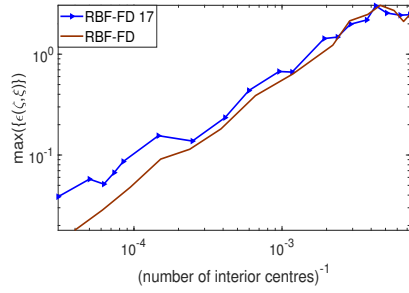


(c) Sai số trên tâm với $\alpha = \frac{1}{50\pi}$

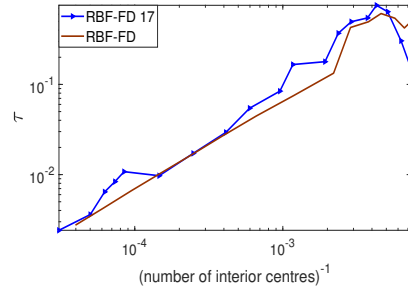


(d) Sai số trên lưới với $\alpha = \frac{1}{50\pi}$

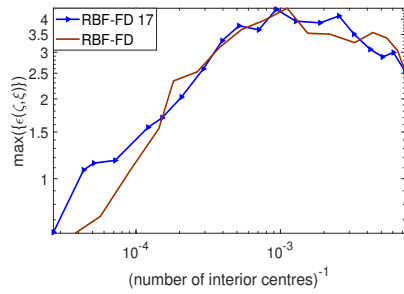
Hình 3.13: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 5: Các sai số với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$ (bên trên) và $\alpha = \frac{1}{50\pi}$ (bên dưới). Các sai số E_{rc} và E_{mc} của nghiệm trên các tâm rời rạc được tạo bởi các lần làm mịn liên tiếp (bên trái) và các sai số E_{rg} và E_{mg} của nghiệm nội suy trên lưới đều (bên phải).



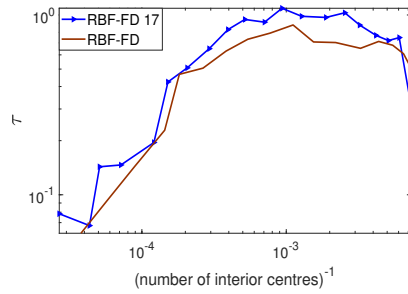
(a) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$ với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$



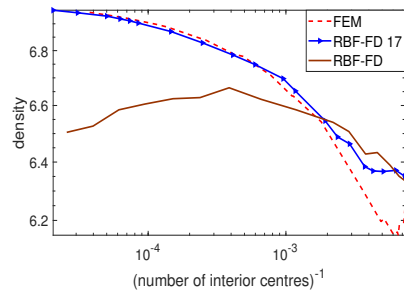
(b) Ngưỡng của độ lệch τ với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$



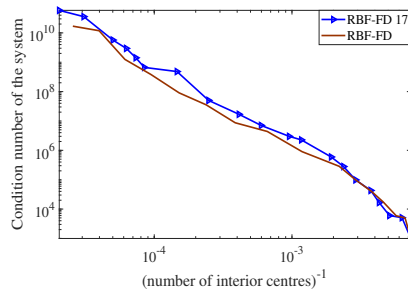
(c) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$ với $\alpha = \frac{1}{50\pi}$



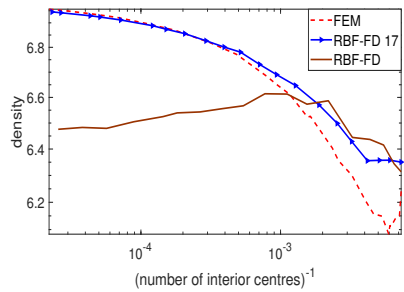
(d) Ngưỡng của độ lệch τ với $\alpha = \frac{1}{50\pi}$



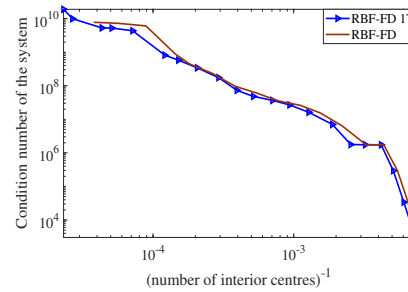
(e) Mật độ ma trận hệ số với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$



(f) Số điều kiện ma trận hệ số với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$

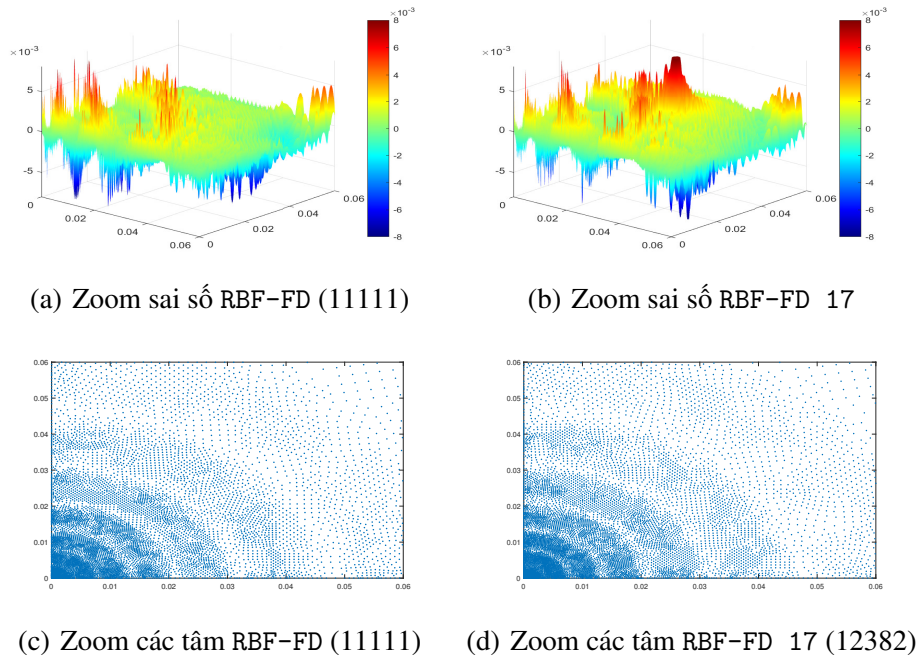


(g) Mật độ ma trận hệ số với $\alpha = \frac{1}{50\pi}$



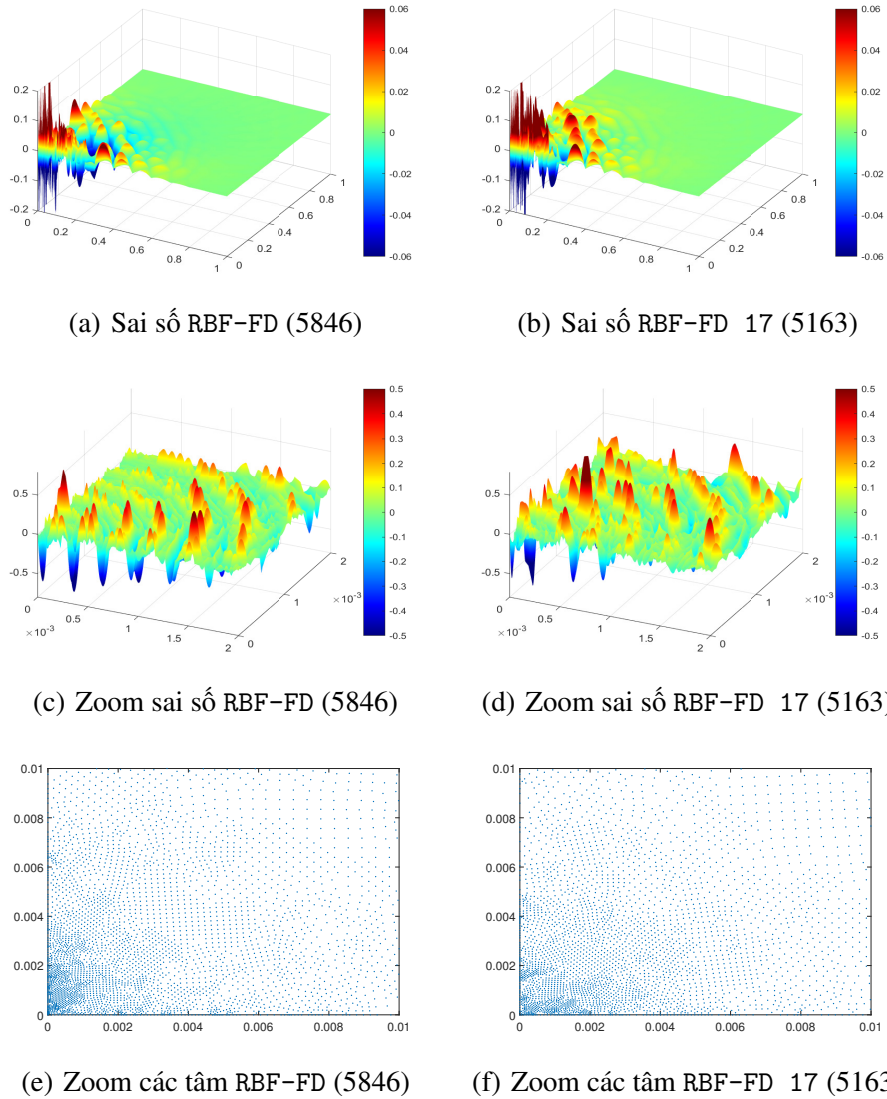
(h) Số điều kiện ma trận hệ số với $\alpha = \frac{1}{50\pi}$

Hình 3.14: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 5 với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$ và $\alpha = \frac{1}{50\pi}$: Độ lệch lớn nhất $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$, mật độ ma trận hệ số (bên trái) và ngưỡng của độ lệch τ , số điều kiện ma trận hệ số (bên phải) của phương pháp RBF-FD 17, RBF-FD.



Hình 3.15: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 5 với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$: (ab) Hàm sai số $u - \hat{u}$ ứng với nghiệm RBF-FD trên 11111 như trong Hình (c) và ứng với nghiệm RBF-FD 17 trên 12382 tâm như trong Hình (d).

Nghiệm chính xác của Bài toán 5 với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$ và $\alpha = \frac{1}{50\pi}$ được biểu diễn trong Hình 3.12(b, c), đều có độ dao động mạnh với tần số tăng dần đến gần gốc tọa độ. Kết quả thử nghiệm số được biểu diễn từ Hình 3.13 đến Hình 3.16 cho thấy, nghiệm xấp xỉ của RBF-FD có độ chính xác cao hơn nghiệm xấp xỉ của RBF-FD 17 và của FEM. Đặc biệt Hình 3.14(e, g) cho thấy, phương pháp RBF-FD sử dụng Thuật toán OT1 có mật độ ma trận hệ số của xấp xỉ 6.6, nhỏ hơn mật độ ma trận hệ số của RBF-FD 17 và của FEM, xấp xỉ 6.9, điều đó chứng tỏ Thuật toán OT1 chủ yếu dừng lại ở Pha 1. Hơn nữa so sánh Hình 3.15(c) với Hình 3.15(d) và Hình 3.16(e) với Hình 3.16(f) ta thấy, chiến lược xác định ngưỡng độ lệch τ 'hỗn hợp' và giảm các giá trị γ, μ của Thuật toán OT2, dẫn đến các tâm thích nghi của RBF-FD được sinh ra nhiều hơn ở các vùng có độ cong cao như đỉnh và đáy của sóng, bỏ qua vùng bằng phẳng giữa chúng, số tâm được sinh ra nhiều ở gần tâm của sóng với trường hợp sóng dao động rộng $\alpha = \frac{1}{10\pi}$, còn với $\alpha = \frac{1}{50\pi}$ cường độ sóng nhiều hơn và dao động nhỏ thì tâm thích nghi RBF-FD được sinh ra nhiều ở phần tần số sóng tăng dần đến tâm của sóng hơn của RBF-FD 17, điều đó làm cho kết quả sai số trong Hình 3.16(a, c) của RBF-FD ít bị lệch hơn của RBF-FD 17 trong Hình 3.16(b, d).

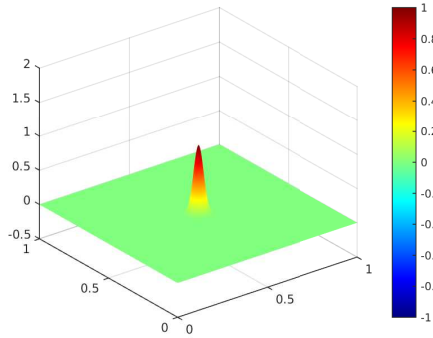


Hình 3.16: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 5 với $\alpha = \frac{1}{50\pi}$: (a, b, c, d) Hàm sai số $u - \hat{u}$ ứng với nghiệm RBF-FD trên 5846 như trong Hình (e) và ứng với nghiệm RBF-FD 17 trên 5163 tâm như trong Hình (f).

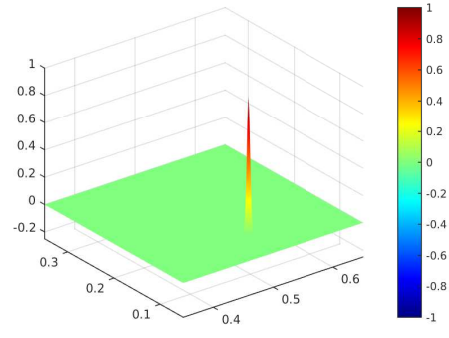
Bài toán 6. [46, Section 2.4: Peak] Xét bài toán Dirichlet với phương trình Poisson $\Delta u = f$ trong miền $\Omega = (0, 1)^2$, trong đó về phải f và điều kiện biên Dirichlet thỏa mãn nghiệm giải tích $u(x) = e^{-\alpha\|x-x_0\|^2}$. Các giá trị tham số α (độ dao động) và x_0 (vị trí) như sau

- (a) $\alpha = 1000, x_0 = (0.5, 0.5)$. (b) $\alpha = 100000, x_0 = (0.51, 0.117)$.

Nghiệm chính xác của Bài toán 6 được biểu diễn trong Hình 3.17. Khác với các bài toán trước, kết quả thử nghiệm số cho thấy sai số trên tâm và trên lưới đều của RBF-FD ổn định và nhỏ hơn sai số của RBF-FD 17 và của FEM khi số tâm trong miền

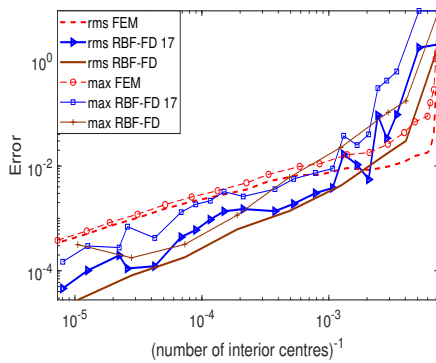


(a) $\alpha = 1000, x_0 = (0.5, 0.5)$

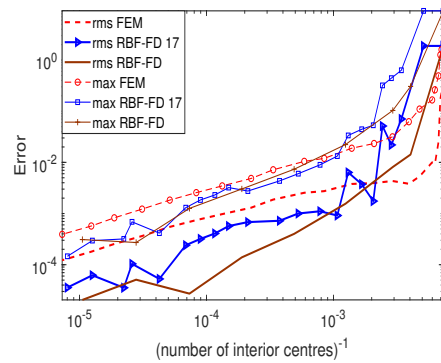


(b) $\alpha = 100000, x_0 = (0.51, 0.117)$

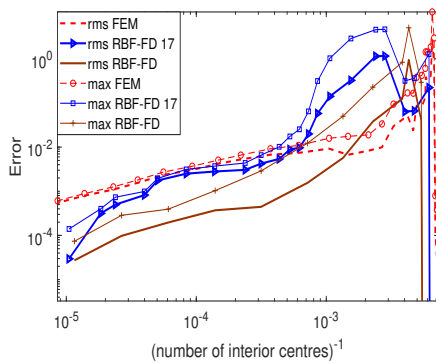
Hình 3.17: Nghiệm chính xác của Bài toán 6: (a) Với $\alpha = 1000, x_0 = (0.5, 0.5)$ (trái) và (b) Với $\alpha = 100000, x_0 = (0.51, 0.117)$ (phải).



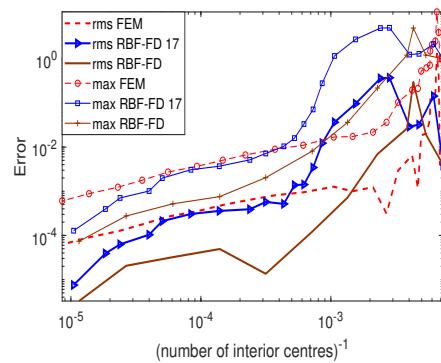
(a) Sai số trên tâm



(b) Sai số trên lưới

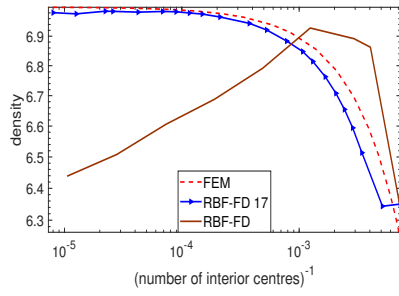


(c) Sai số trên tâm

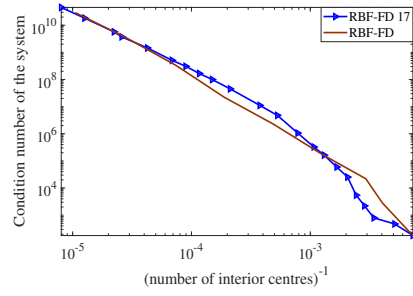


(d) Sai số trên lưới

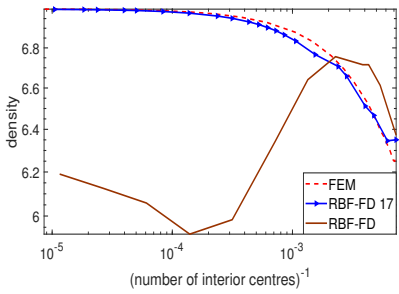
Hình 3.18: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 6: Sai số với $\alpha = 1000, x_0 = (0.5, 0.5)$ (bên trên) và $\alpha = 100000, x_0 = (0.51, 0.117)$ (bên dưới). Các sai số E_{rc} và E_{mc} của các nghiệm trên các tâm rời rạc được tạo bởi các lần làm mịn liên tiếp (bên trái). Các sai E_{rg} và E_{mg} của các nghiệm nội suy trên lưới đều (bên phải).



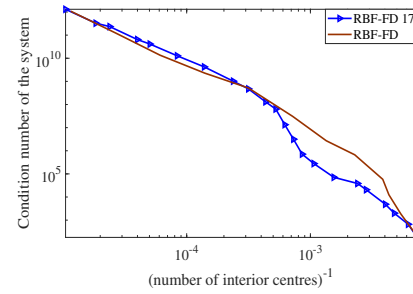
(a) Mật độ ma trận hệ số với $\alpha = 1000$, $x_0 = (0.5, 0.5)$



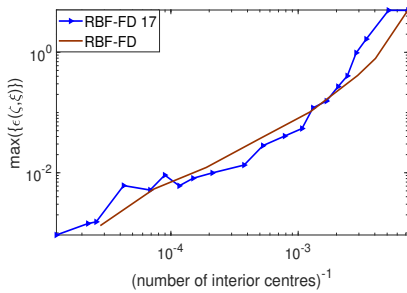
(b) Số điều kiện ma trận hệ số với $\alpha = 1000$, $x_0 = (0.5, 0.5)$



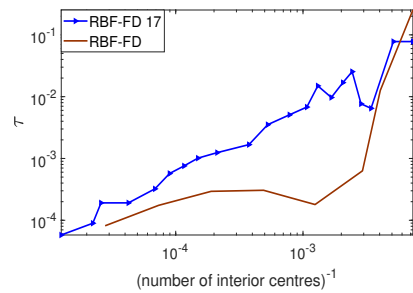
(c) Mật độ ma trận hệ số với $\alpha = 100000$, $x_0 = (0.51, 0.117)$



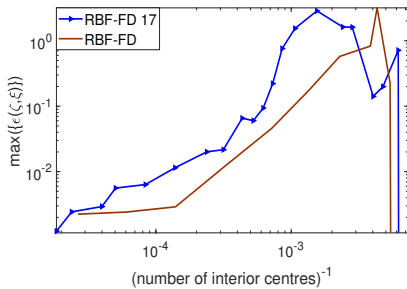
(d) Số điều kiện ma trận hệ số với $\alpha = 100000$, $x_0 = (0.51, 0.117)$



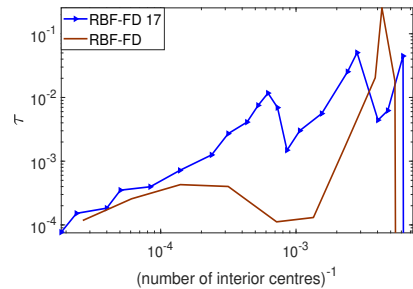
(e) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\epsilon(\zeta, \xi)\})$ với $\alpha = 1000$, $x_0 = (0.5, 0.5)$



(f) Ngưỡng của độ lệch τ với $\alpha = 1000$, $x_0 = (0.5, 0.5)$

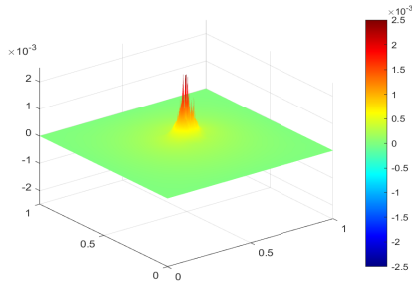


(g) Độ lệch lớn nhất $\max(\{\epsilon(\zeta, \xi)\})$ với $\alpha = 100000$, $x_0 = (0.51, 0.117)$

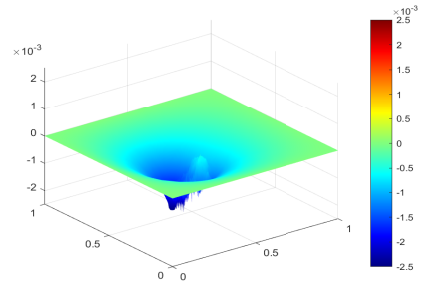


(h) Ngưỡng của độ lệch τ với $\alpha = 100000$, $x_0 = (0.51, 0.117)$

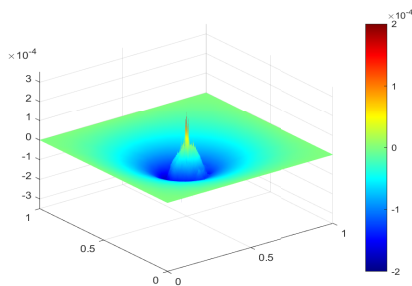
Hình 3.19: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 6: Mật độ, số điều kiện ma trận hệ số, độ lệch lớn nhất $\max(\{\epsilon(\zeta, \xi)\})$ và ngưỡng của độ lệch τ của Bài toán 6 ứng với các phương pháp FEM, RBF-FD 17, RBF-FD với $\alpha = 1000$, $x_0 = (0.5, 0.5)$ (bên trên) và $\alpha = 100000$, $x_0 = (0.51, 0.117)$ (bên dưới).



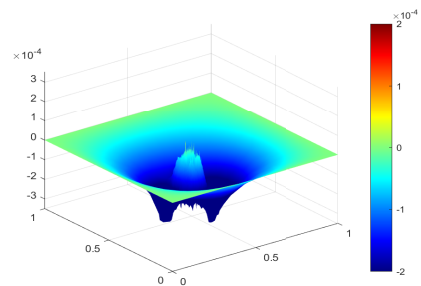
(a) Sai số RBF-FD (5309)



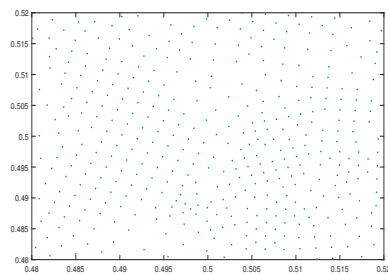
(b) Sai số RBF-FD 17 (6758)



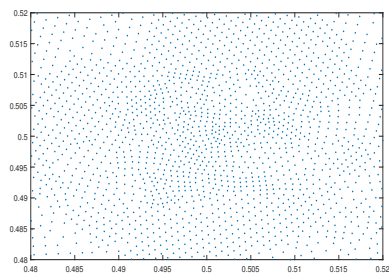
(c) Sai số RBF-FD (35880)



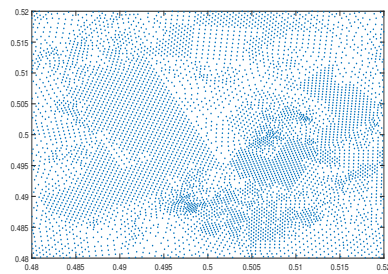
(d) Sai số RBF-FD 17 (38684)



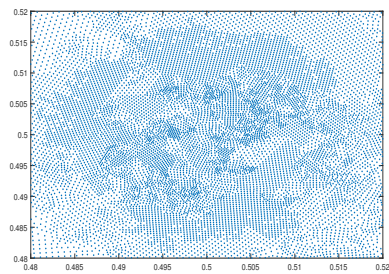
(e) Zoom các tâm RBF-FD (5309)



(f) Zoom các tâm RBF-FD 17 (6758)

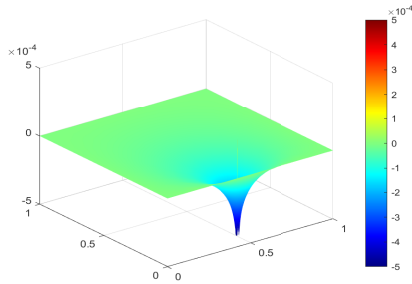


(g) Zoom các tâm RBF-FD (35880)

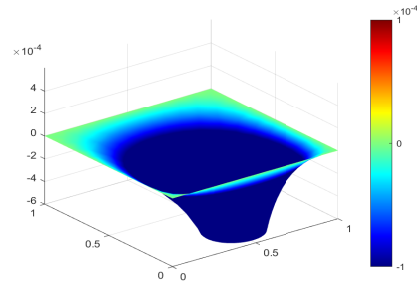


(h) Zoom các tâm RBF-FD 17 (38684)

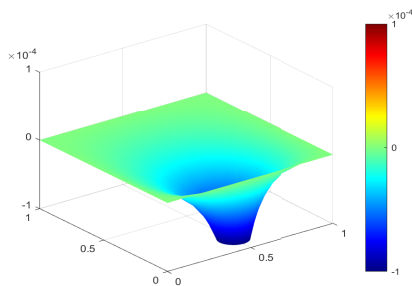
Hình 3.20: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 6 với $\alpha = 1000$, $x_0 = (0.5, 0.5)$: Hàm sai số $u - \hat{u}$ ứng với nghiệm của RBF-FD (bên trái) ứng với 5309 tâm trong Hình (e), 35880 tâm trong Hình (g) và nghiệm của RBF-FD 17 (bên phải) ứng với 6758 tâm trong Hình (f), 38684 tâm trong Hình (h).



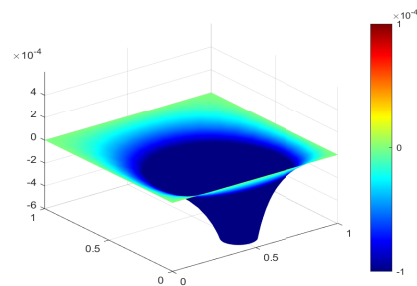
(a) Sai số RBF-FD (7212)



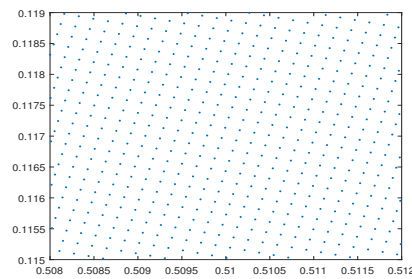
(b) Sai số RBF-FD 17 (7294)



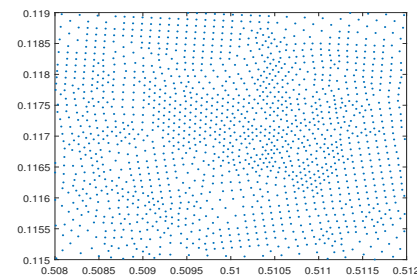
(c) Sai số RBF-FD (16467)



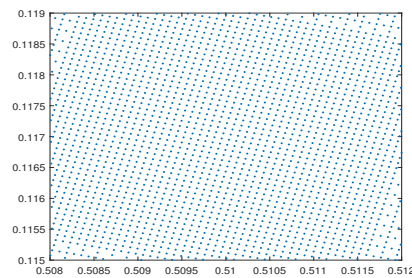
(d) Sai số RBF-FD 17 (19906)



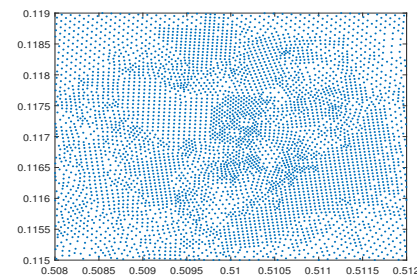
(e) Zoom các tâm RBF-FD (7212)



(f) Zoom các tâm RBF-FD 17 (7294)

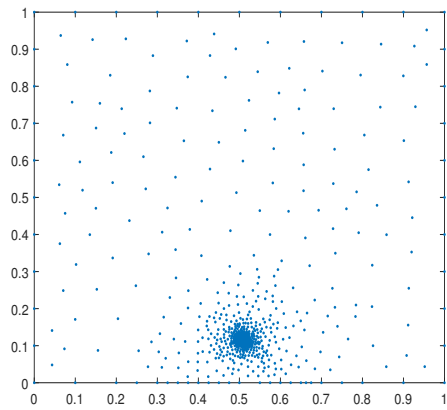


(g) Zoom các tâm RBF-FD (16467)

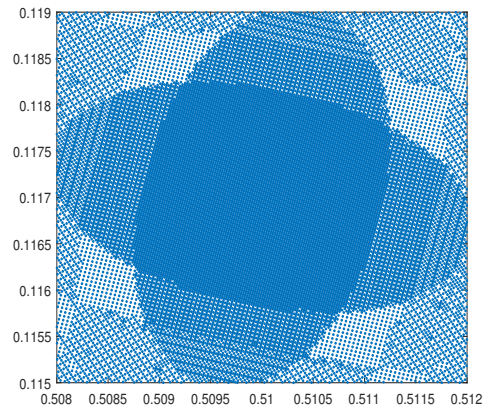


(h) Zoom các tâm RBF-FD 17 (19906)

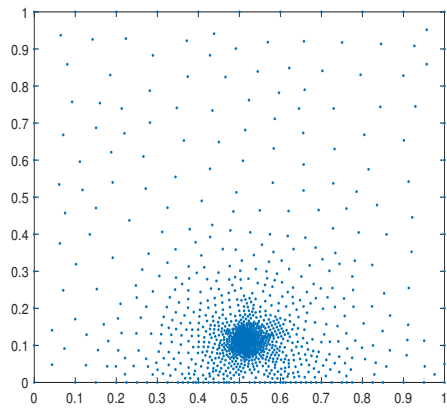
Hình 3.21: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 6 với $\alpha = 100000$, $x_0 = (0.51, 0.117)$: Hàm sai số $u - \hat{u}$ ứng với nghiệm của RBF-FD (bên trái) ứng với 7212 tâm trong Hình (e), 16467 tâm trong Hình (g) và nghiệm của RBF-FD 17 (bên phải) ứng với 7294 tâm trong Hình (f), 19906 tâm trong Hình (h).



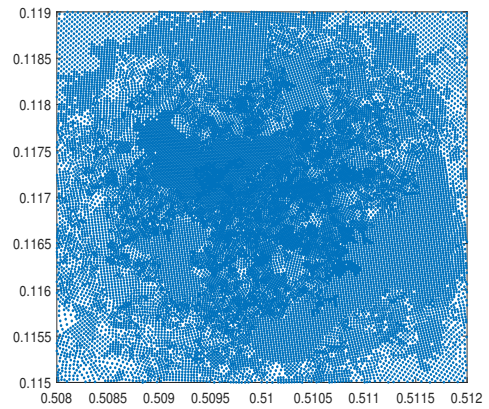
(a) Các tâm RBF-FD (86633)



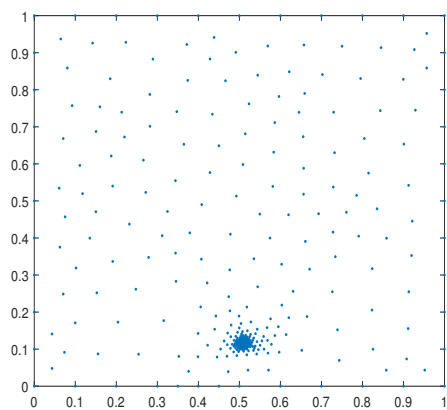
(b) Zoom các tâm RBF-FD (86633)



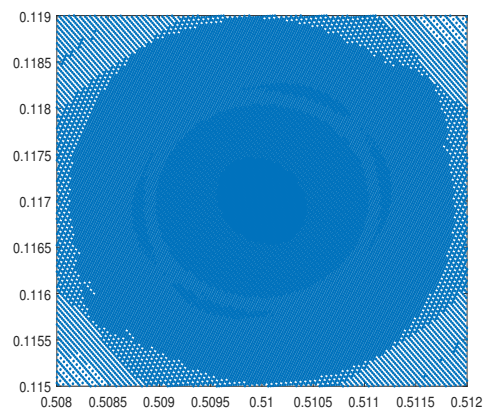
(c) Các tâm RBF-FD 17 (95367)



(d) [Zoom các tâm RBF-FD 17 (95367)



(e) Các tâm FEM (116783)



(f) Zoom các tâm FEM (116783)

Hình 3.22: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 6 với $\alpha = 100000$, $x_0 = (0.51, 0.117)$: (a,b) 86633 tâm thích nghi được tạo bởi phương pháp RBF-FD và zoom các tâm này; (c, d) 95367 tâm thích nghi được tạo bởi phương pháp RBF-FD 17 và zoom các tâm này; (e, f) 116783 tâm thích nghi được tạo bởi phương pháp FEM và zoom các tâm này.

lớn hơn 900, nhưng lại nhỏ hơn sai số của FEM khi số tâm trong miền nhỏ hơn 900. Đặc biệt Hình 3.19(a, c) cho thấy mật độ ma trận hệ số của RBF-FD cũng giảm nhanh và nhỏ hơn đáng kể mật độ ma trận hệ số của RBF-FD 17 và mật độ ma trận cứng của FEM khi số tâm trong miền lớn hơn 900. Sai số ứng với các tâm trong Hình 3.20 và Hình 3.21 cho thấy, sai số của RBF-FD ít bị lệch hơn sai số của RBF-FD 17 vì sự phân bố các tâm của thích nghi của RBF-FD đều hơn của RBF-FD 17.

Như vậy, các kết quả thử nghiệm số cho thấy:

- Đường cong sai số E_{rc} của rms RBF-FD, thường mịn, ổn định và nằm phía dưới các đường cong khác. Tương tự, đường cong sai số lớn nhất E_{mc} của max RBF-FD, cũng mịn, ổn định và nằm phía dưới các đường cong biểu diễn sai số lớn nhất của FEM và RBF-FD 17.
- Các đường cong biểu diễn sai số E_{rg} cho thấy, đường cong RBF-FD luôn bằng hoặc nằm dưới các đường cong của FEM và RBF-FD 17, đặc biệt với các bài toán có miền hình học phức tạp như Bài toán 2 với $\omega = 2\pi$, Bài toán 3, hoặc các bài toán có nghiệm là các hàm dao động mạnh như Bài toán 5 với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$ và Bài toán 6. Bên cạnh đó sai số lớn nhất tương ứng E_{mg} của max RBF-FD, cũng luôn bằng hoặc nằm dưới sai số lớn nhất của FEM và RBF-FD 17 là các đường cong max FEM và max RBF-FD 17 kể cả với các bài toán có miền hình học phức tạp như Bài toán 2 với $\omega = 2\pi$, Bài toán 3 và Bài toán 6.
- Từ các đồ thị của τ ta thấy đường cong RBF-FD ổn định và nằm phía dưới đường cong RBF-FD 17. Tuy nhiên, trong Hình 3.14(b, d) và Hình 3.19(h) biểu diễn các giá trị của τ ứng với Bài toán 5 và Bài toán 6(b) với $\alpha = 100000$, $x_0 = (0,51,0.117)$, cho thấy điểm cuối cùng bên phải của đường cong RBF-FD 17 thấp hơn nhiều so với điểm cuối của đường cong RBF-FD, mặc dù giá trị của γ đã được giảm đi để số tâm chèn vào nhiều hơn, cụ thể $\gamma = 0,2$ trong Bài toán 5 và $\gamma = 0,06$ trong Bài toán 6(b) cho đường cong RBF-FD, thay vì sử dụng $\gamma = 0,5$ như trong [48] cho đường cong RBF-FD 17 với tất cả các bài toán. Lý do sử dụng $\gamma = 0,5$ cho đường cong RBF-FD 17 là để số tâm mới được tạo ra lớn hơn hoặc bằng 15% tổng số tâm cũ trong miền, giảm ngưỡng τ để kiểm tra lại xem tất cả các cạnh $\zeta\xi$ có thỏa mãn $\varepsilon(\zeta, \xi) \geq \tau$ hay không trước khi chèn tâm ứng viên, điều này có nghĩa là mỗi bài toán có một giá trị thích hợp γ .

- Đồ thị của $\max(\{\varepsilon(\zeta, \xi)\})$ cũng cho thấy, đường cong RBF-FD ổn định hơn và nằm phía dưới đường cong RBF-FD 17, điều đó chứng tỏ sự hiệu quả của công đoạn chọn ngưỡng của độ lệch τ và thuật toán chọn tâm OT1.
- Đường cong biểu diễn mật độ ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2) của RBF-FD 17 xấp xỉ đường cong FEM, trong khi đường cong RBF-FD bắt đầu với điểm cuối bên phải cao hơn đáng kể so với các đường cong còn lại, nhưng hầu như lại nằm phía dưới với khoảng cách đáng kể, điều đó chứng tỏ Thuật toán OT1 và Thuật toán OT2 rất hiệu quả với bài toán có miền với phân bố tâm dày hoặc các bài toán có miền hình học phức tạp, hoặc nghiệm có độ dao động mạnh như các bài toán 4, 5 và 6, đó là 5 bài toán đầu tiên trong Bảng 3.3. Chúng có các giá trị δ_{aver} , i_{aver} và k_{aver} là nhỏ nhất, nhưng số lần Thuật toán OT1 dừng lại ở Bước I.b là lớn nhất, đặc biệt chúng cần γ nhỏ nhất.
- Số điều kiện của ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2), được tính bởi chuẩn 1. Các đường cong RBF-FD 17 và RBF-FD trong các hình nằm gần nhau. Tuy nhiên với các bài toán 3, 2(c) và 2(d) đường cong RBF-FD nằm phía dưới đường cong RBF-FD 17, các bài toán này có miền hình học phức tạp và giá trị δ_{aver} là lớn nhất. Do đó, số điều kiện ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2) của RBF-FD nhỏ hơn của RBF-FD 17.
- Hàm sai số $u - \hat{u}$ của nghiệm RBF-FD tốt hơn nghiệm RBF-FD 17 ứng với tập các tâm của các bài toán 1, 4, 2, 3, 5 với $\alpha = \frac{1}{10\pi}$, Bài toán 5 với $\alpha = \frac{1}{50\pi}$. Bên cạnh đó, các tâm trên miền được tạo bởi phương pháp sử dụng Thuật toán OT2 cũng đều hơn các tâm được tạo bởi Thuật toán ODP2 và Thuật toán D02. Đặc biệt với các bài toán khó, như Bài toán 6 và các hình 3.20 và 3.21, cho thấy sự vượt trội của RBF-FD so với RBF-FD 17. Hơn nữa, quan sát sự phân bố tâm trong Hình 3.20(e, f, g, h) cho thấy, mật độ tâm ở gần điểm kỳ dị $x_0 = (0, 5, 0, 5)$ của Bài toán 6(a) được tạo bởi phương pháp RBF-FD có phân bố tốt hơn so với RBF-FD 17. Kết quả hoàn toàn tương tự khi quan sát sự phân bố tâm trong Hình 3.21(e, f, g, h) của Bài toán 6(b). Do đó kết quả của phương pháp RBF-FD tốt hơn phương pháp RBF-FD 17 với số tâm nhỏ hơn 1000 (xem Hình 3.18).

Bảng 3.2: Kết quả thử nghiệm số của các bài toán: TP là cột tên các bài toán; Cột $\#\Xi_{\text{init}}$ là số tâm trong miền của FEM được tạo bởi PDE Toolbox trong MATLAB; $\#\text{Ref}_i$ là số lần làm mịn tương ứng của mỗi bài toán; Cột $\#\Xi_{\text{end}}$ là $\#\Xi_{\text{init}}$ của lần làm mịn cuối cùng; $\Sigma\#\Xi_{\text{init}}$ là tổng số tâm trong miền của số lần làm mịn tại cột $\#\text{Ref}_i$.

TP	$\#\Xi_{\text{init}}$	FEM		RBF-FD 17			RBF-FD		
		$\#\text{Ref}_i$	$\#\Xi_{\text{end}}$	$\#\text{Ref}_i$	$\#\Xi_{\text{end}}$	$\Sigma\#\Xi_{\text{init}}$	$\#\text{Ref}_i$	$\#\Xi_{\text{end}}$	$\Sigma\#\Xi_{\text{init}}$
1	82	28	19 394	14	21 929	45 125	14	15 384	37 154
2a	67	19	17 059	14	19 328	39 665	11	18 417	37 265
2b	83	24	26 721	12	25 825	52 394	12	26 511	57 835
2c	122	33	23 008	17	22 184	46 951	16	23 598	73 904
2d	142	36	20 430	21	21 016	98 208	15	25 138	76 868
3	133	39	36 938	26	39 176	187 189	18	40 676	117 473
4	137	19	24 153	13	26 442	54 666	11	20 107	42 577
5a	137	28	56 998	20	50 095	161 954	16	40 059	108 518
5b	137	32	60 531	21	44 258	170 073	18	40 355	119 533
6a	137	21	137 077	22	124 755	366 662	9	95 019	153 287
6b	137	28	116 783	22	95 367	274 260	12	86 633	154 307

Bảng 3.3: Các giá trị $\underline{\alpha}_{\text{Aver}}$, δ_{aver} , i_{aver} , c_{max} , c_{aver} , k_{aver} và p_1 xác định tại lần làm mịn cuối cùng của các phương pháp RBF-FD 17 và RBF-FD.

TP	RBF-FD 17					RBF-FD						
	δ_{aver}	$\underline{\alpha}_{\text{Aver}}$	i_{aver}	c_{max}	c_{aver}	δ_{aver}	$\underline{\alpha}_{\text{Aver}}$	i_{aver}	c_{max}	c_{aver}	k_{aver}	p_1
1	0.76	0.76	8.56	2.45	1.30	0.64	0.83	6.70	2.55	1.24	5.89	75
2a	0.76	0.76	8.44	2.38	1.29	0.63	0.84	6.81	2.39	1.23	5.91	78
2b	0.76	0.76	8.40	2.52	1.29	0.65	0.83	6.82	3.14	1.24	5.90	75
2c	0.76	0.76	8.89	2.39	1.30	0.65	0.82	6.63	2.47	1.24	5.90	77
2d	0.75	0.75	9.08	2.52	1.30	0.66	0.81	6.88	2.64	1.24	5.94	74
3	0.76	0.75	8.72	2.46	1.30	0.65	0.82	7.04	2.71	1.24	5.94	77
4	0.76	0.76	8.32	2.43	1.29	0.62	0.86	6.70	2.32	1.24	5.81	78
5a	0.77	0.76	8.34	2.69	1.28	0.57	0.93	6.44	2.41	1.24	5.64	81
5b	0.77	0.77	8.25	2.47	1.28	0.56	0.95	6.52	2.55	1.24	5.59	81
6a	0.76	0.77	8.81	2.50	1.26	0.51	1.00	6.34	2.61	1.23	5.49	78
6b	0.77	0.77	8.17	2.46	1.27	0.40	1.14	5.73	2.98	1.20	5.16	90

Các kết quả thử nghiệm số như: Số tâm trong miền của tập các tâm rời rạc khởi tạo $\#\mathcal{E}_{\text{init}}$, số lần làm mịn $\#\text{Ref } i$, số tâm trong miền của tập các tâm rời rạc cuối cùng $\#\mathcal{E}_{\text{end}}$ (hay $\#\mathcal{E}_{\text{int}}$ của lần làm mịn cuối cùng), tổng số tâm trong miền $\sum \#\mathcal{E}_{\text{int}}$ của các lần làm mịn, của FEM, RBF-FD17 và RBF-FD được biểu diễn trong Bảng 3.2. So sánh các giá trị trong Cột 8 với Cột 3 và Cột 5 ta thấy, phương pháp RBF-FD có số lần làm mịn nhỏ nhất, thậm chí với Bài toán 6(b) còn nhỏ hơn 50%, nhưng lại cho kết quả sai số và mật độ phân bố tâm tốt hơn (xem Hình 3.18 và 3.22).

Các giá trị α_{Aver} , δ_{aver} , i_{aver} , c_{max} , c_{aver} , k_{aver} , p_1 của RBF-FD 17 và RBF-FD được trình bày trong Bảng 3.3 cho thấy:

- Thứ tự các bài toán xếp theo giá trị δ_{aver} tăng dần của RBF-FD là 6b, 6a, 5b, 5a, 4, 2a, 1, 2b, 2c, 3, 2d. Các giá này nằm trong đoạn $[0.40, 0.66]$ với độ dao động lớn nhất là 0.26, nhỏ hơn so với giá trị δ_{aver} của RBF-FD 17, đó là các giá trị trong đoạn $[0.75, 0.77]$ với độ dao động là 0.02, điều này cũng chứng tỏ sự khác biệt giữa góc lớn nhất và góc nhỏ nhất của Thuật toán OT1 đối với từng loại bài toán. Hơn nữa giá trị $\alpha_{\text{Aver}} \in [0.75, 0.77]$ của RBF-FD 17 nhỏ hơn $\alpha_{\text{Aver}} \in [0.81, 1.14]$ của RBF-FD và sự dao động của nó cũng nhỏ hơn, điều đó chứng tỏ Thuật toán OT1 chọn được bộ tâm đều hơn so với bộ tâm chọn được bằng Thuật toán ODP1.
- Các giá trị trong Cột i_{aver} của RBF-FD nhận các giá trị trong $[5.73, 7.04]$, với khoảng cách lớn nhất là 1.31, nhỏ hơn nhiều so với i_{aver} của RBF-FD 17, là đoạn $[8.17, 9.08]$ với khoảng cách lớn nhất là 0.91. Điều này có nghĩa là Thuật toán OT1 không chọn các tâm xa, do đó kết thúc sớm và giảm chi phí tính toán.
- Cột 5 có giá trị trong $[2.38, 2.69]$ với khoảng cách lớn nhất 0.31 là các giá trị của c_{max} của RBF-FD 17 và Cột 10 nhận các giá trị trong $[2.32, 3.14]$ với phạm vi lớn hơn 0.82 là các giá trị của c_{max} của RBF-FD, các giá trị này luôn lớn hơn các giá trị trong Cột 5, vì Thuật toán OT1 cho phép chọn nhiều tâm hơn Thuật toán ODP1 trong [48]. Tuy nhiên c_{aver} của RBF-FD (Cột 11) luôn nhỏ hơn c_{aver} của RBF-FD 17 (Cột 6) cho mỗi bài toán. Điều này có nghĩa là tổng khoảng cách từ $\xi \in \mathcal{E}_{\zeta} \setminus \{\zeta\}$ đến ζ thu được khi sử dụng Thuật toán OT1 luôn nhỏ hơn khoảng cách khi sử dụng Thuật toán ODP1 trong [48].

- Giá trị k_{aver} của RBF-FD luôn nhỏ hơn 6, trong khi của RBF-FD 17 và trong [16] bằng 6. Do đó, kích thước của ma trận nội suy $[\Phi_{\Xi_\zeta}]^{-1}$ trong công thức (2.3) giảm đáng kể khi sử dụng Thuật toán OT1, nên ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2) thưa hơn, dẫn đến chi phí tính toán cũng giảm.
- Giá trị của p_1 là số % Thuật toán OT1 dừng lại ở Bước II, trong đó giá trị nhỏ nhất là 74% của Bài toán 2 (ý d), đặc biệt với Bài toán 6 (ý b) nó đạt tới 90%, điều này có nghĩa là thuật toán thường dừng lại ở Bước II và chọn tập các tâm ban đầu gần nhất có thể. Với các bài toán có miền hình học lồi, hoặc nghiệm có độ dao động mạnh, Thuật toán OT1 thường dừng khi chọn được bộ tâm ban đầu, khả năng nhận được 4 tâm phân phối như phương pháp sai phân hữu hạn rất cao, nó thể hiện bằng việc các giá trị của δ_{aver} , l_{aver} , k_{aver} nhỏ và giá trị của p_1 cao.

3.2 Thử nghiệm số trong không gian 3 chiều

Trong phần này, chúng tôi trình bày một số thử nghiệm số để so sánh hiệu quả của phương pháp RBF-FD khi sử dụng các thuật toán chọn tâm được đề xuất trong không gian 3 chiều, như Thuật toán 8-Octants, Thuật toán 16-Octants, (chúng tôi chỉ sử dụng Thuật toán 16-Octants và ký hiệu là oct, vì các thử nghiệm số trong [18] cho thấy, Thuật toán 16-Octants cho kết quả tốt và ổn định hơn), Thuật toán cải tiến oct-dist, cùng với Thuật toán k-near, Thuật toán tet, Thuật toán pQR với các phiên bản pQR4sel, pQR3, pQR4 và FEM với các phiên bản fem1 (phương pháp phân tử hữu hạn bậc nhất), fem2 (phương pháp phân tử hữu hạn bậc hai). Nghiệm của FEM được tìm bởi công cụ Toolbox Matlab PDE trong [50].

Trường hợp D là toán tử Laplace Δ , khi đó công thức (2.1) có dạng

$$\Delta u(\zeta) = \sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} u(\xi), \quad \zeta \in \Xi_{int}, \quad (3.4)$$

với véc tơ trọng số $w_{\zeta, \xi}$ được xác định bởi Bổ đề 2.2.3, tức là nghiệm của hệ phương trình (2.15), trong đó $w_{\zeta, \xi}$ thoả mãn phương trình thứ 2 của hệ là

$$\Delta p_i(\zeta) = \sum_{\xi \in \Xi_\zeta} w_{\zeta, \xi} p_i(\xi), \quad \zeta \in \Xi_{int}, \quad i = 1, \dots, k, \quad (3.5)$$

với $\{p_1, \dots, p_k\}$, $k = \binom{\ell+2}{3}$, là một cơ sở của không gian tuyến tính các đa thức nhiều biến có bậc nhỏ hơn hoặc bằng ℓ (tức là, tổng bậc của mỗi số hạng nhỏ hơn hoặc bằng $\ell - 1$). Thử nghiệm số trong [2] cho các kết quả tốt khi sử dụng nội suy RBF bởi hàm $\varphi(r) = r^\alpha$ với số hạng đa thức. Trong các thử nghiệm số, chúng tôi lựa chọn phương pháp có bậc hội tụ khoảng $\mathcal{O}(h^2)$, nên sử dụng hàm $\varphi(r) = r^5$ với số hạng đa thức bậc hai ($\ell = 3$) là phù hợp.

Để đánh giá hiệu quả các phương pháp RBF-FD, tập các tâm $\Xi \subset \bar{\Omega}$ của các bài toán được tạo bởi một số cách khác nhau, như đỉnh của các tứ diện hoặc dưới dạng lưới Descartes hoặc điểm Halton kết hợp với một số tùy chọn tạo điểm trên biên của miền rời rạc.

Đặc biệt, trong các thử nghiệm số, các tâm của tập Ξ là đỉnh của các tứ diện tạo bởi lệnh `createMesh` trong PDE Toolbox của MATLAB, được gọi là *các tứ diện tối ưu*, với kích thước cạnh tối đa là $H_{\max} = H_0 \times 2^{-i/3}$, $i = 0, 1, \dots$. Vì sự khác biệt về kích thước và độ phức tạp của các miền nên H_0 được chọn riêng cho từng bài toán. Hệ số $2^{-1/3}$ được chọn sao cho số tâm bên trong miền tăng gấp đôi ứng với giá trị tiếp theo của H_{\max} . Các tham số khác của `createMesh` được đặt là $H_{\min} = H_{\max}/3$ và $H_{\text{grad}} = 1.5$. Chọn `GeometricOrder` bằng 1 để tính nghiệm của tất cả các phiên bản của phương pháp RBF-FD và `fem1` dựa trên hàm tuyến tính bậc nhất, chọn bằng 2 khi sử dụng hàm dạng bậc hai để tìm nghiệm của `fem2`.

Ngoài ra, đối với mỗi bài toán, tập Ξ_{int} cũng được tạo dưới dạng *lưới đều* Descartes bên trong Ω với khoảng cách $h = 0.9 H_{\max}$ và khoảng cách đến biên tối thiểu là $0.25h$. Một tùy chọn khác, các điểm của Ξ_{int} có cùng khoảng cách trung bình h được tạo ra từ điểm *Halton* 3D bởi lệnh `grandstream` trong MATLAB, đầu tiên là tạo thành khối lập phương chứa Ω , sau đó xóa các điểm bên ngoài Ω và các điểm ở khoảng cách dưới $0.25h$ so với biên. Trong trường hợp này, các điểm biên được tạo bằng *phép chiếu vuông góc* lên biên các điểm trong miền có khoảng cách nhỏ hơn h , hoặc sử dụng điểm biên là các đỉnh trên biên của các tứ diện tối ưu như ở trên.

Khi Ω là miền lồi (như Bài toán 7), chúng tôi sử dụng phép chiếu trên biên và thử nghiệm `fem1` trên cùng một tập Ξ . Lưới của `fem1` là các tứ diện được tạo bởi các điểm thuộc Ξ bằng lệnh `delaunayTriangulation` trong MATLAB, được gọi là *các tứ diện không tối ưu*, điều này cho phép thử nghiệm để đánh giá hiệu quả của các phương pháp khác nhau trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu.

Đối với các miền không lồi, lệnh `delaunayTriangulation` không tạo ra được các tứ diện thuộc miền Ω . Để tạo ra các tứ diện không tối ưu cho các miền này (như các bài toán 8-10), chúng tôi sử dụng `Gmsh` [30] và tắt tính năng làm mịn và tối ưu lưới bằng cách đặt các tham số `-smooth` và `Mesh.Optimize` về 0. Tương tự như tạo lưới trong MATLAB, chọn tham số độ dài tối đa là $clmax = H_0 \times 2^{-i/3}$, $i = 0, 1, \dots$, với H_0 được chọn khác nhau cho mỗi bài toán.

Để đánh giá độ chính xác của nghiệm xấp xỉ $\hat{u} = [\hat{u}_\xi]_{\xi \in \Xi}$ của hệ (2.2) được tìm bởi phương pháp RBF-FD hoặc bằng FEM, chúng tôi sử dụng sai số trung bình bình phương tương đối (RRMS) trên các nút bên trong miền như sau

$$E_{\text{ref}} = \text{RRMS}(\hat{u}^{\text{ref}}, \hat{u}, \Xi_{\text{int}}) := \frac{\left(\sum_{\xi \in \Xi_{\text{int}}} (\hat{u}_\xi^{\text{ref}} - \hat{u}_\xi)^2 \right)^{1/2}}{\left(\sum_{\xi \in \Xi_{\text{int}}} (\hat{u}_\xi^{\text{ref}})^2 \right)^{1/2}}, \quad (3.6)$$

trong đó $\hat{u}^{\text{ref}} = [\hat{u}_\xi^{\text{ref}}]_{\xi \in \Xi}$ là nghiệm tham chiếu, hoặc là nghiệm chính xác u của bài toán (1) trên Ξ_{int} nếu u đã biết, tức là $\hat{u}_\xi^{\text{ref}} := u(\xi)$, $\xi \in \Xi$, hoặc là nghiệm nội suy của nghiệm số trên Ξ_{int} từ một số tâm rời rạc. Nghiệm nội suy được tìm bằng cách sử dụng phép nội suy dữ liệu phân tán trong MATLAB bởi lệnh `scatteredInterpolant` với các tham số ngầm định.

Giá trị $E_{\text{ref}} = \text{NaN}$ trong các bảng khi không tìm thấy trọng số trong Bổ đề 2.2.3 của một số $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, điều này chỉ xảy ra khi không có trọng số nào thỏa mãn điều kiện (3.5). Trong một số trường hợp $E_{\text{ref}} = \text{Inf}$, có nghĩa là ma trận của hệ phương trình (2.2) là suy biến.

3.2.1 Bài toán có miền hình học lồi

Bài toán 7. Xét phương trình Poisson $\Delta u = 3e^{x+y+z}$ với miền Ω là khối cầu $\Omega = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 + z^2 < 1\}$ với điều kiện biên Dirichlet được chọn thỏa mãn nghiệm chính xác $u(x, y, z) = e^{x+y+z}$.

Trong thử nghiệm đầu tiên, tập Ξ là đỉnh của tứ diện tối ưu và tạo bởi `generateMesh` với $H_0 = 0, 25$. Kết quả được trình bày trong Bảng 3.4. Cột `fem1` biểu diễn sai số E_{ref} của phương pháp phần tử hữu hạn bậc nhất, các cột khác là kết quả của phương pháp RBF-FD với các thuật toán chọn tâm khác nhau, như được mô tả trong Phần 2.4. Riêng hai cột `oct-dist13` và `oct-dist17` là kết quả của Thuật toán `oct-dist` ứng với

giá trị của tham số $k = 13$ và $k = 17$. Các tham số khác của Thuật toán `oct-dist` giống nhau trong cả hai trường hợp là $s = 1$, $n = 3$, $\delta = 0.9$. Hàng cuối cùng của bảng là mật độ của ma trận hệ số ở lần cuối. Ngoài ra, Bảng 3.5 biểu diễn các sai số và mật độ ma trận cứng của `fem2` trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 0,5$ và `GeometricOrder = 2`.

Bảng 3.4: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 7: Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 0.25$ và mật độ ma trận hệ số.

# Ξ_{int}	FEM	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số						pQR	
	fem1	tet	oct	oct-dist13	oct-dist17	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
245	5.4e-03	2.6e-03	2.9e-03	2.6e-03	2.7e-03	2.8e-03	3.1e-03	3.2e-03	2.9e-03
567	3.3e-03	NaN	2.1e-03	1.6e-03	1.8e-03	1.7e-03	1.3e-03	1.9e-03	1.7e-03
1142	1.8e-03	8.7e-04	5.8e-04	9.5e-04	8.0e-04	1.0e-03	6.3e-04	9.4e-04	1.0e-03
2523	1.0e-03	5.3e-04	4.2e-04	6.6e-04	5.5e-04	5.7e-04	3.5e-04	7.8e-04	5.9e-04
5207	5.9e-04	3.1e-04	2.6e-04	4.0e-04	2.9e-04	3.1e-04	2.1e-04	3.2e-04	3.5e-04
10780	3.8e-04	1.8e-04	1.5e-04	1.8e-04	9.7e-05	1.4e-04	1.0e-04	2.1e-04	2.2e-04
21730	2.3e-04	NaN	8.8e-05	1.2e-04	6.8e-05	9.0e-05	5.9e-05	1.1e-04	1.4e-04
43956	1.4e-04	NaN	4.5e-05	7.2e-05	3.6e-05	4.1e-05	2.7e-05	8.1e-05	8.5e-05
88936	8.9e-05	NaN	3.0e-05	4.4e-05	2.2e-05	2.7e-05	1.3e-05	5.4e-05	5.3e-05
density:	14.6	14.6	16.5	12.7	16.5	19.4	19.4	9.8	19.4

Bảng 3.5: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 7: Sai số E_{ref} của `fem2` trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 0.5$ và mật độ ma trận hệ số.

# Ξ_{int}	272	824	1113	2357	5127	10138	21821	44238	90396	density
fem2	9.4e-04	3.8e-04	2.8e-04	1.2e-04	6.1e-05	2.8e-05	1.3e-05	5.8e-06	3.0e-06	27.3

Sai số của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán chọn khác nhau, kể cả `tet`, nếu không bị lỗi đều nhỏ hơn (6 lần) so với sai số của `fem1` trên các tâm giống nhau. Sai số của `fem2` trong Bảng 3.5 trên tập Ξ_{int} có số tâm tương đương tốt hơn kết quả của tất cả các phương pháp trong Bảng 3.4. Điều này được giải thích thực tế là nếu nghiệm u của bài toán là hàm khả vi vô hạn, thì các phương pháp bậc cao hơn như `fem2` sẽ có lợi hơn. Tuy nhiên, mật độ ma trận cứng của `fem2` bằng 27.3 cao hơn rất nhiều mật độ ma trận hệ số của các phương pháp trong Bảng 3.4.

Bảng 3.4 cũng cho thấy các phương pháp có sai số nhỏ hơn đều có mật độ ma trận hệ số cao hơn. So sánh các phương pháp có cùng mật độ ma trận hệ số thì `oct-dist17` tốt hơn so với `oct` và `pQR4sel`, tốt hơn `20near` và `pQR4`. Hơn nữa Hình 3.23(a) biểu diễn đồ thị sai số của các phương pháp ứng với `nnz` của ma trận hệ số, được tính bằng $\#\Xi_{\text{int}}$ nhân với mật độ ma trận hệ số tương ứng của nó. Hình 3.23(a) không có kết quả

của tet vì nó bị lỗi trên một số bộ Ξ và với phương pháp oct-dist chỉ có kết quả sai số ứng với $k = 17$, vì kết quả này tốt hơn kết quả $k = 13$.

Với bộ tâm là đỉnh của các tứ diện tối ưu, nghiệm xấp xỉ của oct-dist với $k = 17$ và pQR4sel có độ chính xác tốt nhất và tốt hơn nghiệm của phương pháp fem1.

Trong thử nghiệm tiếp theo, tập Ξ được tạo là các nút lưới đều trong Ω , với các điểm biên được tạo ra bằng phép chiếu vuông góc như đã trình bày ở trên. Kết quả thử nghiệm số được biểu diễn trong Bảng 3.6 và Hình 3.23(b). Đối với phương pháp không lưới RBF-FD, chúng tôi dùng cấu trúc lưới của các nút và tính Laplace trong (2.1) với trọng số là 7- tâm cổ điển bởi công thức (3.7) bất cứ khi nào có thể.

$$\begin{aligned} \Xi_{\zeta}^{7\text{star}} &= \{\zeta, \zeta \pm (h, 0, 0), \zeta \pm (0, h, 0), \zeta \pm (0, 0, h)\}, \\ w_{\zeta, \zeta} &= -6h^{-2}, \quad w_{\zeta, \xi} = h^{-2}, \quad \xi \in \Xi_{\zeta} \setminus \{\zeta\}, \\ \Delta u(\zeta) &\approx \frac{1}{h^2} [u(\zeta + (h, 0, 0)) + u(\zeta - (h, 0, 0)) + u(\zeta + (0, h, 0)) + \\ &\quad + u(\zeta - (0, h, 0)) + u(\zeta + (0, 0, h)) + u(\zeta - (0, 0, h)) - 6u(\zeta)]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Các trọng số còn lại cũng có được bằng xấp xỉ hàm cơ sở bán kính bởi (3.4) trên bộ tâm $\Xi_{\zeta}^{7\text{star}}$. Do đó, các phương pháp chọn tâm và tính trọng số được mô tả trong Phần 2.4 và công thức (3.4) chỉ được áp dụng với $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$ ở gần biên thỏa mãn $\Xi_{\zeta}^{7\text{star}} \not\subset \Xi_{\text{int}}$, nên mật độ ma trận hệ số trên miền rời rạc chỉ lớn hơn 7 một chút.

Kết quả của fem1 đạt được trên các tứ diện của các nút trong Ξ bởi lệnh MATLAB delaunayTriangulation, nó tạo ra các tứ diện thuộc Ω từ miền lồi. Các tham số của phương pháp oct-dist là $k = 18$, còn các giá trị khác giống như ở trên.

Ngoại trừ phương pháp tet bị lỗi trên một số tập các tâm, sai số của các phương pháp không lưới còn lại xấp xỉ nhau và nhỏ hơn sai số của fem1, đặc biệt là mật độ ma trận hệ số của các phương pháp không lưới chỉ bằng một nửa mật độ ma trận cứng của fem1.

Trong Bảng 3.6, phương pháp chọn tập các tâm là 30 điểm gần nhất (30near) không làm tăng mật độ ma trận hệ số, tức là phương pháp này cũng chủ yếu sử dụng tập các tâm là cấu trúc lưới 7-điểm. Sai số của phương pháp 30near tốt hơn sai số của phương pháp 20near, do đó nên sử dụng tập có số tâm lớn hơn trong trường hợp này, điều này có thể là do u đủ mịn và nó không thể thực hiện với các bài toán có miền hình học phức tạp được giới thiệu ở phía sau, như Bài toán 8.

So sánh Hình 3.23(a) và Hình 3.23(b) cho thấy sai số ứng với nnz của các phương pháp RBF-FD trên các nút lưới trong miền tốt hơn sai số trên đỉnh các tứ diện tối ưu, nhưng sai số của fem1 lại ngược lại.

Bảng 3.6: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 7: Sai số E_{ref} trên lưới đều và các điểm biên được tạo bởi phép chiếu vuông góc. Sử dụng cấu trúc chọn tâm 7-điểm cho phương pháp RBF-FD bất cứ khi nào có thể.

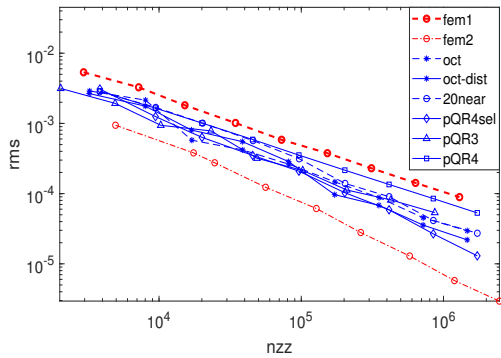
# Ξ_{int}	FEM	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số						pQR	
	fem1	tet	oct	oct-dist	20near	30near	pQR4sel	pQR3	pQR4
304	9.7e-03	9.9e-04	1.9e-03	2.9e-03	1.4e-03	6.6e-04	2.0e-03	1.1e-03	1.0e-03
624	6.7e-03	6.4e-04	9.3e-04	1.5e-03	8.0e-04	4.1e-04	1.2e-03	5.7e-04	5.9e-04
1308	4.0e-03	3.5e-04	3.4e-03	9.0e-04	6.2e-04	3.9e-04	7.2e-04	5.5e-04	4.8e-04
2822	2.0e-03	2.1e-04	2.5e-04	4.9e-04	3.1e-04	2.0e-04	3.7e-04	2.7e-04	2.2e-04
5196	1.5e-03	1.4e-04	2.3e-04	3.1e-04	2.0e-04	1.3e-04	2.4e-04	1.9e-04	1.5e-04
10935	8.8e-04	NaN	7.9e-05	1.7e-04	1.1e-04	8.3e-05	1.3e-04	9.9e-05	8.4e-05
23436	5.1e-04	4.9e-05	4.9e-05	9.2e-05	6.7e-05	5.0e-05	7.5e-05	6.1e-05	5.0e-05
46251	3.3e-04	NaN	2.7e-05	5.3e-05	4.1e-05	3.2e-05	4.5e-05	3.6e-05	3.1e-05
89372	2.1e-04	NaN	1.8e-05	3.2e-05	2.5e-05	2.0e-05	2.7e-05	2.3e-05	2.0e-05
density	14.7	7.4	7.4	7.7	7.6	8.3	7.8	7.0	7.8

Thử nghiệm cuối cùng đối với Bài toán 7 là sử dụng các nút trong Halton và các nút biên được tạo ra bằng phép chiếu vuông góc như Hình 3.23(d). Kết quả được biểu diễn trong Bảng 3.7 và Hình 3.23(c), trong đó phương pháp fem1 sử dụng các tứ diện thuộc Ξ được tạo bởi lệnh delaunayTriangulation trong MATLAB. Các tham số sử dụng cho phương pháp oct-dist là $\delta = 0.9$, $s = 1$, $n = 3$ và $k = 17$. Kết quả của các phương pháp tet và pQR3 bị lỗi tại một số tập Ξ , nên không được vẽ trong Hình 3.23(c). Sai số của pQR3 rất lớn trên hai tập Ξ cuối, điều đó cho thấy sự không ổn định của ma trận hệ số, điều này sẽ được phân tích chi tiết trong Bài toán 8. Phương pháp pQR4 có kết quả sai số cao hơn đáng kể so với các thuật toán lựa chọn tâm còn lại, kể cả phương pháp sử dụng thuật toán chọn tâm đơn giản là lựa chọn 20 điểm gần nhất 20near, nó là phương pháp tốt nhất trong trường hợp này. Các phương pháp RBF-FD cho kết quả sai số tốt trên các nút Halton và tốt hơn trên đỉnh của các tứ diện tối ưu, trong khi sai số của fem1 cao nhất khi Ξ là điểm Halton.

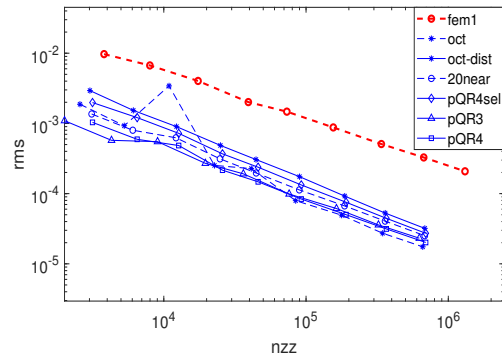
Hiệu quả của FEM phụ thuộc vào chất lượng lưới, đặc biệt là sự đều về hình dạng của các phần tử, như ví dụ trong [29]. Do đó, ngoài các kết quả như trên, Bảng 3.8 còn giới thiệu thông tin về sự phân bố hệ số tỷ lệ khung hình của tứ diện được tạo ra theo 3 cách trên. Hệ số *tỷ lệ khung hình* (nghịch đảo) của một tứ diện T có các đỉnh

Bảng 3.7: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 7: Sai số E_{ref} trên nút trong Halton và các điểm biên được tạo bởi phép chiếu vuông góc.

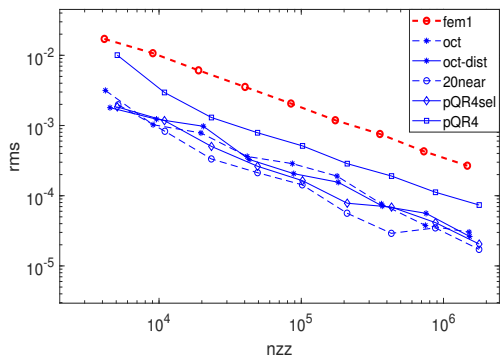
# Ξ_{int}	FEM	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số					pQR	
	fem1	tet	oct	oct-dist	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
303	1.7e-02	NaN	3.2e-03	1.8e-03	2.0e-03	1.8e-03	3.9e-03	1.0e-02
627	1.1e-02	NaN	1.0e-03	1.2e-03	8.3e-04	1.2e-03	1.6e-03	3.0e-03
1308	6.1e-03	NaN	7.8e-04	9.8e-04	3.3e-04	5.0e-04	9.4e-04	1.3e-03
2699	3.5e-03	NaN	3.6e-04	3.3e-04	2.1e-04	2.6e-04	3.8e-04	7.9e-04
5493	2.1e-03	NaN	2.9e-04	2.1e-04	1.4e-04	1.6e-04	2.1e-04	5.1e-04
11140	1.2e-03	NaN	1.9e-04	1.6e-04	5.6e-05	7.8e-05	1.5e-04	2.9e-04
22561	7.6e-04	NaN	7.6e-05	7.1e-05	2.9e-05	6.9e-05	1.2e-04	1.9e-04
45513	4.3e-04	NaN	3.8e-05	5.6e-05	3.5e-05	4.1e-05	3.0e+08	1.1e-04
91655	2.7e-04	NaN	3.0e-05	2.6e-05	1.7e-05	2.1e-05	2.1e+08	7.4e-05
density	16.0	16.0	16.5	16.7	19.4	19.4	9.8	19.4



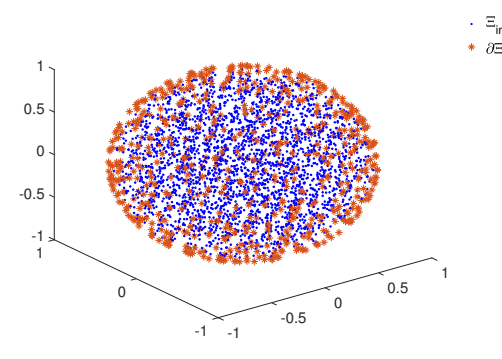
(a) Sai số trên đỉnh của các tứ diện tối ưu



(b) Sai số trên lưới đều và các điểm biên



(c) Sai số trên điểm Halton và các điểm biên



(d) Tâm rời rạc được tạo bởi điểm Halton

Hình 3.23: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 7: Các sai số E_{ref} ứng với kết quả trong các bảng: (a) Bảng 3.4 và Bảng 3.5, với oct-dist là oct-dist17, (b) Bảng 3.6, (c) Bảng 3.7 và (d) Tâm rời rạc của miền Ω được tạo bởi điểm Halton với 2699 tâm trong miền, 632 điểm biên.

A, B, C, D được tính bởi công thức

$$\gamma_T = 2\sqrt{6}\rho_T/h_T \quad (3.8)$$

trong đó h_T là độ dài lớn nhất của các cạnh của tứ diện T ,

$$h_T = \max(h_{AB}, h_{AC}, h_{AD}, h_{BC}, h_{BD}, h_{CD}),$$

và ρ_T là bán kính hình cầu nội tiếp tứ diện T [31, p. 1317]

$$\rho_T = \frac{|\alpha|}{\|N_{(ABC)}\| + \|N_{(ABD)}\| + \|N_{(ACD)}\| + \|N_{(BCD)}\|},$$

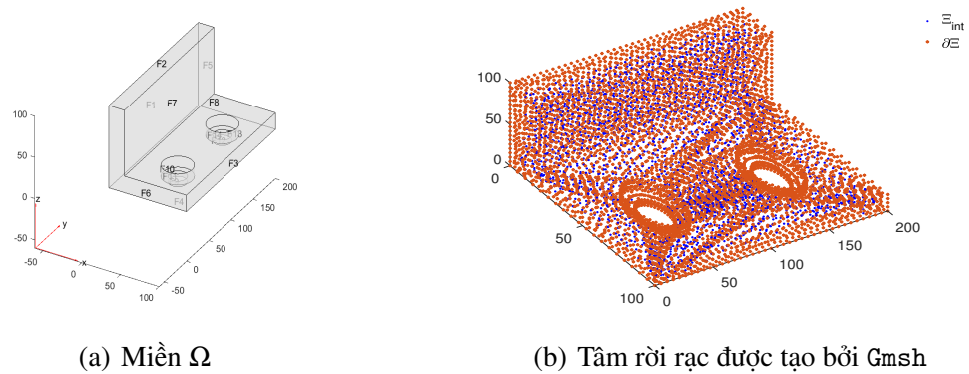
với $\alpha = \vec{AB} \cdot (\vec{AC} \times \vec{AD})$ và $N_{(ABC)} = \vec{AB} \times \vec{AC}$ là véc tơ pháp tuyến của mặt phẳng ABC . Hệ số $2\sqrt{6}$ được chọn sao cho $0 \leq \gamma_T \leq 1$, $\gamma_T = 0$ ứng với tứ diện suy biến và $\gamma_T = 1$ với tứ diện đều. Tứ diện T có chất lượng tốt khi giá trị tỷ lệ khung hình γ_T lớn. Bảng 3.8 là kết quả giá trị nhỏ nhất "min γ " và "avg γ " giá trị trung bình của γ_T trên tất cả các tứ diện ứng với bộ tâm Ξ cuối cùng trong mỗi Bảng 3.4, 3.6 và 3.7, đồng thời là số % của tứ diện có γ_T nhận giá trị trong các khoảng 0–0.25, 0.25–0.5, 0.5–0.75 và 0.75–1.0. Kết quả cho thấy chất lượng của tứ diện tối ưu sử dụng trong thử nghiệm đầu tiên cao hơn đáng kể so với hai loại tứ diện còn lại, điều này dẫn đến sai số của fem1 là nhỏ nhất trên đỉnh của các tứ diện tối ưu so với sai số của nó trên 2 loại tứ diện khác. Nhưng đối với các phiên bản của phương pháp RBF-FD thì tính đều cao hơn về hình dạng của tứ diện tối ưu không mang lại lợi thế.

Bảng 3.8: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 7: Thống kê hệ số tỷ lệ khung hình γ_T với 3 cách tạo lưới tứ diện sử dụng trong các thử nghiệm số của fem1, cụ thể là tứ diện tối ưu như trong Bảng 3.4, tứ diện tạo ra từ các nút lưới đều như trong Bảng 3.6 và tứ diện tạo ra từ các nút Halton như trong Bảng 3.7.

Loại tứ diện	min γ	avg γ	$0 < \gamma \leq 0.25$	$0.25 < \gamma \leq 0.5$	$0.5 < \gamma \leq 0.75$	$0.75 < \gamma \leq 1.0$
Tứ diện tối ưu	0.50	0.87	0.0%	0.0%	6.3%	93.7%
Tứ diện từ lưới đều	4.6e-02	0.68	0.1%	2.2%	96.5%	1.2%
Tứ diện từ điểm Halton	1.8e-03	0.63	4.8%	21.0%	45.8%	28.4%

3.2.2 Bài toán thực tế có miền hình học phức tạp

Bài toán 8 (BracketTwoHoles). Xét phương trình Poisson $\Delta u = -10$ với điều kiện biên Dirichlet $u|_{\partial\Omega} = 0$ trên miền Ω được xuất ra từ file STL 'BracketTwoHoles.stl' trong PDE Toolbox của MATLAB [50], như Hình 3.24(a).



Hình 3.24: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 8: (a) Miền BracketTwoHoles vẽ bởi lệnh `pdegplot` trong PDE Toolbox của MATLAB [50] và (b) Tâm rời rạc của miền Ω được tạo bởi Gmsh với 2529 tâm trong miền, 6303 tâm trên biên.

Vì chưa tìm được nghiệm chính xác của bài toán bằng phương pháp giải tích, nên chúng tôi tính nghiệm của `fem2` trên 1605099 điểm, bởi lệnh `createMesh`, với các tham số $H_{\max} = 1.7$, $H_{\min} = H_{\max}/3$, $H_{\text{grad}} = 1.5$ và $\text{GeometricOrder} = 2$ và sử dụng nó làm nghiệm tham chiếu.

Tương tự Bài toán 7, thử nghiệm đầu tiên với tập Ξ là đỉnh của các tứ diện tối ưu, được tạo bởi lệnh `generateMesh`, với $H_0 = 8.5$. Các giá trị tham số cho Thuật toán `oct-dist` là $\delta = 0.9$, $s = 1$, $n = 3$ và $k = 13$. Kết quả thử nghiệm số được trình bày trong Bảng 3.9. Sai số của `fem2` trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 17$ được biểu diễn trong Bảng 3.10. Hình 3.26(a) là các đường cong sai số ứng với `nnz`. Kết quả thử nghiệm số cho thấy nghiệm của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán `oct-dist`, `pQR3` và `pQR4` chính xác hơn nghiệm của `fem1` và xấp xỉ nghiệm của `fem2`.

Trong thử nghiệm tiếp theo, tập Ξ là đỉnh của các tứ diện không tối ưu trong miền Ω . Vì miền của bài toán không lồi, nên lệnh `delaunayTriangulation` không thể tạo ra các tứ diện nằm trong miền Ω , nên chúng tôi đã sử dụng Gmsh [30] và tắt tính năng làm mịn và tối ưu, như đã trình bày ở trên, với $H_0 = 8.5$ như Hình 3.24(b). Chất lượng của 2 loại tứ diện được so sánh trong Bảng 3.11. Các tham số sử dụng cho Thuật toán `oct-dist` là $\delta = 0.9$, $s = 3$, $n = 6$ và $k = 17$.

Kết quả thử nghiệm số được trình bày trong Bảng 3.12 và Hình 3.26(b). Do `tet`, `oct` và `20near` bị lỗi vì không chọn được tập các tâm tính trọng số thỏa mãn điều kiện (3.5), trong khi `pQR3` có sai số cao và thậm chí dẫn đến một ma trận hệ số (2.2) suy biến với tập Ξ cuối cùng, nên Hình 3.26(b) chỉ biểu diễn đồ thị sai số của phương

Bảng 3.9: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 8: Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 8.5$.

# Ξ_{int}	FEM	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số					pQR	
	fem1	tet	oct	oct-dist	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
871	5.5e-02	4.3e-02	6.1e-02	3.2e-02	7.6e-02	7.7e-02	3.8e-02	2.5e-02
2086	4.3e-02	NaN	5.6e-02	3.5e-02	6.3e-02	6.2e-02	3.2e-02	2.2e-02
4150	3.4e-02	2.9e-02	3.7e-02	2.4e-02	4.4e-02	4.5e-02	2.4e-02	1.6e-02
9628	1.9e-02	1.8e-02	2.4e-02	1.4e-02	3.3e-02	3.2e-02	1.2e-02	1.1e-02
19493	1.5e-02	1.3e-02	2.0e-02	1.2e-02	2.4e-02	2.2e-02	1.1e-02	9.5e-03
41215	8.6e-03	NaN	1.1e-02	6.2e-03	1.5e-02	1.5e-02	7.8e-03	5.2e-03
86699	6.8e-03	NaN	9.3e-03	6.0e-03	1.1e-02	1.1e-02	6.1e-03	4.4e-03
178432	4.5e-03	NaN	7.2e-03	4.7e-03	6.8e-03	7.5e-03	4.9e-03	3.1e-03
density	14.2	14.2	15.9	12.4	18.8	18.7	9.5	18.7

Bảng 3.10: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 8: Sai số E_{ref} của fem2 trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 17$.

# Ξ_{int}	1197	2647	4121	9507	21034	39659	87900	173262	density
fem2	4.0e-02	2.3e-02	1.6e-02	9.7e-03	6.6e-03	5.0e-03	3.1e-03	2.3e-03	25.9

Bảng 3.11: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 8: Thống kê hệ số tỷ lệ khung hình γ_T với 2 cách tạo lưới tứ diện sử dụng trong các thử nghiệm số của fem1, đó là tứ diện tối ưu như trong Bảng 3.9 và tứ diện không tối ưu như trong Bảng 3.12.

Loại tứ diện	min γ	avg γ	$0 < \gamma \leq 0.25$	$0.25 < \gamma \leq 0.5$	$0.5 < \gamma \leq 0.75$	$0.75 < \gamma \leq 1.0$
Tứ diện tối ưu	0.51	0.88	0.0%	0.0%	2.8%	97.2%
Tứ diện không tối ưu	3.1e-05	0.78	1.7%	5.8%	25.1%	67.4%

Bảng 3.12: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 8: Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu.

# Ξ_{int}	FEM	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số							pQR	
	fem1	tet	oct	oct-dist	20near	30near	40near	pQR4sel	pQR3	pQR4
726	1.3e-01	NaN	NaN	7.1e-02	NaN	NaN	NaN	1.1e-01	2.1e-01	1.1e-01
1491	1.1e-01	NaN	NaN	7.1e-02	NaN	NaN	1.2e-01	8.3e-02	1.8e+00	4.5e-02
2529	6.8e-02	NaN	NaN	4.9e-02	NaN	NaN	NaN	5.8e-02	1.2e-01	3.4e-02
4954	5.0e-02	NaN	NaN	3.6e-02	NaN	NaN	NaN	4.1e-02	3.6e-02	1.6e-01
9940	3.4e-02	NaN	NaN	2.6e-02	NaN	NaN	5.4e-02	3.2e-02	7.3e-02	1.5e-02
19834	2.4e-02	NaN	NaN	1.7e-02	NaN	NaN	NaN	2.2e-02	6.7e-02	1.3e-02
41941	1.6e-02	NaN	NaN	1.3e-02	NaN	NaN	3.0e-02	1.5e-02	9.9e-03	8.1e-03
86541	1.1e-02	NaN	1.0e-02	9.6e-03	NaN	NaN	2.1e-02	1.1e-02	6.7e-03	5.9e-03
178450	7.4e-03	NaN	NaN	6.7e-03	NaN	NaN	NaN	7.7e-03	Inf	3.9e-03
density	14.9	14.9	15.9	15.9	18.4	27.4	36.3	18.8	9.6	18.8

pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán oct-dist, pQR4sel và pQR4. Tuy nhiên, sai số của phương pháp pQR3 ứng với miền rời rạc khi $\#\Xi_{\text{int}} = 86541$ là một trong những sai số tốt nhất, với mật độ ma trận hệ số thấp hơn so với tất cả các phương pháp khác trong bảng và với tập Ξ của miền rời rạc khi $\#\Xi_{\text{int}} = 4954$, sai số của pQR3 còn tốt hơn sai số của pQR4. Trong Hình 3.26(b) cũng vẽ đồ thị sai số của pQR4 vì sai số của nó trên các tập Ξ là tốt nhất so với các phương pháp khác.

Bảng 3.13: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 8: Hệ số ổn định σ trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu.

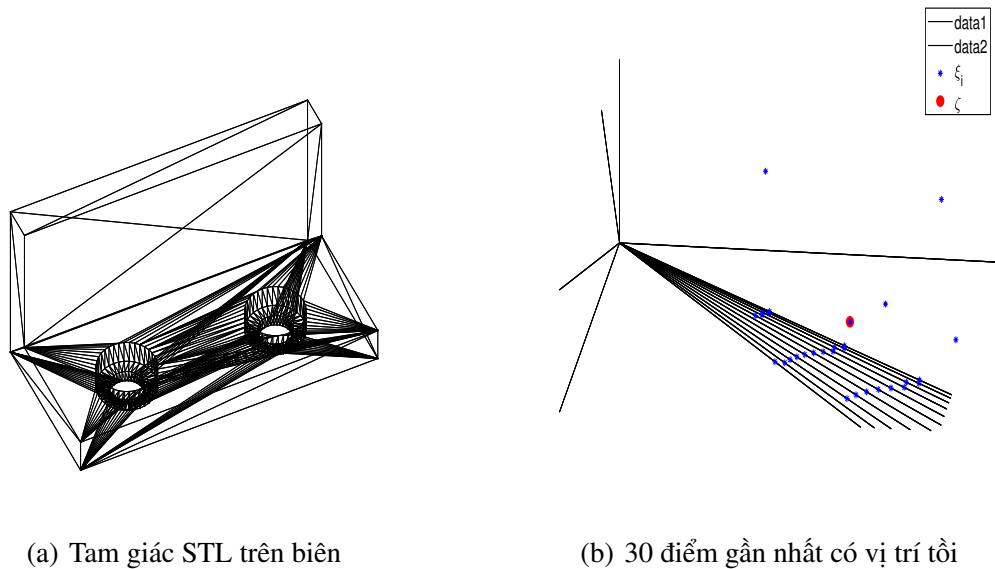
$\#\Xi_{\text{int}}$	oct-dist	pQR4sel	pQR3	pQR4
726	91.4	76.1	2.9e+16	1.6e+03
1491	58.6	82.9	1.6e+17	3.4e+03
2529	59.0	68.2	1.6e+17	5.9e+02
4954	58.7	64.9	2.1e+17	3.5e+03
9940	59.2	58.6	2.5e+16	7.0e+02
19834	59.8	59.6	6.6e+15	3.0e+02
41941	60.2	60.3	60.6	60.7
86541	60.6	60.5	60.8	60.7
178450	60.7	60.7	inf	61.1

Nguyên nhân làm cho các sai số của phương pháp pQR lớn trên một số tập các tâm có liên quan đến tính toàn cục của ma trận hệ số của hệ phương trình tuyến tính (2.2). Để đánh giá điều này, chúng tôi đã tính *hệ số ổn định* của ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2). Hệ số ổn định của ma trận A được tính bởi công thức

$$\sigma := \text{condest}(A^T) / \|A\|_{\infty}, \quad (3.9)$$

trong đó A là ma trận hệ số của hệ phương trình (2.2), xem Bảng 3.13. Công thức (3.9) được đề xuất trong [54], sử dụng hiệu quả khi tính số điều kiện của ma trận bằng chuẩn 1 bởi lệnh condest trong MATLAB, để đánh giá sự ổn định khi phân tích sai số của FEM giải phương trình elliptic. Thật không may, chưa có kết quả lý thuyết nào tính hệ số ổn định và phân tích sai số của các phương pháp không lưới [14]. Tuy nhiên, các giá trị trong Bảng 3.13 cho thấy, các sai số lớn luôn đi kèm với các giá trị cao của σ . Đối với hai phương pháp ổn định nhất là oct-dist và pQR4sel, có đồ thị trong Hình 3.26(b), thì $\sigma < 100$, trong khi pQR4 tạo ra các ma trận có $\sigma \geq 300$ khi $i \leq 5$ và $\sigma > 3000$ ứng với tập Ξ có sai số lớn nhất trong Hình 3.26(b) khi $i = 3$. pQR3 có sai

số lớn khi $i \leq 5$ và $i = 8$ tương ứng với σ rất lớn và kết quả tốt khi $i \in \{6, 7\}$ ứng với $\sigma \approx 61$, gần bằng mức tối thiểu $\sigma = 58.6$ trong Bảng 3.13. Các thử nghiệm số của phương pháp RBF-FD trên đỉnh của các tứ diện tối ưu được biểu diễn trong Bảng 3.9 có giá trị $56.3 \leq \sigma \leq 68.9$.



Hình 3.25: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 8: (a) Hình dạng tam giác STL trên biên và (b) 30 điểm ξ_i , $i = 1, 2, \dots, 30$, gần ζ nhất của các tứ diện không tối ưu. Các điểm này đều nằm trong mặt phẳng ngang trừ ζ và 4 điểm trên cùng.

Bảng 3.14: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 8: Sai số E_{ref} trên các điểm trong miền là lưới đều và điểm biên là phép chiếu vuông góc. Sử dụng tính trọng số với tập 7- điểm bất cứ khi nào có thể.

# Ξ_{int}	30near		pQR4sel		pQR3		pQR4	
	E_{ref}	σ	E_{ref}	σ	E_{ref}	σ	E_{ref}	σ
1004	1.3e-01	67.4	1.2e-01	617.9	1.2e-01	884.1	3.1e-01	2.1e+04
2572	1.1e-01	68.0	6.0e-02	63.5	4.7e-02	62.1	2.0e+00	1.5e+04
4344	2.0e-01	2.1e+03	4.4e-01	9.0e+03	2.0e-01	4.1e+03	7.4e+00	2.6e+06
8883	4.6e-01	5.9e+03	5.1e-01	1.2e+04	5.9e-01	5.4e+03	9.4e+00	4.7e+05
21228	2.8e-02	62.9	1.6e-02	61.8	1.5e-02	362.4	4.8e-02	1.2e+03
45808	3.6e-02	64.0	1.7e-02	62.2	1.1e-02	61.7	2.6e-01	3.6e+03
92528	2.0e-02	62.9	1.7e-02	62.8	6.7e-03	61.9	3.4e-02	299.0
176179	6.8e-01	7.8e+03	7.8e-01	3.5e+04	7.3e-01	1.5e+04	8.1e+00	6.5e+06
density	10.5		7.1		6.9		7.1	

Do 20_{near} bị lỗi tại tất cả các tập Ξ , nên chúng tôi đã tăng số điểm lân cận lên 30, 40 và đưa kết quả sai số tương ứng là 30_{near} , 40_{near} vào Bảng 3.12, hai phương pháp này có mật độ ma trận hệ số tăng cao, tuy nhiên kết quả sai số vẫn rất tồi kể cả của 40_{near} . Nguyên nhân là do liên quan đến các dạng của file STL, nó thường bao gồm nhiều tam giác mỏng và dài trên biên, các thuật toán tạo tứ diện đều bắt đầu bằng cách tạo các cạnh biên, sau đó là các tam giác biên, sau đó thêm các đỉnh vào bên trong miền. Do đó, các vùng lân cận của một số tâm bên trong bao gồm nhiều nút trên biên đồng phẳng, không thuận lợi cho công thức vi phân số, xem Hình 3.25. Do đó, sẽ là tốt khi thuật toán chọn tâm loại bỏ một số nút đồng phẳng này kể cả khi nó là lân cận gần nhất với ζ .

Trong thử nghiệm tiếp theo, tập Ξ_{int} được tạo ra là các nút lưới đều và $\partial\Xi$ là hình chiếu vuông góc trên biên, sử dụng tính trọng số bằng tập 7- điểm bất cứ khi nào có thể. Tuy nhiên, không có thuật toán chọn tâm nào cho kết quả tốt trong trường hợp này. Các thuật toán 20_{near} , oct và oct-dist không chọn được tập Ξ_{ζ} thoả mãn đa thức (3.5). Sai số của các phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán 30_{near} , pQR4sel , pQR3 và pQR4 được biểu diễn trong Bảng 3.14 rất tồi và không ổn định. Kết quả trong Bảng 3.14 cho thấy sai số của các phương pháp RBF-FD rất cao, ứng với hằng số ổn định lớn hơn giá trị “bình thường” là 60.

Bảng 3.15: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 8: Sai số E_{ref} trên các điểm trong miền là nút lưới đều và điểm biên là đỉnh của các tứ diện tối ưu. Sử dụng trọng số 7-điểm bất cứ khi nào có thể.

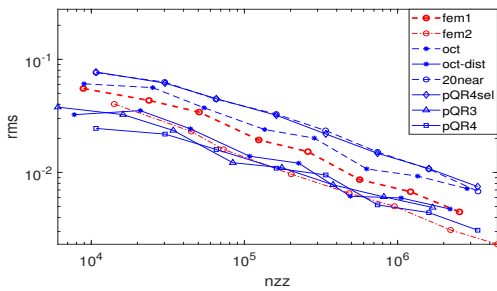
$\#\Xi_{\text{int}}$	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số						pQR	
	oct	oct-dist	20_{near}	30_{near}	40_{near}	pQR4sel	pQR3	pQR4
1004	7.0e-02	5.4e-02	4.9e-02	6.7e-02	6.4e-02	3.8e-02	2.3e-02	7.0e-02
2572	5.5e-02	4.4e-02	4.2e-02	5.5e-02	4.9e-02	5.3e-02	3.9e-02	2.7e-01
4344	4.2e-02	3.7e-02	2.9e-02	3.8e-02	3.7e-02	2.8e-02	3.1e-02	3.7e-02
8883	2.9e-02	2.4e-02	1.7e-02	2.5e-02	3.0e-02	1.7e-02	2.3e-02	2.7e-02
21228	1.2e-02	1.2e-02	9.5e-03	1.2e-02	1.3e-02	8.7e-03	6.1e-03	2.0e-02
45808	1.7e-02	1.1e-02	1.1e-02	1.4e-02	1.2e-02	1.5e-02	1.1e-02	7.7e-02
92528	5.5e-03	3.9e-03	3.8e-03	4.8e-03	4.8e-03	5.2e-03	4.6e-03	1.8e-02
176179	8.1e-03	3.7e-03	4.0e-03	3.8e-03	1.2e-02	2.9e-03	4.8e-03	1.1e-02
density	7.9	8.2	8.6	9.9	11.4	8.6	7.0	8.6

Bảng 3.16: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 8: Sai số E_{ref} trên điểm trong miền là điểm Halton và điểm biên là phép chiếu vuông góc.

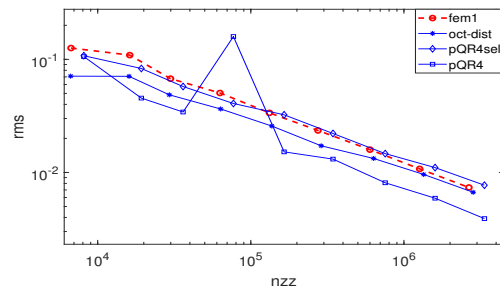
# Ξ_{int}	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số			pQR	
	oct-dist	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
1165	6.9e-02	9.2e-02	1.0e-01	9.2e-01	3.3e+00
2474	2.7e-01	7.7e-02	6.4e-02	8.0e-02	3.7e-01
5187	2.7e-02	8.3e-02	5.2e-02	2.9e+00	8.1e-01
10754	1.9e-02	5.3e-02	5.0e-02	2.3e-02	2.5e-01
22093	1.3e-02	1.5e-02	1.5e-02	3.3e-02	3.6e-01
45172	7.6e-03	1.8e-02	8.1e-03	2.0e-02	2.8e-01
91893	6.0e-03	2.8e-02	6.5e-03	1.6e-02	3.7e-02
186274	4.0e-03	9.0e-03	4.2e-03	5.1e-02	5.5e-02
density	16.3	18.8	18.9	9.6	18.9

Kết quả của các phương pháp RBF-FD sẽ tốt hơn nếu tập Ξ được tạo ra như trong trường hợp các nút lưới đều của Bài toán 7, nó là kết hợp các nút lưới đều bên trong miền với điểm biên được lấy là đỉnh của các tứ diện tối ưu như trong thử nghiệm đầu tiên của bài toán. Cụ thể, tham số được chọn $H_0 = 8.5$ và với mỗi $i = 0, \dots, 7$, các điểm trong miền là các nút lưới đều với khoảng cách $h = 0.9H_{\text{max}}$, với $H_{\text{max}} = H_0 2^{-i/3}$, còn các điểm biên được tạo bởi lệnh `generateMesh`, với H_{max} như trên và lấy đỉnh trên biên của tứ diện tối ưu làm điểm biên của Ξ . Kết quả thử nghiệm số được biểu diễn trong Bảng 3.15 và Hình 3.26(c). Các tham số của phương pháp RBF-FD sử dụng Thuật toán `oct-dist` là $\delta = 0.9$, $s = 1$, $n = 3$ và $k = 18$. Kết quả của phương pháp RBF-FD với tất cả các thuật toán chọn tâm đều hiệu quả, mặc dù đồ thị sai số trong Hình 3.26(c) không đơn điệu, đặc biệt với tập Ξ có 45808 điểm trong miền ($i = 5$) không thuận lợi cho tất cả các phương pháp. Tuy nhiên, quan sát đồ thị sai số của pQR3, ứng với $i = 4$ rất bất thường, trong thử nghiệm số thì sai số này là tốt nhất so với các kết quả khác với cùng số nút bên trong của miền rời rạc (khoảng 20000). Hệ số ổn định σ của tất cả các phương pháp trong Bảng 3.15 trừ pQR4, thỏa mãn $58.2 \leq \sigma \leq 67.4$. Với pQR4, hệ số ổn định $\sigma = 90.4$ khi $i = 2$, $\sigma = 413$ khi $i = 5$, còn lại $\sigma < 70$, do đó sai số khi $i = 2$ và $i = 5$ của pQR4 cao hơn đáng kể so với các kết quả khác. Ngoài 20near, trong Bảng 3.15 còn có sai số của các thuật toán 30near, 40near. Tuy nhiên, ngược với Bài toán 7, sai số của các thuật toán 30near, 40near không cải thiện so với sai số của Thuật toán 20near.

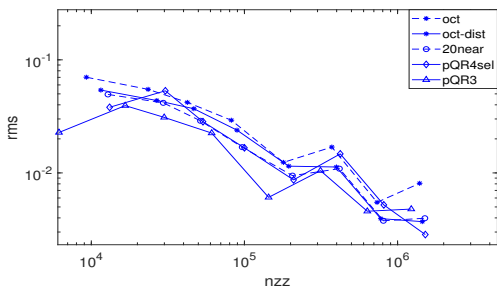
Thử nghiệm cuối cùng của bài toán sử dụng các điểm trong miền của tập Ξ là điểm Halton và các điểm biên là phép chiếu vuông góc. Kết quả tốt hơn so với trường hợp tập Ξ có các điểm trong miền là nút lưới đều kết hợp với các điểm biên là phép chiếu vuông góc. Sai số của các phương pháp được biểu diễn trong Bảng 3.16 và Hình 3.26(d). Các tham số của Thuật toán oct-dist giống như trong trường hợp của Bài toán 7 là $\delta = 0.9$, $s = 1$, $n = 3$ và $k = 17$. Sai số của phương pháp RBF-FD khi sử dụng các thuật toán oct-dist và pQR4sel là tốt hơn các kết quả khác và nhỏ hơn so với các sai số đạt được trên đỉnh của các tứ diện tối ưu. Các thuật toán chọn tâm tet và oct không chọn được tập các tâm thỏa mãn (3.5). Sai số của pQR3 và pQR4 rất cao, do đó nó không được vẽ trong Hình 3.26(d). Sự bất thường của các đường cong biểu diễn sai số trong Hình 3.26(d) tương ứng với giá trị của hệ số ổn định, cụ thể là: Kết quả ứng với Thuật toán oct-dist là $\sigma = 546.9$ khi $i = 1$ và $61 \leq \sigma \leq 80.1$ với các trường hợp còn lại. Với Thuật toán pQR4sel thì $\sigma = 138.5$ khi $i = 3$ và $60.8 \leq \sigma \leq 63$ cho các trường hợp khác, ngoại trừ nút thô nhất ($i = 0$) thì $\sigma = 582.7$ nhưng không dẫn đến sai số cao. Đối với Thuật toán 20near, σ giảm từ 1854,9 xuống 63,0 trong khoảng $i = 0$ đến $i = 4$, tăng lên 118,4 khi $i = 6$ và lại giảm xuống 62,9 khi $i = 7$.



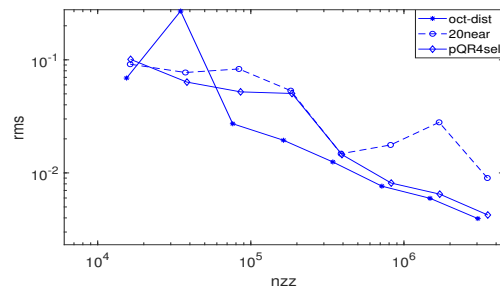
(a) Sai số trên đỉnh của các tứ diện tối ưu



(b) Sai số trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu



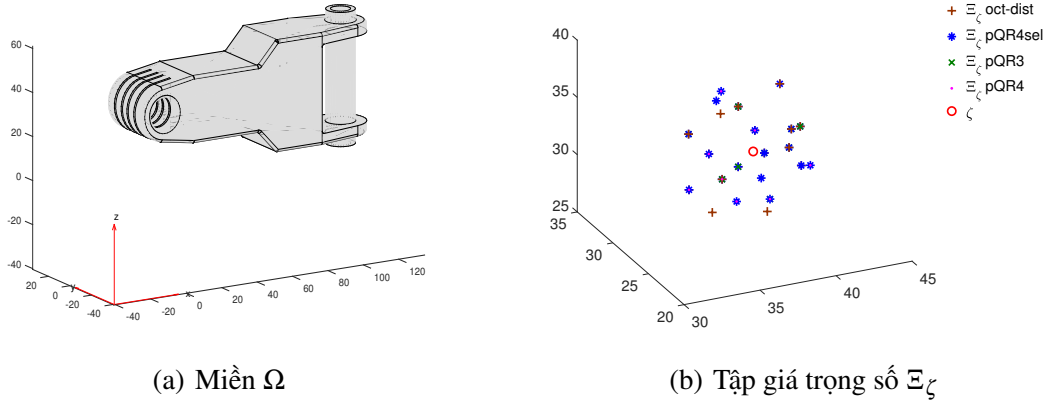
(c) Sai số trên lưới đều và các điểm biên của (a)



(d) Sai số trên điểm Halton và các điểm biên

Hình 3.26: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 8: Các sai số E_{ref} ứng với kết quả trong các bảng: (a) Các bảng 3.9 và 3.10, (b) Bảng 3.12, (c) Bảng 3.15, (d) Bảng 3.16.

Bài toán 9 ([50, Section 3], Forearm Link). Xét phương trình Poisson $\Delta u = -10$ với điều kiện biên Dirichlet đồng nhất $u|_{\partial\Omega} = 0$ trên miền Ω xác định bởi file STL 'ForearmLink.stl' trong PDE Toolbox của MATLAB [50] như Hình 3.27(a).



Hình 3.27: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 9: (a) Miền Ω xuất ra từ file 'Forearm-Link.stl' trong PDE Toolbox của MATLAB [50] và (b) Tập giá trọng số Ξ_{ζ} được chọn bởi các thuật toán trong trường hợp miền Ω được tạo bởi điểm Halton.

Tương tự Bài toán 8, vì chưa tìm được nghiệm chính xác của bài toán bằng phương pháp giải tích nên chúng tôi tìm và sử dụng nghiệm tham chiếu là nghiệm của fem2 trên 641825 điểm được xác định bởi lệnh createMesh với các tham số $H_{\max} = 6, 8/2^{7/3} \approx 1,35, H_{\min} = H_{\max}/3, H_{\text{grad}} = 1.5$ và GeometricOrder = 2 như trong [18].

Cũng như các bài toán thử nghiệm trước, tập các tâm rời rạc Ξ của miền Ω được tạo bởi các cách khác nhau như: đỉnh của các tứ diện tối ưu, đỉnh của các tứ diện không tối ưu, các điểm trong miền là các nút lưới đều kết hợp với các điểm biên là đỉnh của các tứ diện tối ưu và kết hợp các điểm trong miền là điểm Halton với điểm biên là phép chiếu vuông góc. Hình 3.27(b) là kết quả chọn giá véctơ trọng số Ξ_{ζ} của các thuật toán oct-dist, pQ4sel, pQR3, pQ4 trong trường hợp tập các tâm rời rạc Ξ của miền Ω được tạo bởi các điểm Halton với điểm biên là phép chiếu vuông góc.

Kết quả thử nghiệm số được trình bày trong các bảng 3.17 - 3.22 và Hình 3.28. Thuật toán oct-dist sử dụng $\delta = 0.7$, với các tham số s, n, k như trong chú thích của các bảng. Đồ thị sai số của pQR4sel trong Hình 3.28(b) đã bỏ qua sai số lớn khi $i = 4$ và Hình 3.28(c) cũng bỏ qua sai số bằng NaN của oct trong bảng tương ứng.

Bảng 3.17: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 9: Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 6.8$. Các tham số của oct-dist là $s = 1, n = 3, k = 13$.

# Ξ_{int}	FEM	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số					pQR	
	fem1	tet	oct	oct-dist	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
816	3.5e-02	NaN	3.4e-02	2.7e-02	8.8e-02	4.9e-02	2.1e-02	3.0e+00
1254	2.4e-02	NaN	2.8e-02	1.9e-02	7.6e-02	4.1e-02	1.7e-02	9.4e-02
2414	1.8e-02	NaN	2.0e-02	1.4e-02	3.6e-02	2.6e-02	1.2e-02	4.4e-02
4423	1.2e-02	NaN	1.5e-02	1.0e-02	2.5e-02	1.8e-02	9.4e-03	4.2e-02
8401	8.4e-03	NaN	1.0e-02	7.3e-03	1.8e-02	1.4e-02	6.8e-03	6.9e-03
16437	5.9e-03	NaN	7.8e-03	5.1e-03	1.2e-02	9.7e-03	4.5e-03	1.0e-02
33030	4.2e-03	NaN	6.0e-03	3.8e-03	9.6e-03	7.2e-03	3.3e-03	2.7e-03
65652	3.2e-03	NaN	4.4e-03	3.1e-03	6.3e-03	5.2e-03	2.6e-03	3.5e-03
133295	1.9e-03	NaN	2.8e-03	1.7e-03	4.6e-03	3.5e-03	1.6e-03	1.3e-03
density	14.2	14.2	16.0	12.4	18.8	18.8	9.5	18.8

Bảng 3.18: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 9: Sai số E_{ref} của fem2 trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 7.1$.

# Ξ_{int}	10268	14078	24426	40806	71249	132581	density
fem2	9.1e-03	6.5e-03	5.3e-03	3.3e-03	2.1e-03	1.3e-03	25.5

Bảng 3.19: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 9: Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu. Các tham số của oct-dist là $s = 3, n = 6$ và $k = 17$.

# Ξ_{int}	FEM	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số					pQR	
	fem1	tet	oct	oct-dist	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
553	7.9e-02	NaN	NaN	1.23e+00	NaN	1.23e-01	1.85e+00	3.04e+00
738	6.1e-02	NaN	NaN	6.95e-01	NaN	9.04e-02	2.22e-01	1.79e+00
1092	5.8e-02	NaN	NaN	5.31e-02	NaN	5.98e-02	1.30e-01	3.62e-01
1918	4.1e-02	NaN	NaN	6.30e-02	NaN	3.47e-02	1.14e-01	1.04e+01
3967	2.8e-02	NaN	NaN	1.92e-02	NaN	1.90e+05	1.06e+01	6.02e-01
7964	1.6e-02	NaN	NaN	1.37e-02	NaN	2.10e-02	1.20e-01	5.89e-02
16219	1.4e-02	NaN	NaN	7.68e-03	NaN	1.13e-02	Inf	8.26e-03
32460	6.6e-03	NaN	NaN	5.61e-03	NaN	7.74e-03	2.27e-01	1.00e-01
65240	5.7e-03	NaN	NaN	4.37e-03	NaN	5.85e-03	2.46e+06	2.25e-02
132782	5.1e-03	NaN	NaN	2.58e-03	NaN	3.82e-03	3.63e-03	1.76e-03
density	14.9	14.9	15.9	15.93	18.3	18.8	9.6	18.8

Bảng 3.20: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 9: Thống kê hệ số tỷ lệ khung hình γ_T với 2 cách tạo tứ diện sử dụng trong các thử nghiệm số của fem1, đó là tứ diện tối ưu như trong Bảng 3.17 và tứ diện không tối ưu như trong Bảng 3.19.

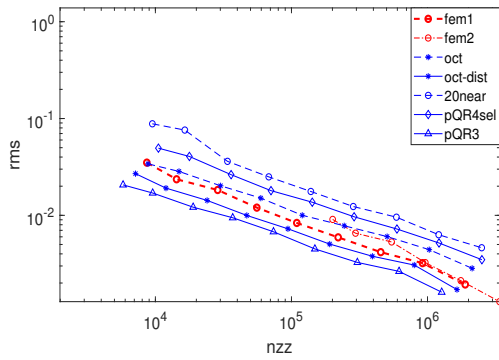
Loại tứ diện	$\min \gamma$	$\text{avg } \gamma$	$0 < \gamma \leq 0.25$	$0.25 < \gamma \leq 0.5$	$0.5 < \gamma \leq 0.75$	$0.75 < \gamma \leq 1.0$
Tứ diện tối ưu	0.09	0.88	0.0%	0.1%	4.6%	95.3%
Tứ diện không tối ưu	1.0e-13	0.72	7.7%	8.7%	24.6%	58.9%

Bảng 3.21: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 9: Sai số E_{ref} trên các điểm trong là nút lưới đều và điểm biên là đỉnh của các tứ diện tối ưu. Sử dụng trọng số 7-điểm bất cứ khi nào có thể. Các tham số của oct-dist là $s = 1$, $n = 3$ và $k = 18$.

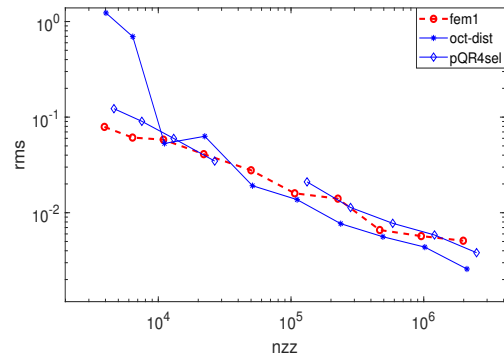
# \mathcal{E}_{int}	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số				pQR	
	oct	oct-dist	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
393	NaN	4.0e-02	1.4e-01	3.9e-02	2.7e-02	3.1e-01
805	3.7e-02	3.1e-02	1.1e-01	3.4e-01	1.5e-02	8.4e-02
1812	NaN	2.2e-02	1.2e-01	1.7e-02	1.1e-02	2.7e-02
3816	2.1e-02	1.1e-02	2.3e-02	1.1e-02	8.6e-03	6.7e-02
7507	8.8e-03	9.3e-03	2.4e-02	8.7e-03	5.5e-03	2.1e-02
16143	7.3e-03	5.5e-03	1.1e-02	5.6e-03	4.0e-03	1.8e-02
32862	5.0e-03	4.6e-03	6.6e-03	4.1e-03	2.5e-03	6.2e-03
66716	4.2e-03	2.7e-03	4.1e-03	2.7e-03	2.3e-03	9.1e-03
135410	NaN	2.7e-03	3.6e-03	1.9e-03	1.7e-03	7.7e+00
density	7.6	7.9	8.1	8.3	6.9	8.3

Bảng 3.22: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 9: Sai số E_{ref} trên điểm trong miền là điểm Halton và điểm biên là phép chiếu vuông góc. Các tham số của oct-dist là $s = 1$, $n = 3$ và $k = 17$.

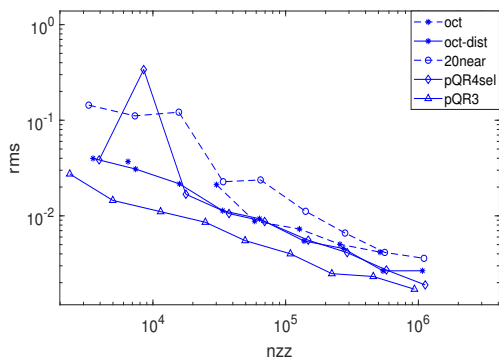
# \mathcal{E}_{int}	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số			pQR	
	oct-dist	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
392	2.6e-01	3.3e-01	1.3e+00	1.0e-01	3.3e-01
862	1.9e-01	2.8e-01	1.1e-01	5.3e-01	3.7e-01
1819	1.9e-02	5.4e-02	5.1e-02	2.0e-01	1.5e+00
3808	6.2e-02	6.1e-02	1.3e-01	6.2e-02	8.9e-01
7886	3.1e-02	2.4e-02	1.1e-02	2.6e-02	1.6e+00
16181	6.3e-03	7.9e-03	5.4e-03	2.2e-02	2.9e-01
33076	3.1e-03	4.1e-03	3.4e-03	3.9e-03	3.4e-02
67148	2.5e-03	7.9e-02	3.1e-03	3.7e-02	3.5e-01
135971	1.9e-02	3.3e-03	2.1e-03	2.1e+00	2.1e-02
density	16.4	18.9	19.0	9.6	19.0



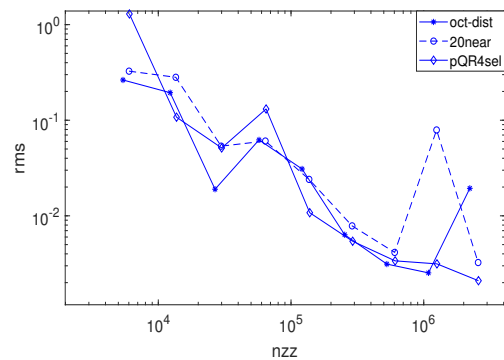
(a) Sai số trên đỉnh của các tứ diện tối ưu



(b) Sai số trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu



(c) Sai số trên lưới đều và các điểm biên của (a)



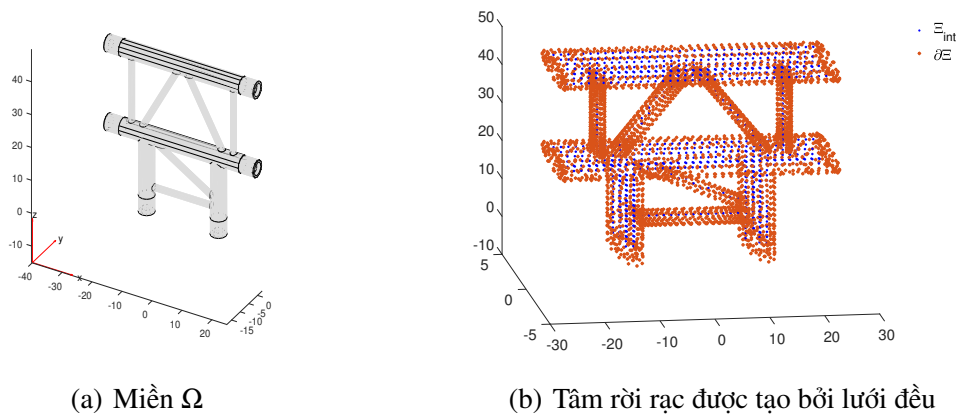
(d) Sai số trên điểm Halton và các điểm biên

Hình 3.28: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 9: Các sai số E_{ref} ứng với kết quả trong các bảng: (a) Các bảng 3.17 và 3.18, (b) Bảng 3.19, (c) Bảng 3.21, (d) Bảng 3.22.

Kết quả thử nghiệm số tương tự như kết quả của Bài toán 8: Thuật toán tet bị lỗi do không chọn được bộ tâm thỏa mãn (3.5). Thuật toán 20near cũng bị lỗi trên tập các tâm Ξ là đỉnh của các tứ diện không tối ưu. Tương tự Thuật toán oct cũng lỗi trên tập tâm này và tập tâm là kết hợp của các điểm trong miền là điểm Halton với điểm biên là phép chiếu vuông góc và cũng xảy ra lỗi tại $i = \{0, 2, 8\}$ của tập tâm Ξ với điểm trong miền là các nút lưới đều kết hợp với các điểm biên là đỉnh của các tứ diện tối ưu. Các đồ thị sai số trong Hình 3.28(b-d) không phải lúc nào cũng đơn điệu, điều đó cho thấy sự dao động về tính ổn định của ma trận hệ số. Kết quả của Thuật toán oct-dist là tốt nhất trong tất cả các trường hợp và Thuật toán pQR3 có sai số tốt với 2 trường hợp tập tâm Ξ là đỉnh của các tứ diện tối ưu và tập tâm Ξ với các điểm trong miền là các nút lưới đều kết hợp với các điểm biên là đỉnh của các tứ diện tối ưu. Ngược lại với Bài toán 8, Thuật toán pQR4 không cho kết quả tốt trên tập các tâm Ξ là đỉnh của các tứ diện không tối ưu.

Bài toán 10 (BeamTrussJunction). Xét phương trình Poisson $\Delta u = -10$ với điều kiện biên Dirichlet đồng nhất bằng không trên miền Ω như Hình 3.29, được xác định bởi mô hình trong file STL tại địa chỉ

<https://cults3d.com/en/3d-model/various/beam-truss-cross-and-t-junction-134>.



Hình 3.29: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 10: (a) Miền Ω xuất ra từ mô hình STL “Beam Truss Cross and T Junction 134” được vẽ bởi lệnh `pdegplot` trong PDE Toolbox của MATLAB và (b) Các tâm rời rạc được tạo bởi lưới đều với 815 điểm trong miền, 3550 điểm trên biên.

Nghiệm tham chiếu của Bài toán được tìm bằng `fem2` trên 1337199 điểm lưới được tạo bởi lệnh `createMesh` với các tham số $H_{\max} = 0.3$, $H_{\min} = H_{\max}/3$, $H_{\text{grad}} = 1.5$ và $\text{GeometricOrder} = 2$.

Bài toán được thử nghiệm tương tự như Bài toán 9. Kết quả thử nghiệm số được trình bày trong từ Bảng 3.23 đến Bảng 3.28 và Hình 3.30. Các tham số được sử dụng cho Thuật toán `oct-dist` là $\delta = 0.7$ và s, n, k được ghi trong phần ghi chú của các bảng tương ứng. Kết quả sai số của các phương pháp tương tự như Bài toán 8 và Bài toán 9, đặc biệt mặc dù mật độ ma trận hệ số của `fem2` cao nhưng sai số của nó cao hơn đáng kể so với sai số của `fem1` và của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán chọn tâm khác nhau. Chúng tôi đã hy vọng sai số của `fem2` tốt hơn trên tập các tâm có phân bố dày hơn, nhưng trong thử nghiệm số thì không có lợi.

Bảng 3.23: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 10: Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 3$. Các tham số của oct-dist là $s = 1, n = 3, k = 13$.

# Ξ_{int}	FEM	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số					pQR	
	fem1	tet	oct	oct-dist	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
538	6.8e-02	NaN	NaN	1.2e-01	1.5e-01	5.3e-02	5.3e-02	2.1e-01
664	6.7e-02	NaN	4.2e-02	4.2e-02	1.1e-01	4.9e-02	3.7e-02	9.7e-02
760	5.6e-02	NaN	3.8e-02	3.4e-02	1.1e-01	4.9e-02	3.2e-02	6.6e-02
1177	4.7e-02	2.9e-02	3.9e-02	3.0e-02	9.3e-02	4.4e-02	2.9e-02	4.0e-02
2122	3.2e-02	2.1e-02	3.6e-02	2.4e-02	7.9e-02	3.5e-02	2.5e-02	2.3e-02
3421	2.3e-02	1.7e-02	3.2e-02	1.7e-02	7.3e-02	2.9e-02	1.9e-02	1.5e-02
7101	1.7e-02	NaN	2.6e-02	1.4e-02	5.0e-02	2.5e-02	1.4e-02	1.2e-02
14798	1.2e-02	1.1e-02	1.7e-02	1.1e-02	3.6e-02	1.8e-02	1.1e-02	8.6e-03
32246	8.8e-03	NaN	1.5e-02	7.9e-03	2.5e-02	1.5e-02	8.2e-03	6.4e-03
67566	6.8e-03	NaN	1.1e-02	6.4e-03	1.9e-02	1.0e-02	6.7e-03	5.8e-03
138312	4.9e-03	NaN	8.2e-03	4.7e-03	1.1e-02	8.4e-03	4.7e-03	3.8e-03
density	13.9	13.9	15.6	12.2	18.4	18.4	9.3	18.4

Bảng 3.24: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 10: Sai số E_{ref} của fem2 trên đỉnh của các tứ diện tối ưu với $H_0 = 3$.

# Ξ_{int}	8809	10518	11200	15396	24735	35879	69018	135949	density
fem2	6.4e-02	4.7e-02	5.4e-02	3.8e-02	2.8e-02	2.4e-02	1.2e-02	7.2e-03	24.9

Bảng 3.25: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 10: Sai số E_{ref} trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu với $H_0 = 1.5/2^{1/3}$. Các tham số của oct-dist là $s = 3, n = 6$ và $k = 17$.

# Ξ_{int}	FEM	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số					pQR	
	fem1	tet	oct	oct-dist	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
876	5.0e-02	NaN	NaN	4.5e-02	1.0e+00	5.4e-02	1.5e-01	9.9e-02
1852	3.7e-02	NaN	NaN	4.4e-02	2.4e-01	5.2e-02	2.6e+01	2.6e-02
3483	3.1e-02	NaN	NaN	3.4e-02	2.6e-01	4.0e-02	4.4e-01	1.9e-02
7137	2.8e-02	NaN	3.3e-02	2.6e-02	9.8e-02	3.2e-02	3.5e-02	2.3e-02
15226	1.6e-02	NaN	2.3e-02	1.9e-02	6.7e-02	2.4e-02	1.5e-02	1.1e-02
31609	1.3e-02	2.9e-02	1.7e-02	1.5e-02	4.7e-02	1.9e-02	9.7e-03	9.5e-03
66627	1.0e-02	NaN	NaN	1.1e-02	3.1e-02	1.4e-02	7.4e-03	6.8e-03
137521	7.5e-03	NaN	9.2e-03	8.3e-03	2.1e-02	1.0e-02	6.0e-03	5.4e-03
density	14.6	14.6	15.5	15.5	17.7	18.3	9.4	18.3

Bảng 3.26: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 10: Thống kê hệ số tỷ lệ khung hình γ_T với 2 cách tạo tứ diện sử dụng trong các thử nghiệm số của fem1, đó là tứ diện tối ưu như trong Bảng 3.23 và tứ diện không tối ưu như trong Bảng 3.25.

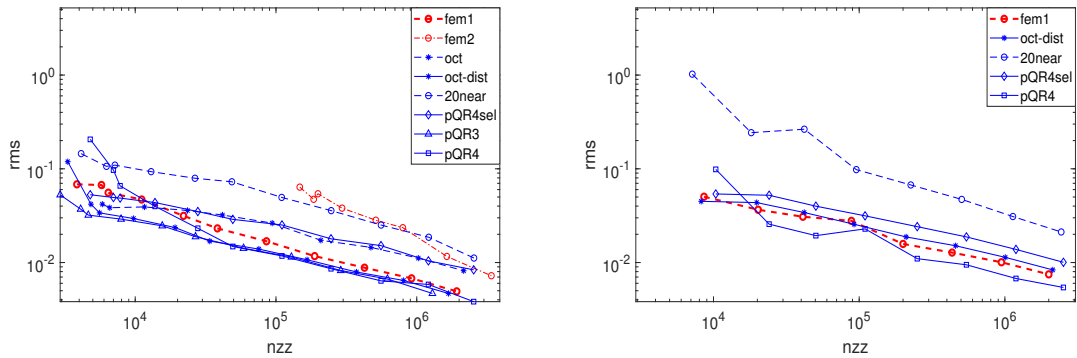
Loại tứ diện	$\min \gamma$	$\text{avg } \gamma$	$0 < \gamma \leq 0.25$	$0.25 < \gamma \leq 0.5$	$0.5 < \gamma \leq 0.75$	$0.75 < \gamma \leq 1.0$
Tứ diện tối ưu	0.43	0.88	0.0%	0.0%	6.0%	94.0%
Tứ diện không tối ưu	1.2e-05	0.75	3.6%	7.3%	28.1%	61.0%

Bảng 3.27: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 10: Sai số E_{ref} trên các điểm trong là nút lưới đều đỉnh và điểm biên là đỉnh của các tứ diện tối ưu. Sử dụng trọng số 7-điểm bất cứ khi nào có thể. Các tham số của oct-dist là $s = 1$, $n = 3$ và $k = 18$. Bắt đầu với $h = 0.9 \times H_{\text{max}}$, với $H_{\text{max}} = H_0/2$ (từ $i = 3$), vì h lớn hơn dẫn đến đặt Ξ có rất ít điểm.

# Ξ_{int}	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số				pQR	
	oct	oct-dist	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
815	5.6e-02	5.1e-02	1.9e-01	5.0e-02	4.6e-02	8.4e-01
1947	4.2e-02	4.0e-02	7.0e-02	3.3e-02	2.9e-02	3.2e-01
3858	2.6e-02	2.2e-02	5.0e-02	2.4e-02	1.8e-02	6.8e-02
8239	2.6e-02	1.7e-02	3.0e-02	1.8e-02	1.5e-02	2.0e-01
16386	1.9e-02	1.4e-02	2.1e-02	1.4e-02	1.1e-02	1.3e-01
35635	1.3e-02	1.0e-02	1.4e-02	9.4e-03	7.3e-03	4.1e-02
71294	9.2e-03	7.2e-03	9.9e-03	6.1e-03	6.0e-03	6.9e-01
147878	6.1e-03	5.1e-03	5.8e-03	5.2e-03	5.4e-03	2.3e-02
density	7.7	8.2	8.4	8.7	6.8	8.7

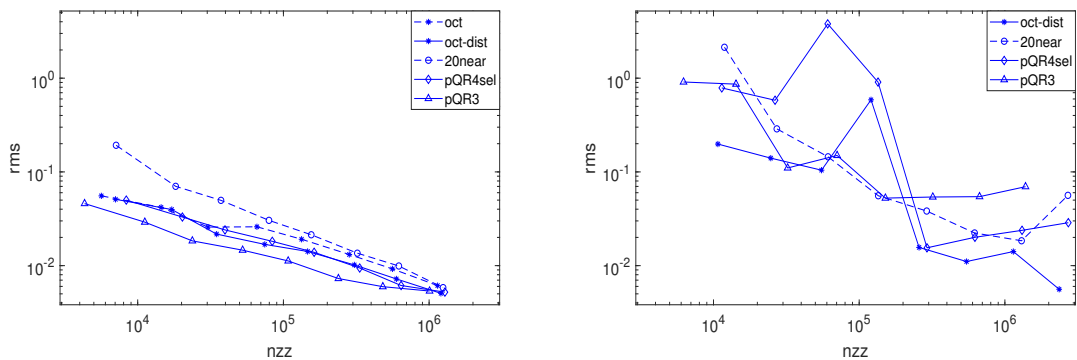
Bảng 3.28: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 10: Sai số E_{ref} trên điểm trong miền là điểm Halton và điểm biên là phép chiếu vuông góc. Các tham số của oct-dist là $s = 1$, $n = 3$ và $k = 17$. Bỏ qua các tập Ξ với $0 \leq i \leq 2$.

# Ξ_{int}	Sử dụng đa thức r^5 tính trọng số			pQR	
	oct-dist	20near	pQR4sel	pQR3	pQR4
850	2.0e-01	2.1e+00	7.9e-01	9.1e-01	5.3e+00
1828	1.4e-01	2.9e-01	5.8e-01	8.6e-01	3.5e+00
3926	1.0e-01	1.5e-01	3.8e+00	1.1e-01	4.4e-01
8238	5.9e-01	5.6e-02	9.1e-01	1.5e-01	2.2e+00
17053	1.6e-02	3.8e-02	1.6e-02	5.3e-02	2.8e-01
35193	1.1e-02	2.2e-02	2.0e-02	5.4e-02	2.0e-01
72136	1.4e-02	1.8e-02	2.4e-02	5.4e-02	1.0e-01
146898	5.6e-03	5.6e-02	2.9e-02	7.0e-02	5.0e-01
density	16.1	18.4	18.6	9.4	18.6



(a) Sai số trên đỉnh của các tứ diện tối ưu

(b) Sai số trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu



(c) Sai số trên lưới đều và các điểm biên của (a)

(d) Sai số trên điểm Halton và các điểm biên

Hình 3.30: Kết quả thử nghiệm số của Bài toán 10: Các sai số E_{ref} ứng với kết quả trong các bảng: (a) Các bảng 3.23 và 3.24, (b) Bảng 3.25, (c) Bảng 3.27, (d) Bảng 3.28.

Từ các kết quả thử nghiệm số trong không gian 3 chiều cho thấy:

- Phương pháp không lưới RBF-FD sử dụng các thuật toán chọn tâm khác nhau để tính trọng số có sai số tốt so với FEM trên các bài toán có miền hình học phức tạp.

- Cấu trúc tứ diện đều để tạo các điểm trong Ξ không quan trọng đối với các phương pháp RBF-FD, điều này đã được đưa ra trong thử nghiệm số của Bài toán 7. Trong các bài toán thử nghiệm khác, hiệu quả của phương pháp RBF-FD trên đỉnh của các tứ diện không tối ưu kém hơn đáng kể, nguyên nhân có thể do các yếu tố khác, như các thuật toán tạo tứ diện áp dụng cho các miền xuất từ file STL, (xem phần thử nghiệm của Bài toán 8). Việc rời rạc điểm biên trên các miền không lồi được xác định bởi các mô hình trong file STL là rất quan trọng để phương pháp RBF-FD đạt hiệu quả. Phương pháp tạo điểm biên tốt nhất trong các thử nghiệm là sử dụng điểm biên là đỉnh của các tứ diện tối ưu. Đối với các điểm bên trong miền, phương pháp rẻ nhưng cho hiệu quả tốt để tạo các điểm trong của miền rời rạc là tạo các nút lưới đều Descartes,

bộ tâm này cũng có lợi thế là làm cho mật độ ma trận hệ số rất thấp và cung cấp khả năng sử dụng tính trọng số 7- điểm như phương pháp sai phân hữu hạn, cho hầu hết các tâm bên trong miền. Tuy nhiên, với bất kỳ cách tạo điểm nào, nếu chọn được bộ tâm để tính trọng số tốt thì nghiệm của phương pháp RBF-FD sẽ tốt.

- Hệ số số ổn định σ được giới thiệu trong Bài toán 8 như một cách để đánh giá hiệu quả của phương pháp RBF-FD khi chọn được tập giá véctơ trọng số thỏa mãn (3.5). Trong một số trường hợp của tập Ξ , hệ số ổn định của 2 thuật toán hiệu quả nhất là Thuật toán oct-dist và Thuật toán pQR4sel cũng không tránh khỏi tăng đột biến và khó dự đoán, nhưng ít nhất chúng có thể được phát hiện nếu σ được tính.

- Thuật toán chọn tâm k-near không phải là một trong những thuật toán hiệu quả, như 20near có sai số cao nhất trên bộ tâm là đỉnh của các tứ diện tối ưu trong tất cả các bài toán có miền xuất ra từ file STL và thường bị lỗi trên các nút lưới đều. Việc tăng thêm số điểm gần nhất (tăng k) cũng không cải thiện được kết quả như trong Bài toán 8. Thuật toán oct-dist có kết quả tốt nhất trong số các phương pháp chọn tâm được xem xét. Một thuật toán cũng hoạt động ổn định trên tập Ξ được tạo bởi các cách khác nhau là Thuật toán pQR4sel, tuy nhiên sai số của nó thường cao hơn sai số của Thuật toán oct-dist.

3.3 Kết luận

Trong chương này chúng tôi đã giới thiệu các kết quả đạt được là:

- Trình bày chi tiết các thử nghiệm số trong không gian 2 chiều cho phương pháp RBF-FD, sử dụng kết hợp thuật toán chọn giá véctơ trọng số OT1 và thuật toán sinh tâm thích nghi OT2 mới được đề xuất trên các bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm có kỳ dị, hoặc nghiệm có độ dao động mạnh, đối sánh kết quả của phương pháp RBF-FD trên tâm thích nghi không lưới mới với kết quả của FEM trên lưới thích nghi và kết quả của phương pháp RBF-FD sử dụng kết hợp thuật toán chọn tâm ODP1 và thuật toán sinh tâm thích nghi ODP2 trên tâm thích nghi. Kết quả thử nghiệm số cho thấy nghiệm của phương pháp RBF-FD sử dụng kết hợp 2 thuật toán mới được đề xuất OT1 và OT2, ổn định và có độ chính xác cao hơn so với nghiệm của FEM và nghiệm của phương pháp RBF-FD sử dụng kết hợp 2 thuật toán ODP1 và ODP2, đồng thời chi phí tính toán của các thuật toán mới cũng giảm đáng kể.

- Giới thiệu tỉ mỉ các thử nghiệm số trong không gian 3 chiều cho phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán chọn tâm được đề xuất 8-Octants, 16-Octants, oct-dist, đồng thời áp dụng các thuật toán tet, k-near, pQR4sel, pQR3, pQR4 cho phương pháp RBF-FD trên các bài toán có miền hình lồi hoặc miền hình học phức tạp trong thực tế với các cách rời rạc miền khác nhau, đối sánh các kết quả của phương pháp RBF-FD với kết quả của FEM. Kết quả thử nghiệm số cho thấy, nghiệm của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán chọn tâm khác nhau có độ chính xác tốt và có thể so sánh với nghiệm của FEM.

KẾT LUẬN

Luận án nghiên cứu phương pháp không lưới RBF-FD giải phương trình đạo hàm riêng elliptic, các kết quả Luận án đạt được:

- Đề xuất thuật toán chọn tâm mới hỗ trợ tính véc tơ trọng số cho phương pháp RBF-FD giải phương trình đạo hàm riêng elliptic trong không gian 2 chiều.
- Đề xuất thuật toán sinh tâm thích nghi cho phương pháp RBF-FD giải phương trình đạo hàm riêng elliptic trong không gian 2 chiều trên các bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm có kỳ dị hoặc dao động lớn.
- Đề xuất 3 thuật toán chọn tâm mới cho phương pháp RBF-FD trong không gian 3 chiều trên các bài toán có miền lỗi hoặc miền hình học phức tạp.
- Nghiên cứu chi tiết các thử nghiệm số cho phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán được đề xuất giải phương trình đạo hàm riêng elliptic trong không gian 2 chiều trên các bài toán có miền hình học phức tạp, nghiệm có kỳ dị hoặc dao động lớn. Đồng thời xây dựng các thử nghiệm số cho phương pháp RBF-FD trong không gian 3 chiều trên các bài toán miền lỗi hoặc miền hình học phức tạp trong thực tế, với các cách tạo điểm của miền rời rạc khác nhau.

Các kết quả thử nghiệm số cho thấy, kết quả của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán mới được đề xuất có độ chính xác cao hơn kết quả của FEM và kết quả của phương pháp RBF-FD sử dụng các thuật toán đã được đề xuất, đồng thời chi phí tính toán của các thuật toán mới cũng giảm.

Luận án cũng mở ra một số hướng để có thể tiếp tục nghiên cứu:

- Nghiên cứu phương pháp RBF-FD giải phương trình đạo hàm riêng elliptic với điều kiện biên Neumann hoặc điều kiện biên hỗn hợp.
- Phát triển thuật toán sinh tâm cho phương pháp RBF-FD trong không gian 3 chiều.
- Vấn đề tăng tốc độ tính toán của phương pháp cũng cần được nghiên cứu.
- Nghiên cứu phương pháp RBF-FD giải các bài toán có chứa tham số bé.
- Chứng minh tính xấp xỉ, ổn định và hội tụ của nghiệm xấp xỉ.

CÁC CÔNG TRÌNH KHOA HỌC ĐÃ CÔNG BỐ

1. Dang Thi Oanh, Ngo Manh Tuong (2022), "An Approach to Adaptive Refinement for the RBF-FD Method for 2D Elliptic Equations", *Applied Numerical Mathematics*, 178, 123–154 (SCI-E, Q1).
2. Oleg Davydov, Dang Thi Oanh, Ngo Manh Tuong (2020), "Octant-based stencil selection for meshless finite difference methods in 3D", *Vietnam Journal of Mathematics*, 48, 93–106 (ESCI, Q2).
3. Oleg Davydov, Dang Thi Oanh, Ngo Manh Tuong (2023), "Improved Stencil Selection for Meshless Finite Difference Methods in 3D", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 425, 115031 (SCI, Q2).

CÁC KẾT QUẢ CỦA LUẬN ÁN ĐÃ ĐƯỢC BÁO CÁO TẠI

1. Seminar phòng Giải tích số và tính toán khoa học, Viện Toán học - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam, các năm 2017, 2018, 2019.
2. Seminar của Bộ môn Toán ứng dụng và Tin học, Khoa Toán - Tin, Trường Đại học Khoa học, Đại học Thái Nguyên, các năm 2017, 2018, 2019, 2020.
3. Hội thảo Tối ưu và Tính toán khoa học lần thứ 15, 16, 17, tháng 4 các năm 2017, 2018, 2019.
4. Hội nghị Khoa học và Công nghệ Quốc gia lần thứ X (Fair), "Nghiên cứu cơ bản và ứng dụng Công nghệ thông tin", Đà Nẵng, tháng 8 năm 2017.
5. Hội thảo Quốc tế HPSC lần thứ 7, "7th International Conference on High Performance Scientific Computing", Hà Nội, tháng 3 năm 2018.
6. Hội thảo tại Trường Đại học Công nghệ thông tin và Truyền thông - Đại học Thái Nguyên, các năm 2017, 2018, 2019, 2020.
7. Hội thảo Khoa học "Một số vấn đề trong Toán học đương đại", Khoa Toán-Tin, Trường Đại học Khoa học, Đại học Thái Nguyên, ngày 10/11/2020.

Tài liệu tham khảo

- [1] G. Barnett and L. D. Tongo (2008), *Data Structures and Algorithms: Annotated Reference with Examples*, NETSlackers.
- [2] V. Bayona, N. Flyer, B. Fornberg, and G. A. Barnett (2017), "On the role of polynomials in RBF-FD approximations: II. Numerical solution of elliptic PDEs", *Journal of Computational Physics*, 332, 257-273.
- [3] J. Benito, F. Urena, L. Gavete, and R. Alvarez (2003), "An h-adaptive method in the generalized finite differences", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(5-6), 735-759.
- [4] I. Boztosun and A. Charafi (2002), "An analysis of the linear advection-diffusion equation using meshfree and mesh-dependent methods", *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 26(10), 889-895.
- [5] I. Boztosun, A. Charafi, and D. Boztosun (2003), "On the numerical solution of linear advection-diffusion equation using compactly supported radial basis functions". In M. Griebel and M. A. Schweitzer, editors, *Meshfree Methods for Partial Differential Equations*, Springer Berlin Heidelberg, 63-73.
- [6] R. A. Brown (2015), "Building a balanced k-d tree in $O(kn \log n)$ time", *Journal of Computer Graphics Techniques (JCGT)*, 4(1), 50-68.
- [7] M. D. Buhmann (2003), *Radial Basis Functions*, Cambridge University Press, New York, USA.
- [8] R. Cavoretto and A. De Rossi (2020), "Adaptive procedures for meshfree rbf unsymmetric and symmetric collocation methods", *Applied Mathematics and Computation*, 382, 125354.
- [9] R. Cavoretto and A. De Rossi (2020), "A two-stage adaptive scheme based on rbf collocation for solving elliptic pdes", *Computers & Mathematics with Applications*, 79(11), 3206-3222.
- [10] T. Cecil, J. Qian, and S. Osher (2004), "Numerical methods for high dimensional hamilton-jacobi equations using radial basis functions", *Journal of Computational Physics*, 196(1), 327-347.

- [11] P. G. Ciarlet (1978), *The Finite Element Method for Elliptic Problems*, North-Holland.
- [12] P. G. Ciarlet and P.-A. Raviart (1973), "Maximum principle and uniform convergence for the finite element method", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2(1), 17-31.
- [13] R. Courant (1943), "Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations", *Bulletin of the American Mathematical Society*, 49(1), 1-24.
- [14] O. Davydov (2019), "Error bounds for a least squares meshless finite difference method on closed manifolds", *arXiv:1910.03359v1*.
- [15] O. Davydov (2019), "Selection of sparse sets of influence for meshless finite difference methods", *arxiv.1908.01567*.
- [16] O. Davydov and D. T. Oanh (2011), "Adaptive meshless centres and RBF stencils for Poisson equation", *Journal of Computational Physics*, 230, 287-304.
- [17] O. Davydov and D. T. Oanh (2011), "On the optimal shape parameter for Gaussian radial basis function finite difference approximation of the Poisson equation", *Computers & Mathematics with Applications*, 62, 2143-2161.
- [18] O. Davydov, D. T. Oanh, and N. M. Tuong (2020), "Octant-based stencil selection for meshless finite difference methods in 3D", *Vietnam Journal of Mathematics*, 48(1), 93-106.
- [19] O. Davydov, D. T. Oanh, and N. M. Tuong (2023), "Improved stencil selection for meshless finite difference methods in 3D", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 425, 115031.
- [20] O. Davydov and M. Safarpour (2021), "A meshless finite difference method for elliptic interface problems based on pivoted qr decomposition", *Applied Numerical Mathematics*, 161, 489-509.
- [21] O. Davydov and R. Schaback (2016), "Error bounds for kernel-based numerical differentiation", *Numerische Mathematik*, 132(2), 243-269.
- [22] O. Davydov and R. Schaback (2017), "Optimal stencils in Sobolev spaces", *IMA Journal of Numerical Analysis*, 39(1), 398-422.

- [23] O. Davydov and R. Schaback (2018), "Minimal numerical differentiation formulas", *Numerische Mathematik*, 140(3), 555-592.
- [24] G. F. Fasshauer (2007), *Meshfree Approximation Methods with MATLAB*, World Scientific Publishing Co., Inc., River Edge, NJ, USA.
- [25] N. Flyer, B. Fornberg, V. Bayona, and G. A. Barnett (2016), "On the role of polynomials in RBF-FD approximations: I. interpolation and accuracy", *Journal of Computational Physics*, 321, 21-38.
- [26] B. Fornberg and N. Flyer (2015), *A Primer on Radial Basis Functions with Applications to the Geosciences*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA.
- [27] B. Fornberg, E. Larsson, and N. Flyer (2011), "Stable computations with Gaussian radial basis functions", *SIAM Journal on Scientific Computing*, 33(2), 869-892.
- [28] C. Franke and R. Schaback (1998), "Solving partial differential equations by collocation using radial basis functions", *Applied Mathematics and Computation*, 93(1), 73-82.
- [29] P. J. Frey and P. L. George (2008), *Mesh generation: application to finite elements*, Wiley.
- [30] C. Geuzaine and J. F. Remacle, "Gmsh: A three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities", <http://gmsh.info/>.
- [31] C. Geuzaine and J. F. Remacle (2009), "Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities", *International journal for numerical methods in engineering*, 79(11), 1309-1331.
- [32] G. H. Golub and C. F. Van Loan (1996), *Matrix Computations* (3rd Ed.), Johns Hopkins University Press, USA.
- [33] M. Griebel and M. A. Schweitzer (2000), "A particle - partition of unity method for the solution of elliptic, parabolic and hyperbolic pdes", *SIAM Journal on Scientific Computing*, 22(3), 853-890.
- [34] K. Hormann and A. Agathos (2001), "The point in polygon problem for arbitrary polygons", *Computational Geometry*, 20(3), 131-144.

- [35] A. Hrennikoff (1941), "Solution of problems of elasticity by the framework method", *Journal of Applied Mechanics*, 8(4), 169-175.
- [36] A. Javed, K. Djijdeli, and J. Xing (2014), "Shape adaptive rbf-fd implicit scheme for incompressible viscous navier-strokes equations", *Computers & Fluids*, 89, 38-52.
- [37] P. S. Jensen (1972), "Finite difference techniques for variable grids", *Computers & Structures*, 2(1-2), 17-29.
- [38] J. L. B. Jerome, H. Friedman, and R. A. Finkel (1977), "An algorithm for finding best matches in logarithmic expected time", *ACM Transactions on Mathematical Software*, 3(3), 209-226.
- [39] E. J. Kansa (1990), "Multiquadrics-A scattered data approximation scheme with applications to computational fluid-dynamics-I surface approximations and partial derivative estimates", *Computers & Mathematics with applications*, 19(8-9), 127-145.
- [40] E. J. Kansa (1990), "Multiquadrics-A scattered data approximation scheme with applications to computational fluid-dynamics-II solutions to parabolic, hyperbolic and elliptic partial differential equations", *Computers & mathematics with applications*, 19(8-9), 147-161.
- [41] C. K. Lee, X. Liu, and S. C. Fan (2003), "Local multiquadric approximation for solving boundary value problems", *Computational Mechanics*, 30(5-6), 396-409.
- [42] R. Li, Z. Chen, and W. Wu (2000), *Generalized Difference Methods for Differential Equations: Numerical Analysis of Finite Volume Methods* (1st ed.), CRC Press, <https://doi.org/10.1201/9781482270211>.
- [43] J. Li, S. Zhai, Z. Weng, and X. Feng (2017), "H-adaptive RBF-FD method for the high-dimensional convection-diffusion equation", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 89, 139-146.
- [44] T. Liszka and J. Orkisz (1980), "The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics", *Computers & Structures*, 11, 83-95.
- [45] T. J. Liszka, C. A. M. Duarte, and W. W. Tworzydło (1996), "Hp-meshless cloud method", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139, 263-288.

- [46] W. F. Mitchell (2013), "A collection of 2d elliptic problems for testing adaptive grid refinement algorithms", *Applied Mathematics and Computation*, 220, 350-364.
- [47] V. P. Nguyen, T. Rabczuk, S. Bordas, and M. Duflot (2008), "Meshless methods: A review and computer implementation aspects", *Mathematics and Computers in Simulation*, 79(3), 763-813.
- [48] D. T. Oanh, O. Davydov, and H. X. Phu (2017), "Adaptive RBF-FD method for elliptic problems with point singularities in 2D", *Applied Mathematics and Computation*, 313, 474-497.
- [49] D. T. Oanh and N. M. Tuong (2022), "An approach to adaptive refinement for the RBF-FD method for 2D elliptic equations", *Applied Numerical Mathematics*, 178, 123-154.
- [50] *Partial Differential Equation Toolbox™ User's Guide*, The MathWorks, Inc, (2016).
- [51] F. Perazzo, R. Lohner, and L. Perez-Pozo (2008), "Adaptive methodology for meshless finite point method", *Advances in Engineering Software*, 39(3), 156-166.
- [52] L. F. Richardson (1911), "The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam", *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 210, 459-470.
- [53] R. Schaback (1995), "Error estimates and condition numbers for radial basis function interpolation", *Advances in Computational Mathematics*, 3, 251-264.
- [54] R. Schaback (2017), "Error analysis of nodal meshless methods", In M. Griebel and M. A. Schweitzer, editors, *Meshfree Methods for Partial Differential Equations VIII*, pages 117-143, Springer International Publishing.
- [55] L. Shen, G. Lv, and Z. Shen (2009), "A finite point method based on directional differences", *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 47(3), 2224-2242.
- [56] J. Slak and G. Kosec (2019), "Adaptive radial basis function generated finite differences method for contact problems", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 119(7), 661-686.

- [57] J. Slak and G. Kosec (2019), "Adaptive RBF-FD Method for Poisson's Equation", In *Boundary Elements and other Mesh Reduction Methods XLII, WIT Transactions on Engineering Sciences*.
- [58] G. Strang and G. J. Fix (1973), *An analysis of the finite element method. Prentice-Hall series in automatic computation*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- [59] A. I. Tolstykh and D. A. Shirobokov (2003), "On using radial basis functions in a 'finite difference mode' with applications to elasticity problems", *Computational Mechanics*, 33(1), 68-79.
- [60] P. Vaidya (1989), "An $O(n \log n)$ algorithm for the all-nearest-neighbors problem", *Discrete & Computational Geometry*, 4(2), 101-116.
- [61] H. Wendland (2005), *Scattered Data Approximation*, Cambridge University Press.
- [62] G. B. Wright and B. Fornberg (2006), "Scattered node compact finite difference-type formulas generated from radial basis functions", *Journal of Computational Physics*, 212(1), 99-123.
- [63] Z. M. Wu and R. Schaback (1993), "Local error estimates for radial basis function interpolation of scattered data", *IMA Journal of Numerical Analysis*, 13(1), 13-27.
- [64] O. C. Zienkiewicz and J. Z. Zhu (1987), "A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24(2), 337-357.