

SONG SONG HÓA VIỆC CHỌN TÂM VÀ TÍNH VÉC TỌ TRỌNG SỐ CHO PHƯƠNG PHÁP KHÔNG LƯỚI RBF-FD GIẢI PHƯƠNG TRÌNH POISSON

Đặng Thị Oanh^{*}, Ngô Mạnh Tường

Trường Đại học Công nghệ thông tin và Truyền thông – ĐH Thái Nguyên

TÓM TẮT

Trong những năm gần đây, phương pháp không lưới RBF-FD (Radial Basis Function - Finite difference) giải phương trình đạo hàm riêng đã được nhiều nhà khoa học quan tâm. Phương pháp này hiệu quả đối với những bài toán có miền hình học phức tạp, hàm có độ dao động lớn hoặc không gian nhiều chiều, bởi tính mềm dẻo của nội suy RBF. Tuy nhiên, vấn đề lớn nhất của phương pháp này là thời gian chọn tâm và tính véctơ trọng số khá cao. Để khắc phục tình trạng này, chúng tôi giới thiệu phương pháp song song hóa thuật toán chọn tâm và tính véctơ trọng số cho phương pháp không lưới RBF-FD giải phương trình Poisson. Kết quả thử nghiệm cho thấy, khi kích thước dữ liệu của bài toán tăng lên, việc song song hóa thuật toán chọn tâm và tính véctơ trọng số đã cải thiện đáng kể thời gian tính toán.

Từ khóa: *Tính toán song song; Phương pháp RBF-FD; Không lưới; Phương pháp phân tử hữu hạn*

Ngày nhận bài: 02/01/2019; Ngày hoàn thiện: 13/02/2019; Ngày duyệt đăng: 28/02/2019

PARALLELIZATION IN CHOOSE THE CENTERS AND COMPUTE THE WEIGHT VECTORS FOR THE MESHLESS RBF-FD TO SOLVE POISSON EQUATION

Dang Thi Oanh^{*}, Ngo Manh Tuong

TNU - University of Information and Communication Technology

ABSTRACT

In recent years, the RBF-FD (Radial Basis Function - Finite difference) method of solving partial differential equation has been researched by many scientists. This method is effective for problems with complex geometry, large fluctuations function or multidimensional space, due to the flexibility of RBF interpolation. However, the biggest problem of this method is that the time for choosing center and computing weight vector is quite high. To overcome this situation, we introduced a method of parallelizing the selection stencil algorithm and computation the weight vector for the RBF-FD method to solve the Poisson equation. Numerical results show that when the data of the problem increases, the parallelization of the selection stencil algorithm and the computation weighted vector has significantly improved computational time.

Keywords: *Parallel computing; RBF-FD; meshless; FEM*

Received: 02/01/2019; Revised: 13/02/2019; Approved: 28/02/2019

* Corresponding author: *Tel: 0982 756992, Email: dtoanh@ictu.edu.vn*

GIỚI THIỆU

Phương pháp không lưới RBF-FD được công bố đầu tiên năm 2003 bởi Tolstykh và Shirobokov [1]. Năm 2006, Wright và Fornberg đề xuất phương pháp RBF-FD sử dụng nội suy Hermite [2]. Năm 2011, Oleg Davydov và Đặng Thị Oanh công bố phương pháp RBF-FD dựa trên nội suy đa điểm và một số thuật toán hỗ trợ phương pháp này trong không gian 2 chiều [3, 4]. Gần đây, Đặng Thị Oanh, Oleg Davydov và Hoàng Xuân Phú tiếp tục phát triển phương pháp này trên các bài toán có hình học phức tạp và hàm có độ dao động lớn [5].

Các kết quả theo hướng nghiên cứu này đã đạt được là: Phát triển được một số cách tính véc tơ trọng số dựa trên ý tưởng của phương pháp sai phân hữu hạn (FD-Finite Difference) và phương pháp phần tử hữu hạn (FEM-Finite Element Method) [3, 6, 7], xây dựng thuật toán ước lượng tham số hình dạng tối ưu [4], xây dựng thuật toán làm mịn thích nghi [3, 5] và xây dựng thuật toán chọn tâm nội suy [3, 5, 6, 8]. Thuật toán chọn tâm hỗ trợ tính toán véc tơ trọng số đã được các tác giả giới thiệu trong [3, 5] rất hiệu quả, nhưng đối với các bài toán có cấu trúc dữ liệu lớn và phức tạp thì tốc độ tính toán sẽ bị ảnh hưởng không nhỏ. Nguyên nhân chủ yếu khiến thời gian tính toán của phương pháp RBF-FD cao là công đoạn chọn tâm và tính véc tơ trọng số. Để tăng tốc độ tính toán, trong bài báo này chúng tôi giới thiệu kỹ thuật song song hóa quá trình chọn tâm và tính véc tơ trọng số cho phương pháp không lưới RBF-FD giải phương trình poisson.

Bài báo gồm 6 phần: Sau Phần giới thiệu là Phần 2, miêu tả phương pháp RBF-FD giải phương trình Poisson; Phần 3, giới thiệu thuật toán chọn tâm; Phần 4, trình bày phương pháp song song hóa quá trình chọn tâm và tính véc tơ trọng số, Phần 5, thử nghiệm số và Phần 6 là Kết luận.

PHƯƠNG PHÁP RBF-FD

Xét bài toán Dirichlet với phương trình Poisson như sau: Cho miền mở $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ và các hàm số f xác định trên Ω , g xác định trên $\partial\Omega$. Tìm hàm $u: \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ thỏa mãn

$$\begin{aligned} Du &= f \quad \text{in } \Omega, \\ u &= g \quad \text{on } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{1}$$

trong đó, D là toán tử Laplace.

Giả sử $\Xi \subset \bar{\Omega}$ là tập các tâm rời rạc. Gọi $\Xi_{\text{int}} := \Xi \cap \Omega$ là các tâm nằm trong miền và $\partial\Xi := \Xi \cap \partial\Omega$ là các tâm nằm trên biên. Với mỗi tâm $\zeta \in \Xi_{\text{int}}$, ta chọn được tập $\Xi_{\zeta} := \{\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_k\} \subset \Xi$, với $\xi_0 = \zeta$ (còn gọi là tập tâm hỗ trợ phương pháp không lưới). Khi đó Bài toán (1) được rời rạc hóa thành hệ phương trình tuyến tính

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

trong đó \tilde{u} là nghiệm xấp xỉ của u và $w_{\zeta, \xi} \in \mathbb{R}$ là véc tơ trọng số được tính bằng nội suy RBF

$$w_{\zeta, \xi} = \left(\Phi_{\Xi_{\zeta}} \right)^{-1} \Delta\Phi(\zeta - \cdot)|_{\Xi_{\zeta}}, \quad \zeta \in \Xi_{\text{int}}, \tag{3}$$

(xem [3, 8, 5]).

Đối với phương pháp này, thời gian tính toán phụ thuộc nhiều vào quá trình chọn bộ tâm Ξ_{ζ} và tính véc tơ trọng số theo Công thức (3), trong phần tiếp theo chúng tôi nhắc lại Thuật toán chọn tâm.

THUẬT TOÁN CHỌN TÂM

Thuật toán này được trình bày chi tiết trong [5, Thuật toán 1], gọi tắt là thuật toán ODP có nội dung như sau:

Input: Bộ tâm rời rạc Ξ, ζ .

Output: Tập tâm hỗ trợ Ξ_{ζ} .

Các tham số: k (số tâm được chọn), $m > k$ (số tâm ứng viên ban đầu), $u > 1.0$ (hệ số góc đều), $c > 1.0$ (hệ số khoảng cách).

I. Tìm m tâm $\xi_1, \dots, \xi_m \in \Xi \setminus \{\zeta\}$ sao cho gần ζ nhất, sắp xếp các tâm theo chiều tăng dần theo khoảng cách đến ζ , đầu tiên

$$\Xi_{\zeta} := \{\zeta, \xi_1, \dots, \xi_k\} \text{ và } i := k + 1.$$

II. While $i \leq m$:

$$1. \text{ If } \|\zeta - \xi_i\| \geq \frac{c}{2k} \sum_{j=1}^k (\|\xi_j - \zeta\| + \|\xi_j - \xi_{j+1}\|)$$

then STOP and Return Ξ_{ζ} .

2. Tính các góc $\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_{k+1}$ tương ứng với tập mở rộng

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

If góc giữa tia $\zeta\xi_i$ và hai tia lân cận lớn hơn góc nhỏ nhất $\underline{\alpha}' := \underline{\alpha}(\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_{k+1})$ then:

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

ii. If

$$\mu(\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_{k+1}) \setminus \{\xi'_p\} < \mu(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k)$$

then:

a. Update

$$\Xi_{\zeta} := \{\zeta, \xi_1, \dots, \xi_k\} = \{\zeta, \xi'_1, \dots, \xi'_{k+1}\} \setminus \{\xi'_p\}.$$

b. If

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

then STOP and Return Ξ_{ζ} .

3. If $i = m$ then: tìm m điểm $\xi_{m+1}, \xi_{m+2}, \dots, \xi_{2m} \in \Xi \setminus \{\zeta\}$ gần ζ nhất, sắp xếp các điểm theo chiều tăng dần của khoảng cách đến ζ và $m := 2m$.

4. Đặt $i := i + 1$.

SONG SONG HÓA VIỆC CHỌN TÂM VÀ TÍNH VÉC TƠ TRỌNG SỐ HỖ TRỢ PHƯƠNG PHÁP KHÔNG LƯỚI RBF-FD

Ý tưởng thuật toán

Giả sử có N bộ xử lý và các tập tâm như sau: $\Xi \subset \bar{\Omega}$ là tập tâm rời rạc, tập Ξ_{int} chứa các điểm nằm trong miền.

1. Trước tiên, chúng ta phân hoạch Ξ_{int} thành N phần xấp xỉ bằng nhau, tương ứng với N bộ xử lý.

2. Tiếp theo, thực hiện thuật toán ODP trên mỗi bộ xử lý để tìm tập Ξ_{ζ} và tính véc tơ trọng số w_{ζ} tương ứng với Ξ_{ζ} , đồng thời lưu trữ các véc tơ trọng số vừa tìm được vào tập w_{ζ} .

Để thực hiện được tính toán song song khi sử dụng thuật toán ODP và tính véc tơ trọng số, ta cần phân luồng dữ liệu đầu vào phù hợp. Nghĩa là, tách và phân phối n tâm trong tập Ξ_{int} đều khắp trên N bộ xử lý, sao cho mỗi bộ xử lý có số tâm gần bằng nhau, tương ứng là:

$$\Xi_{\text{int}}^{(i)} := \{\zeta_j^{(i)} : j = 1, 2, \dots, n^{(i)}\}, i = 1, 2, \dots, N,$$

với $n^{(1)} \approx n^{(2)} \approx \dots \approx n^{(N)} \approx \left\lfloor \frac{n}{N} \right\rfloor$. Từ đó mỗi bộ xử lý sẽ tính số tập các tâm hỗ trợ $\Xi_{\zeta_j}^{(i)}, i = 1, 2, \dots, N, j = 1, 2, \dots, n^{(i)}$ và véc tơ trọng số $w_{\zeta_j}^{(i)}, i = 1, 2, \dots, N, j = 1, 2, \dots, n^{(i)}$ tương ứng. Quá trình xử lý song song như trong Mục 4.2.

Nội dung thuật toán

Input: Bộ tâm rời rạc Ξ, Ξ_{int}, N .

Output: Tập các véc tơ trọng số $w_{\zeta}, \zeta \in \Xi_{\text{int}}$.

Tham số: Các tham số của thuật toán ODP k, m, u, c . Đầu tiên, $w_{\zeta} := \emptyset$.

I. Phân hoạch dữ liệu cho N bộ xử lý:

$$1. n_1 = \left\lfloor \frac{n}{N} \right\rfloor; i := 1; j := 0.$$

2. While $i \leq N$

a. If $i = N$ then $n^{(i)} := n_1(1 - N) + n$

Else $n^{(i)} := n_1$;

$$b. \Xi_{\text{int}}^{(i)} := \{\zeta_{j+1}, \zeta_{j+2}, \dots, \zeta_{j+n^{(i)}}\};$$

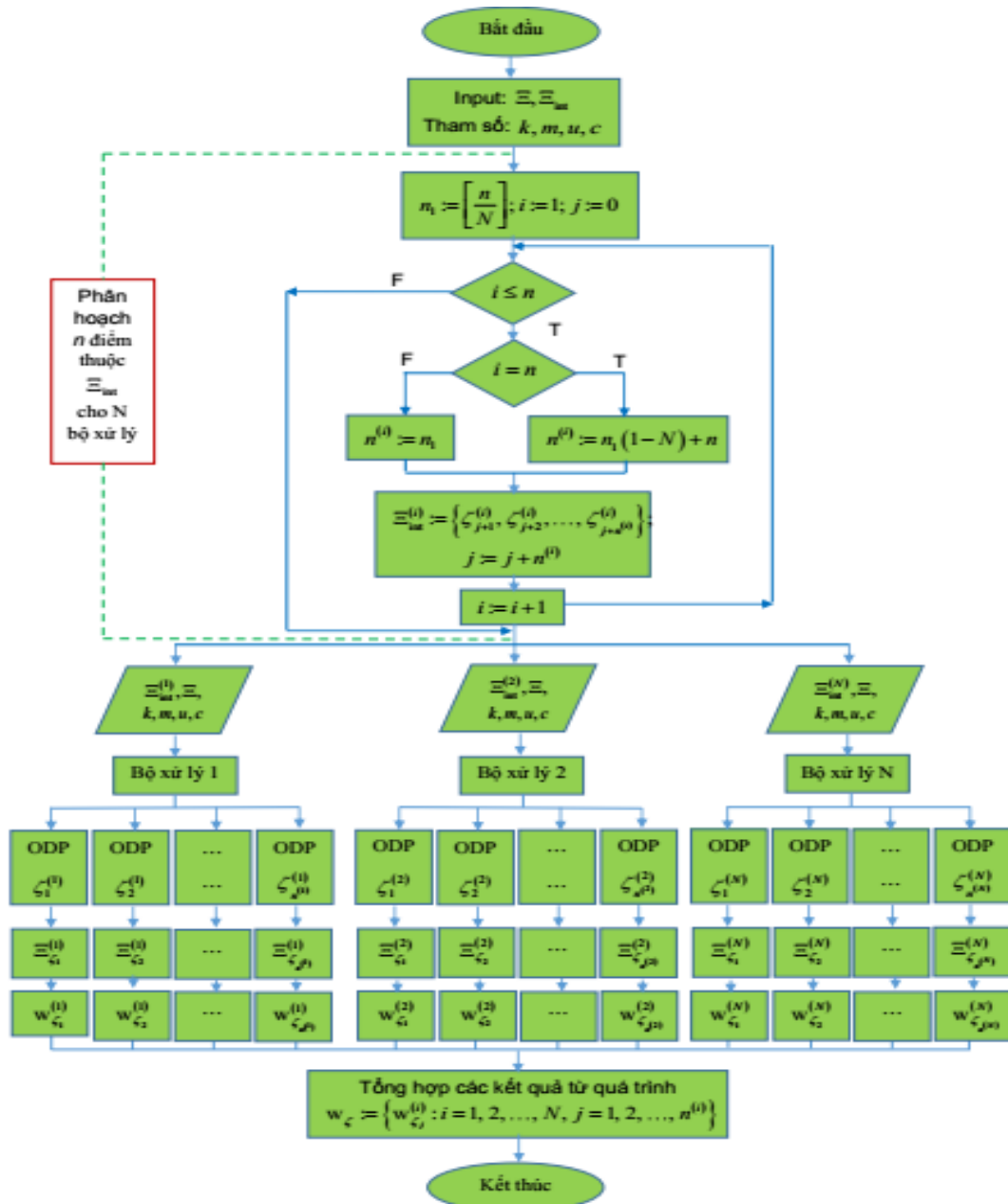
c. $j := j + n^{(i)}$;

d. $i := i + 1$.

II. Đối với mỗi bộ xử lý thứ $i \in N$,

1. For each $\zeta_j \in \Xi_{\text{int}}^{(i)}$:

a. Sử dụng thuật toán chọn tâm ODP, tìm các tập $\Xi_{\zeta_j}^{(i)}, j = 1, 2, \dots, n^{(i)}$;



Hình 1. Lưu đồ song song hóa thuật toán hỗ trợ chọn tâm ODP và tính véc tơ trọng số

- b. Tính các véc tơ trọng số $w_{\zeta_j}^{(i)}, j = 1, 2, \dots, n^{(i)}$ bởi công thức (3) tương ứng với các tập

$$\Xi_{\zeta_j}^{(i)}, j = 1, 2, \dots, n^{(i)}.$$

2. Lưu trữ các véc tơ trọng số vừa tính

$$w_{\zeta} := w_{\zeta} \cup \{w_{\zeta_j}^{(i)} : j = 1, 2, \dots, n^{(i)}\}.$$

Lưu đồ của thuật toán

Lưu đồ tính toán song song sử dụng thuật toán hỗ trợ chọn tâm ODP (Hình 1).

THỬ NGHIỆM SỐ

Mục tiêu của thử nghiệm là so sánh hiệu quả về mặt thời gian của việc có sử dụng quá trình song song hóa trong chọn bộ tâm nội suy và tính véc tơ trọng số cho phương pháp RBF-FD giải phương trình Poisson hay không?

Trong thử nghiệm sau, chúng tôi sử dụng hàm nội suy RBF Gauss-QR (xem [4, 5, 8, 9]), với tham số hình dạng $\varepsilon = 10^{-5}$. Chúng tôi sử dụng công thức sai số trung bình bình phương *rms* (root mean square):

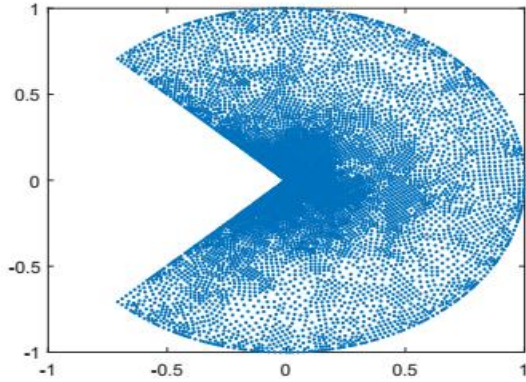
$$rms := \left(\frac{1}{\#\Xi_{int}} \sum_{\zeta \in \Xi_{int}} (\tilde{u}(\zeta) - u(\zeta))^2 \right)^{1/2},$$

trong đó $\#\Xi_{int}$ là số tâm trong miền.

Các tham số được sử dụng trong thuật toán ODP là $u = 2.5, c = 3.0, k = 6, m = 50$.

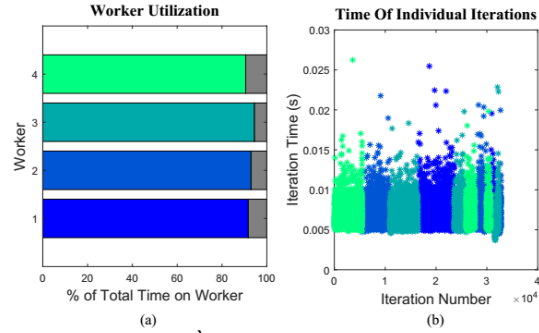
Bài toán: Xét phương trình Laplace $\Delta u = 0$ trên miền hình tròn khuyết Ω trong tọa độ cực xác định bởi $r < 1, -\frac{3\pi}{4} < \varphi < \frac{3\pi}{4}$, với điều kiện biên $u(r, \varphi) = \cos \frac{2\varphi}{3}$ dọc theo các cung và $u(r, \varphi) = 0$ theo đường thẳng. Nghiệm chính xác của bài toán là $u(r, \varphi) = r^{\frac{2}{3}} \cos \frac{2\varphi}{3}$.

Chúng tôi thử nghiệm trên các bộ tâm Ξ là sản phẩm của PDE Toolbox của MATLAB như trong [3, 5], Hình 2 minh họa miền Ω với 11891 tâm.



Hình 2. Miền Ω với 11891 tâm

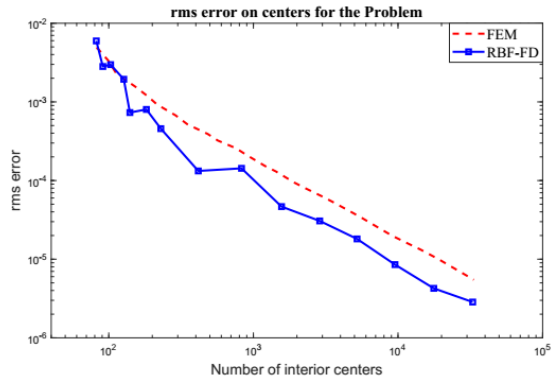
Hình 3 minh họa việc phân luồng dữ liệu trong tính toán song song khi sử dụng thuật toán ODP cho phương pháp RBF-FD, thử nghiệm với 32841 tâm và 4 bộ xử lý (4 worker). Hình 3 (a) biểu diễn thời gian tính toán và Hình 3 (b) biểu diễn kết quả phân luồng dữ liệu trên 4 bộ xử lý, tương ứng với 4 màu khác nhau. Quan sát ta thấy mỗi bộ xử lý có số tâm xấp xỉ nhau.



Hình 3. Phân luồng dữ liệu và thời gian chạy trên 4 bộ xử lý với 32841 tâm trong miền

Kết quả thử nghiệm số của bài toán được trình bày trong Bảng 1 và Hình 4. Sai số rms của phương pháp FEM được thể hiện trong cột thứ 2 của Bảng 1 và đường màu đỏ, nét rời có nhãn ‘‘FEM’’ trong Hình 4. Sai số rms của phương pháp RBF-FD là cột thứ 3 trong Bảng 1 và đường màu xanh, nét liền có nhãn ‘‘RBF-FD’’ trong Hình 4.

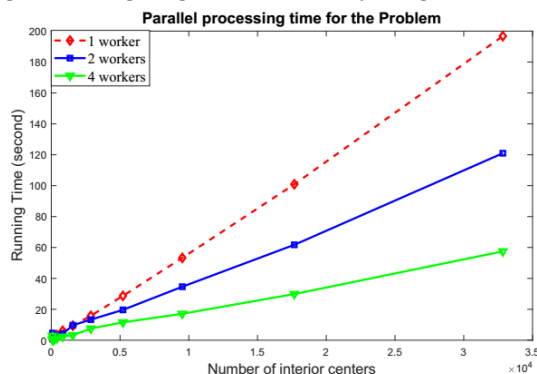
Các cột 4, 5, 6 trong Bảng 1 và Hình 5 biểu diễn thời gian tính toán của quá trình song song và tuần tự của phương pháp RBF-FD. Cụ thể là: Cột 4 của Bảng 1 và đường mang nhãn ‘FEM’ trong Hình 5 biểu diễn thời gian tính toán tuần tự, Cột 5, 6 của Bảng 1 tương ứng với đường nhãn ‘2 workers’ và đường ‘4 workers’ của Hình 5 biểu diễn thời gian của quá trình song song với 2 bộ xử lý và 4 bộ xử lý.



Hình 4. Sai số rms trên các tâm

Kết quả thử nghiệm trong Hình 4 cho thấy độ chính xác của phương pháp không lưới RBF-FD không thay đổi khi áp dụng quá trình song song. Nhưng thời gian chạy thể hiện trong Hình 5 cho thấy khi miền có mật độ tâm phân bố càng cao thì hiệu quả của việc áp dụng quá

trình song song vào chọn tâm và tính véc tơ trọng số càng lớn, hơn nữa thời gian cũng giảm tương ứng khi số bộ xử lý tăng.



Hình 5. Thời gian chạy tuần tự và song song

KẾT LUẬN

Song song hóa quá trình chọn tâm và tính véc tơ trọng số thực sự hiệu quả khi số tâm trong miền lớn và số bộ xử lý cao. Đây là các kết quả đáng quan tâm và khích lệ nhóm tác giả tiếp tục theo đuổi nghiên cứu để song song hóa các công đoạn khác nhau của phương pháp không lưới RBF-FD, nhằm giải quyết được vấn đề thời gian của phương pháp này.

LỜI CẢM ƠN

Bài báo được tài trợ bởi Đề tài cấp Đại học, mã số ĐH2015-TN07-03.

Bảng 2. Kết quả thử nghiệm của bài toán

Số tâm trong miền	Sai số rms		Thời gian chạy (giây) của phương pháp RBF-FD		
	FEM	RBF-FD	1 bộ xử lý	2 bộ xử lý	4 bộ xử lý
82	4,85e-03	5,96e-03	1,644808	4,591271	28,582
103	2,54e-03	2,98e-03	0,693356	0,821131	0,4110
140	1,57e-03	7,32e-04	1,110646	1,00694	0,4092
182	1,17e-03	8,02e-04	1,486193	1,660133	0,6201
229	9,31e-04	4,57e-04	1,680099	1,997218	0,7309
416	3,90e-04	1,32e-04	3,286499	3,154779	1,2410
828	2,11e-04	1,43e-04	6,080352	4,10526	2,3081
1566	1,31e-04	4,66e-05	9,36640	9,662382	3,2220
2875	6,24e-05	3,07e-05	15,79933	13,32561	7,5275
5210	3,30e-05	1,81e-05	28,67375	19,61979	11,5588
9528	1,98e-05	8,54e-06	53,27411	34,59895	17,0929
17676	1,01e-05	4,26e-06	100,8927	61,7280	32,1302
32841	5,47e-06	2,85e-06	196,7588	120,9914	60,9951

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. 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), pp. 68-79.
2. G. B. Wright and B. Fornberg (2006), "Scattered node compact finite difference-type formulas generated from radial basis functions", *J. Comput. Phys.*, 212(1), pp. 99-123.
3. O. Davydov and D. T. Oanh (2011), "Adaptive meshless centres and RBF stencils for Poisson equation", *J. Comput. Phys.*, 230, pp. 287-304.
4. O. Davydov and D. T. Oanh (2011), "On the optimal shape parameter for Gaussian Radial Basis Function finite difference approximation of Poisson equation", *Computers and Mathematics with Applications*, 62, pp. 2143-2161.

5. 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, pp. 474-497.
6. C. K. Lee, X. Liu, and S. C. Fan (2003), "Local multiquadric approximation for solving boundary value problems", *Comput. Mech.*, 30(5-6), pp. 396-409.
7. L. Shen, G. Lv, and Z. Shen (2009), "A finite point method based on directional differences". *SIAM Journal on Numerical. Analysis*, 47(3), pp. 2224-2242.
8. G. F. Fasshauer (2007), *Meshfree Approximation Methods with MATLAB*, World Scientific Publishing Co., Inc., River Edge, NJ, USA.
9. M. D. Buhmann (2003), *Radial Basis Functions*, Cambridge University Press, New York, NY, USA.