

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Факультет вычислительной математики и кибернетики

Кафедра информационной безопасности

Мирпулатов Исломбек Пулат-угли

Краевая задача для уравнения Пуассона с потенциалом в прямоугольной области

Суперкомпьютерное моделирование и технологии

Группа 608, Вариант 8

Москва, 2022

1 Постановка задачи

Требуется методом конечных разностей приближенно решить краевую задачу для уравнения Пуассона с потенциалом в прямоугольной области. Задание необходимо выполнить на ПВС Московского университета IBM Polus.

1.1 Математическая постановка задачи

В прямоугольнике $\Pi = \{(x, y) : A_1 \leq x \leq A_2, B_1 \leq y \leq B_2\}$, граница Γ которого состоит из отрезков

$$\begin{aligned}\gamma_R &= \{(A_2, y), B_1 \leq y \leq B_2\}, \quad \gamma_L = \{(A_1, y), B_1 \leq y \leq B_2\}, \\ \gamma_T &= \{(x, B_2), A_1 \leq x \leq A_2\}, \quad \gamma_B = \{(x, B_1), A_1 \leq x \leq A_2\},\end{aligned}$$

рассматривается дифференциальное уравнение Пуассона с потенциалом

$$-\Delta u + q(x, y)u = F(x, y),$$

в котором оператор Лапласа

$$\Delta u = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \right).$$

Для выделения единственного решения уравнение дополняется граничными условиями. На каждом отрезке границы прямоугольника Π задается условие одним из трех способов: 1. условия первого типа (условия Дирихле):

$$u(x, y) = \varphi(x, y)$$

2. условия второго типа (условия Неймана):

$$\left(k \frac{\partial u}{\partial n} \right) (x, y) = \psi(x, y),$$

3. условия третьего типа:

$$\left(k \frac{\partial u}{\partial n} \right) (x, y) + \alpha u(x, y) = \psi(x, y)$$

где n - единичная внешняя нормаль к границе прямоугольника. Заметим, что краевое условие второго типа (условие Неймана) содержится в краевом условии третьего типа (случай $\alpha = 0$) Функции $F(x, y)$, $\varphi(x, y)$, $\psi(x, y)$, коэффициент $k(x, y)$, потенциал $q(x, y)$ и параметр $\alpha \geq 0$ считаются известными, функцию $u(x, y)$, удовлетворяющую уравнению и граничным условиям, определенным вариантом задания, требуется найти.

Замечание. Нормаль n не определена в угловых точках прямоугольника. Краевое условие второго и третьего типа следует рассматривать лишь в тех точках границы, где нормаль существует.

1.2 Разностная схема решения задачи

Краевые задачи для уравнения Пуассона с потенциалом предлагается численно решать методом конечных разностей. В расчетной области Π определяется равномерная прямоугольная сетка $\bar{\omega}_h = \bar{\omega}_1 \times \bar{\omega}_2$, где

$$\bar{\omega}_1 = \{x_i = A_1 + ih_1, i = \overline{0, M}\}, \bar{\omega}_2 = \{y_j = B_1 + jh_2, j = \overline{0, N}\}.$$

Здесь $h_1 = (A_2 - A_1)/M, h_2 = (B_2 - B_1)/N$. Через ω_h обозначим множество внутренних узлов сетки $\bar{\omega}_h$, т.е. множество узлов сетки прямоугольника, не лежащих на границе Γ .

Рассмотрим линейное пространство H функций, заданных на сетке $\bar{\omega}_h$. Обозначим через w_{ij} значение сеточной функции $w \in H$ в узле сетки $(x_i, y_j) \in \bar{\omega}_h$. Будем считать, что в пространстве H задано скалярное произведение и евклидова норма

$$[u, v] = \sum_{i=0}^M h_1 \sum_{j=0}^N h_2 \rho_{ij} u_{ij} v_{ij}, \quad \|u\|_E = \sqrt{[u, u]}.$$

Весовая функция $\rho_{ij} = \rho^{(1)}(x_i) \rho^{(2)}(y_j)$, где в методе конечных разностей дифференциальная задача математической физики заменяется конечно-разностной операторной задачей вида

$$Aw = B$$

где $A : H \rightarrow H$ - оператор, действующий в пространстве сеточных функций, $B \in H$ - известная правая часть. Задача называется разностной схемой. Решение этой задачи считается численным решением исходной дифференциальной задачи.

При построении разностной схемы следует аппроксимировать (приближенно заменить) все уравнения краевой задачи их разностными аналогами - сеточными уравнениями, связывающими значения искомой сеточной функции в узлах сетки. Полученные таким образом уравнения должны быть функционально независимыми, а их общее количество - совпадать с числом неизвестных, т.е. с количеством узлов сетки.

Уравнение во всех внутренних точках сетки аппроксимируется разностным уравнением

$$-\Delta_h w_{ij} + q_{ij} w_{ij} = F_{ij}, \quad i = \overline{1, M-1}, j = \overline{1, N-1},$$

в котором $F_{ij} = F(x_i, y_j)$, $q_{ij} = q(x_i, y_j)$, разностный оператор Лапласа

$$\begin{aligned} \Delta_h w_{ij} = & \frac{1}{h_1} \left(k(x_i + 0.5h_1, y_j) \frac{w_{i+1j} - w_{ij}}{h_1} - k(x_i - 0.5h_1, y_j) \frac{w_{ij} - w_{i-1j}}{h_1} \right) + \\ & + \frac{1}{h_2} \left(k(x_i, y_j + 0.5h_2) \frac{w_{ij+1} - w_{ij}}{h_2} - k(x_i, y_j - 0.5h_2) \frac{w_{ij} - w_{ij-1}}{h_2} \right). \end{aligned}$$

Введем обозначения правой и левой разностных производных по переменным x, y соответственно:

$$\begin{aligned} w_{x,ij} &= \frac{w_{i+1j} - w_{ij}}{h_1}, & w_{\bar{x},ij} &= w_{x,i-1j} = \frac{w_{ij} - w_{i-1j}}{h_1}, \\ w_{y,ij} &= \frac{w_{ij+1} - w_{ij}}{h_2}, & w_{\bar{y},ij} &= w_{y,ij-1} = \frac{w_{ij} - w_{ij-1}}{h_2} \end{aligned}$$

а также определим сеточные коэффициенты

$$a_{ij} = k(x_i - 0.5h_1, y_j), \quad b_{ij} = k(x_i, y_j - 0.5h_2)$$

С учетом принятых обозначений разностный оператор Лапласа можно представить в более компактном и удобном виде

$$\Delta_h w_{ij} = (aw_{\bar{x}})_{x,ij} + (bw_{\bar{y}})_{y,ij}.$$

Краевые условия первого типа аппроксимируются точно равенством

$$w_{ij} = \varphi(x_i, y_j).$$

Переменные w_{ij} , заданные равенством, исключаются из разностной схемы, а соответствующие узлы $P_{ij}(x_i, y_j)$ - из расчетной сетки $\bar{\omega}_h$. В скалярном произведении слагаемые, отвечающие данным граничным узлам, считаются равными нулю.

Аппроксимация граничных условий третьего типа на правой и левой сторонах прямоугольника имеет вид:

$$\begin{aligned} (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{Mj} + (q_{Mj} + 2\alpha_R/h_1)w_{Mj} - (bw_{\bar{y}})_{y,Mj} &= F_{Mj} + (2/h_1)\psi_{Mj} \\ - (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{1j} + (q_{0j} + 2\alpha_L/h_1)w_{0j} - (bw_{\bar{y}})_{y,0j} &= F_{0j} + (2/h_1)\psi_{0j}, j = \overline{1, N-1} \end{aligned}$$

На верхней и нижней сторонах соответственно имеем:

$$\begin{aligned} (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{iN} + (q_{iN} + 2\alpha_T/h_2)w_{iN} - (aw_{\bar{x}})_{x,iN} &= F_{iN} + (2/h_2)\psi_{iN}, \\ - (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{i1} + (q_{i0} + 2\alpha_B/h_2)w_{i0} - (aw_{\bar{x}})_{x,i0} &= F_{i0} + (2/h_2)\psi_{i0}, i = \overline{1, M-1} \end{aligned}$$

Здесь $\alpha_R, \alpha_L, \alpha_T, \alpha_B$ - параметры в граничных условиях третьего типа, которые мы будем считать неизменными вдоль отрезков $\gamma_R, \gamma_L, \gamma_T, \gamma_B$ соответственно.

Аппроксимация граничных условий второго типа на правой, левой, верхней, нижней сторонах прямоугольника Π получается из равенств, если положить равными нулю параметры $\alpha_R, \alpha_L, \alpha_T, \alpha_B$ соответственно.

Сеточных уравнений недостаточно, чтобы определить разностную схему для задачи с граничными условиями. Требуется сеточные уравнения для угловых точек прямоугольника Π . Они имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} - (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{10} - (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{01} + (q_{00} + 2\alpha_L/h_1 + 2\alpha_B/h_2)w_{00} &= \\ &= F_{00} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{00} \end{aligned}$$

- в вершине $P(A_1, B_1)$ прямоугольника,

$$\begin{aligned} (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{M0} - (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{M1} + (q_{M0} + 2\alpha_R/h_1 + 2\alpha_B/h_2)w_{M0} &= \\ = F_{M0} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{M0} \end{aligned}$$

- в вершине $P(A_2, B_1)$ прямоугольника,

$$\begin{aligned} (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{MN} + (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{MN} + (q_{MN} + 2\alpha_R/h_1 + 2\alpha_T/h_2)w_{MN} &= \\ = F_{MN} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{MN} \end{aligned}$$

- в вершине $P(A_2, B_2)$ прямоугольника,

$$-(2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{1N} + (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{0N} + (q_{0N} + 2\alpha_L/h_1 + 2\alpha_T/h_2)w_{0N} = \\ = F_{0N} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{0N}$$

- в вершине $P(A_1, B_2)$ прямоугольника. Здесь

$$\psi_{00} = \frac{h_1\psi(A_1 + 0, B_1) + h_2\psi(A_1, B_1 + 0)}{h_1 + h_2}, \quad \psi_{M0} = \frac{h_1\psi(A_2 - 0, B_1) + h_2\psi(A_2, B_1 + 0)}{h_1 + h_2}, \\ \psi_{MN} = \frac{h_1\psi(A_2 - 0, B_2) + h_2\psi(A_2, B_2 - 0)}{h_1 + h_2}, \quad \psi_{0N} = \frac{h_1\psi(A_1 + 0, B_2) + h_2\psi(A_1, B_2 - 0)}{h_1 + h_2},$$

где

$$\psi(x_0 \pm 0, y) = \lim_{x \rightarrow x_0 \pm 0} \psi(x, y), \quad \psi(x, y_0 \pm 0) = \lim_{y \rightarrow y_0 \pm 0} \psi(x, y)$$

Замечание. Разностные схемы, аппроксимирующие все описанные выше краевые задачи для уравнения Пуассона с положительным потенциалом, обладают самосопряженным и положительно определенным оператором A и имеют единственное решение при любой правой части.

1.3 Разностная схема решения задачи

Приближенное решение системы уравнений для сформулированных выше краевых задач может быть получено итерационным методом наименьших невязок. Этот метод позволяет получить последовательность сеточных функций $w^{(k)} \in H, k = 1, 2, \dots$, сходящуюся по норме пространства H к решению разностной схемы, т.е.

$$\|w - w^{(k)}\|_E \rightarrow 0, \quad k \rightarrow +\infty.$$

Начальное приближение $w^{(0)}$ можно выбрать любым способом, например, равным нулю во всех точках расчетной сетки.

Метод является одношаговым. Итерация $w^{(k+1)}$ вычисляется по итерации $w^{(k)}$ согласно равенствам:

$$w_{ij}^{(k+1)} = w_{ij}^{(k)} - \tau_{k+1} r_{ij}^{(k)},$$

где невязка $r^{(k)} = Aw^{(k)} - B$, итерационный параметр

$$\tau_{k+1} = \frac{[Ar^{(k)}, r^{(k)}]}{\|Ar^{(k)}\|_E^2}$$

В качестве условия остановки итерационного процесса следует использовать неравенство

$$\|w^{(k+1)} - w^{(k)}\|_E < \varepsilon,$$

где ε — положительное число, определяющее точность итерационного метода. Оценку точности приближенного решения сеточных уравнений можно проводить в других нормах пространства сеточных функций, например, в максимум норме

$$\|w\|_C = \max_{x \in \bar{\omega}_h} |w(x)|$$

Константу ε для данной задачи предлагается взять равной 10^{-6} .

2 Решение

Задача практикума заключается в восстановлении известной гладкой функции $u(x, y)$ по ее образу $F(x, y) = -\Delta u + q(x, y)u$ и ее граничным значениям. Конкретное задание определяется набором граничных условий для уравнения Пуассона, явным видом коэффициента $k(x, y)$, потенциала $q(x, y)$ и функции $u(x, y)$, которую следует численно получить.

Предлагается восстановить следующую гладкую функцию: $u_2(x, y) = \sqrt{4 + xy}$, $\Pi = [0, 4] \times [0, 3]$

Коэффициент равен: $k(x, y) = 4 + x + y$

В качестве потенциала следует взять функций: $q_2(x, y) = x + y$

Пользуясь явным видом функций $u(x, y)$, $k(x, y)$, $q(x, y)$ определим правую часть уравнения Пуассона $F(x, y)$ и граничные условия $\psi(x, y)$:

$$F(x, y) = \frac{(x + y)(x^2 + y^2 + 4x^2y^2 + 30xy + 56) + 4(x^2 + y^2)}{4(4 + xy)\sqrt{4 + xy}}$$

$$\gamma_R : \psi(x, y) = \frac{y^2 + 4y + 3xy + 8}{2\sqrt{4 + xy}}$$

$$\gamma_L : \psi(x, y) = \frac{-y^2 - 4y + xy + 8}{2\sqrt{4 + xy}}$$

$$\gamma_T : \psi(x, y) = \frac{x^2 - 4x + xy}{2\sqrt{4 + xy}}$$

$$\gamma_B : \psi(x, y) = -\frac{x^2 + 4x + xy}{2\sqrt{4 + xy}}$$

С помощью равенств из 1.3 собрана разностную схему для уравнения Пуассона с граничными условиями, заданными условиями задания;

Для параллелизации сетку делим на области при помощи `MPI_Cart_rank`. Далее передаем между областями соседние значение по средствам `MPI::Comm::Send` и `MPI::Comm::Recv`. Редукция скалярных произведений осуществляется через `MPI::Comm::Allreduce`.

2.1 Описание программной реализации

2.2 Исследование масштабируемости программы на системе Polus

Таблица 1: Таблица с результатами расчетов на ПВС IBM Polus (MPI+OpenMP код).

Число процессов MPI	Число точек сетки ($M \times N$)	Время решения	Ускорение
4	500×500	722.858	1
8	500×500	345.369	2.093
16	500×500	182.47	3.960
32	500×500	95.844	7.542
4	500×1000	998.013	1
8	500×1000	501.010	1.992
16	500×1000	260.918	3.825
32	500×1000	144.702	6.897

Таблица 2: Таблица с результатами расчетов на ПВС IBM Polus (MPI+OpenMP код).

Число процессов MPI	Количество OMP нитей в процессе	Число точек сетки ($M \times N$)	Время решения	Ускорение
1	4	500×500	874.19	1
2	4	500×500	443.301	1.972
4	4	500×500	240.096	3.641
8	4	500×500	120.312	7.266
1	4	500×1000	1128.24	1
2	4	500×1000	643.605	1.753
4	4	500×1000	328.549	3.434
8	4	500×1000	166.284	6.785

График 1. Ускорение с использованием MPI
MPI acceleration

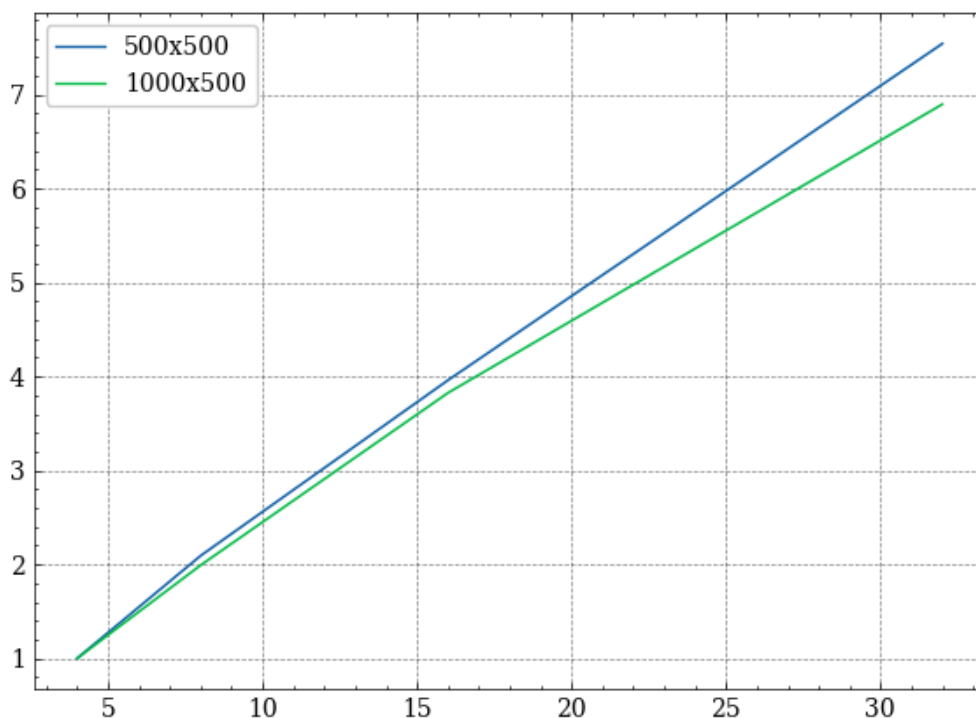


График 2. Ускорение с использованием MPI + OpenMP
MPI + OpenMP acceleration

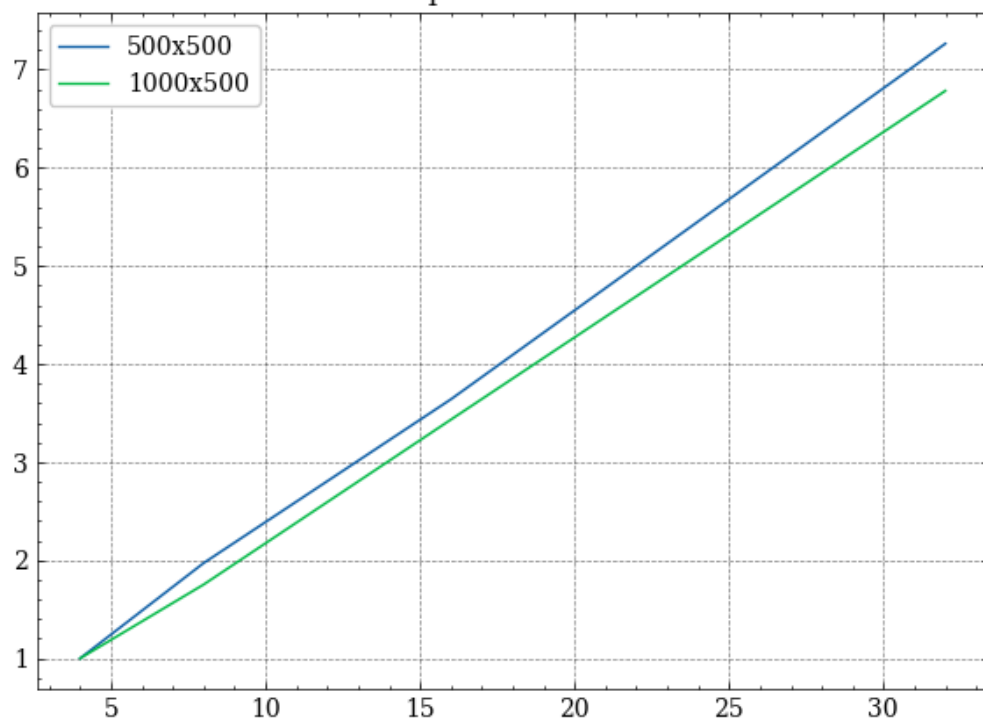


График 3. Точные значения (Сетка 500 на 500) | Полученные значения (Сетка 500 на 500)

