

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики

Немцов Дмитрий Викторович

608 группа

1 вариант

**ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ
ПУАССОНА С ПОТЕНЦИАЛОМ В ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ОБЛАСТИ МЕТОДОМ
КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ**

Москва

2022

Содержание

1	Введение	3
2	Математическая постановка задачи	3
3	Разностная схема решения задачи	4
4	Метод решения системы линейных алгебраических уравнений	6
5	Задание практикума	6
6	Краткое описание проделанной работы по созданию MPI программы и гибридной реализации MPI/OpenMP	7
7	Исследование масштабируемости программы на системе Polus	8

1 Введение

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

2 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

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

рассматривается дифференциальное уравнение Пуассона с потенциалом

$$-\Delta u + q(x, y)u = F(x, y), \quad (1)$$

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):

$$u(x, y) = \varphi(x, y); \quad (2)$$

2. условия второго типа (условия Неймана):

$$\left(k \frac{\partial u}{\partial n} \right)(x, y) = \psi(x, y), \quad (3)$$

3. условия третьего типа:

$$\left(k \frac{\partial u}{\partial n} \right)(x, y) + \alpha u(x, y) = \psi(x, y), \quad (4)$$

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 (1) и граничным условиям, определенным вариантом задания, требуется найти.

3 Разностная схема решения задачи

Краевые задачи для уравнения Пуассона с потенциалом (1) 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

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

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

$$[u, v] = \sum_{i=0}^M h_1 \sum_{j=0}^N h_2 \rho_{ij} u_{ij} v_{ij}, \quad \|u\|_E = \sqrt{[u, u]}. \quad (5)$$

Весовая функция $\rho_{ij} = \rho^{(1)}(x_i) \rho^{(2)}(y_j)$, где

$$\rho^{(1)}(x_i) = \begin{cases} 1, & 1 \leq i \leq M-1 \\ 1/2, & i = 0, i = M \end{cases} \quad \rho^{(2)}(y_j) = \begin{cases} 1, & 1 \leq j \leq N-1 \\ 1/2, & j = 0, j = N \end{cases}$$

В методе конечных разностей дифференциальная задача математической физики заменяется конечно-разностной операторной задачей вида

$$Aw = B, \quad (6)$$

где $A : H \rightarrow H$ – оператор, действующий в пространстве сеточных функций, $B \in H$ – известная правая часть. Задача (6) называется разностной схемой. Решение этой задачи считается численным решением исходной дифференциальной задачи.

При построении разностной схемы следует аппроксимировать (приблизительно 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 (1) во всех внутренних точках сетки аппроксимируется разностным уравнением

$$-\Delta_h w_{ij} + q_{ij} w_{ij} = F_{ij}, \quad i = \overline{1, M-1}, \quad j = \overline{1, N-1}, \quad (7)$$

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

$$w_{ij} = \varphi(x_i, y_j). \quad (8)$$

Переменные w_{ij} , заданные равенством (8), исключаются из разностной схемы, а соответствующие узлы $P_{ij}(x_i, y_j)$ – из расчетной сетки $\bar{\omega}_h$. В скалярном произведении (5) слагаемые, отвечающие данным граничным узлам, считаются равными нулю.

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

$$\begin{aligned} (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{Mj} + (q_{Mj} + 2\alpha_R/h_1)w_{Mj} - (bw_{\bar{y}})_{y,Mj} &= F_{Mj} + (2/h_1)\psi_{Mj}, \\ -(2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{1j} + (q_{0j} + 2\alpha_L/h_1)w_{0j} - (bw_{\bar{y}})_{y,0j} &= F_{0j} + (2/h_1)\psi_{0j}, \quad j = \overline{1, N-1}. \end{aligned} \quad (9)$$

На верхней и нижней сторонах соответственно имеем:

$$\begin{aligned} (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{iN} + (q_{iN} + 2\alpha_T/h_2)w_{iN} - (aw_{\bar{x}})_{x,iN} &= F_{iN} + (2/h_2)\psi_{iN}, \\ -(2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{i1} + (q_{i0} + 2\alpha_B/h_2)w_{i0} - (aw_{\bar{x}})_{x,i0} &= F_{i0} + (2/h_2)\psi_{i0}, \quad i = \overline{1, M-1}. \end{aligned} \quad (10)$$

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 (9),(10), если положить равными нулю параметры $\alpha_R, \alpha_L, \alpha_T, \alpha_B$ соответственно.

Сеточных уравнений (7)-(10) недостаточно, чтобы определить разностную схему для задачи с граничными условиями (3),(4). Требуется сеточные уравнения для угловых точек прямоугольника Π . Они имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} -(2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{10} - (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{01} + (q_{00} + 2\alpha_L/h_1 + 2\alpha_B/h_2)w_{00} &= \\ &= F_{00} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{00} \end{aligned} \quad (11)$$

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

$$\begin{aligned} (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{M0} - (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{M1} + (q_{M0} + 2\alpha_R/h_1 + 2\alpha_B/h_2)w_{M0} &= \\ &= F_{M0} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{M0} \end{aligned} \quad (12)$$

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

$$\begin{aligned} (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{MN} + (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{MN} + (q_{MN} + 2\alpha_R/h_1 + 2\alpha_T/h_2)w_{MN} &= \\ &= F_{MN} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{MN} \end{aligned} \quad (13)$$

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

$$\begin{aligned} -(2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{1N} + (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{0N} + (q_{0N} + 2\alpha_L/h_1 + 2\alpha_T/h_2)w_{0N} &= \\ &= F_{0N} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{0N} \end{aligned} \quad (14)$$

4 Метод решения системы линейных алгебраических уравнений

Приближенное решение системы уравнений (6) 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:

$$w_{ij}^{(k+1)} = w_{ij}^{(k)} - \tau_{k+1} r_{ij}^{(k)}, \quad (15)$$

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 (6) можно проводить в других нормах пространства сеточных функций, например, в максимум норме

$$\|w\|_C = \max_{x \in \bar{\omega}_h} |w(x)|. \quad (16)$$

5 Задание практикума

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 выполнить следующий вариант задания:

$$\begin{aligned} u_1(x, y) &= \exp(1 - (x + y)^2), \quad \Pi = [-1, 2] \times [-2, 2], \\ k(x, y) &= 4 + x \\ q_3(x, y) &= (x + y)^2 \\ \gamma_R &- 1 \text{ тип}, \quad \gamma_L - 1 \text{ тип}, \quad \gamma_T - 1 \text{ тип}, \quad \gamma_B - 1 \text{ тип} \end{aligned}$$

6 Краткое описание проделанной работы по созданию MPI программы и гибридной реализации MPI/OpenMP

Расчётная область была разбита с помощью двумерного разбиения на подобласти таким образом, что отношение количества узлов по переменным x и y в каждой подобласти принадлежит диапазону $[1/2, 2]$ (то есть стороны блоков отличаются не более, чем в два раза), и количество узлов по переменным x и y любых двух подобластей отличается не более, чем на единицу. В каждой подобласти была создана своя часть сетки. Далее на этой части сетки в каждой подобласти была посчитана своя часть матрицы коэффициентов и своя часть вектора правых частей. Затем запускается метод минимальных невязок, который работает до того момента, пока евклидова норма разницы решения на текущем и предыдущем шаге не будет меньше $1e - 6$. В ходе работы метода, когда происходит умножение матрицы коэффициентов на вектор решения или вектор невязки, требуются значения этих векторов, которые лежат на границе подобласти, из соседних процессов. Такие значения пересылаются всем соседним процессам. Множество циклов в данной задаче можно распараллелить с помощью OpenMP, так как значения внутри части циклов не зависят друг от друга. Такие циклы были распараллелены с помощью OpenMP.

7 Исследование масштабируемости программы на системе Polus

Таблица 1: Таблица с результатами расчетов на ПВС IBM Polus (MPI)

Число MPI процессов	Число точек сетки $M \times N$	Время решения (с)	Ускорение
4	500×500	273.699	1.000
8	500×500	112.258	2.438
16	500×500	70.962	3.857
32	500×500	39.724	6.890
4	500×1000	354.563	1
8	500×1000	150.536	2.355
16	500×1000	98.143	3.612
32	500×1000	55.705	6.365

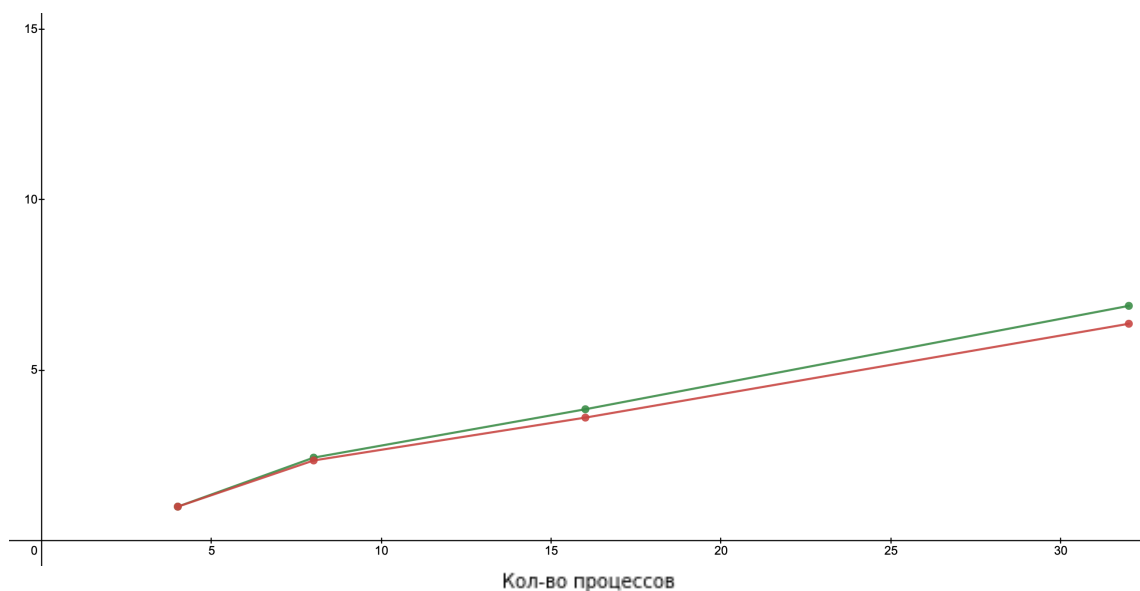


Рис. 1: График зависимости ускорения программы от числа используемых MPI-процессов для каждого размера сетки в MPI программе

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

Число процессов MPI	Количество OMP нитей в процессе	Число точек сетки $M \times N$	Время решения (с)	Ускорение
1	4	500×500	219.247	1.000
2	4	500×500	83.874	2.614
4	4	500×500	57.742	3.797
8	4	500×500	31.605	6.937
1	4	500×1000	309.096	1
2	4	500×1000	131.084	2.358
4	4	500×1000	82.845	3.731
8	4	500×1000	47.133	6.558

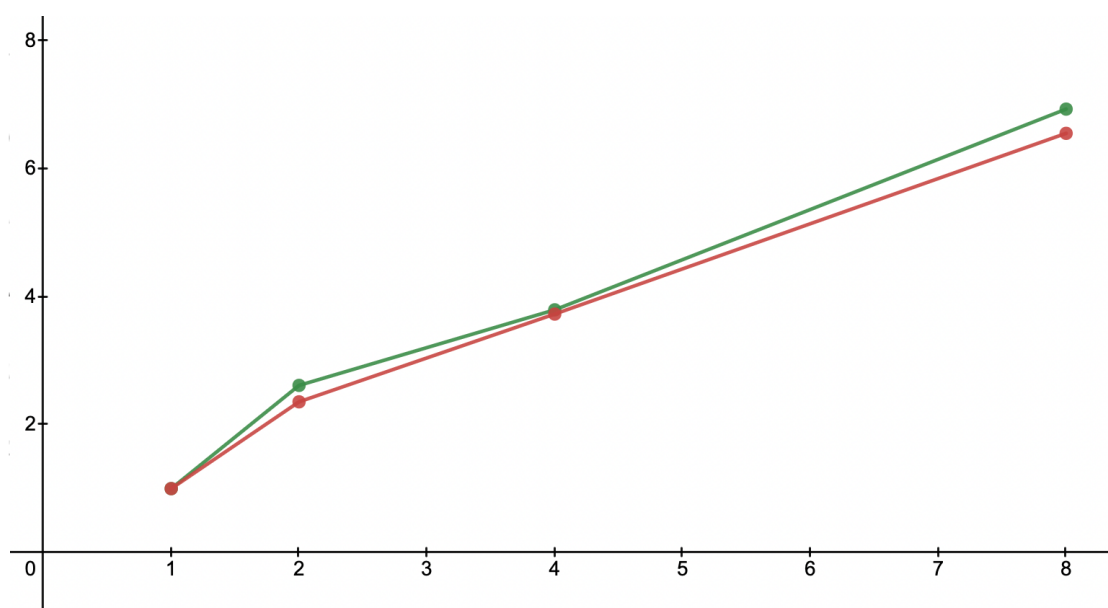


Рис. 2: График зависимости ускорения программы от числа используемых MPI-процессов для каждого размера сетки в MPI + OMP программе для количества OMP нитей в процессе равного 4

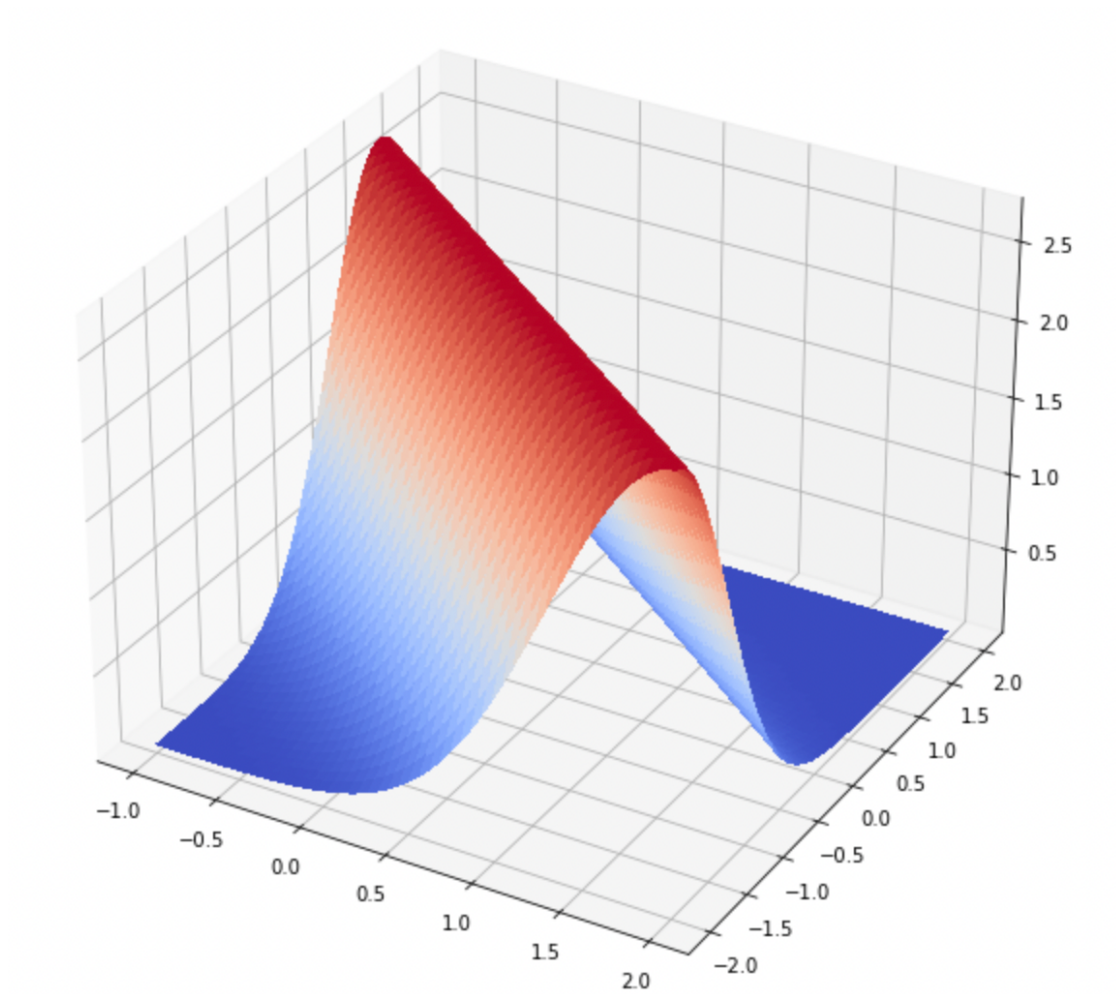


Рис. 3: Визуализация точного решения, полученного на сетке с наибольшим количеством узлов

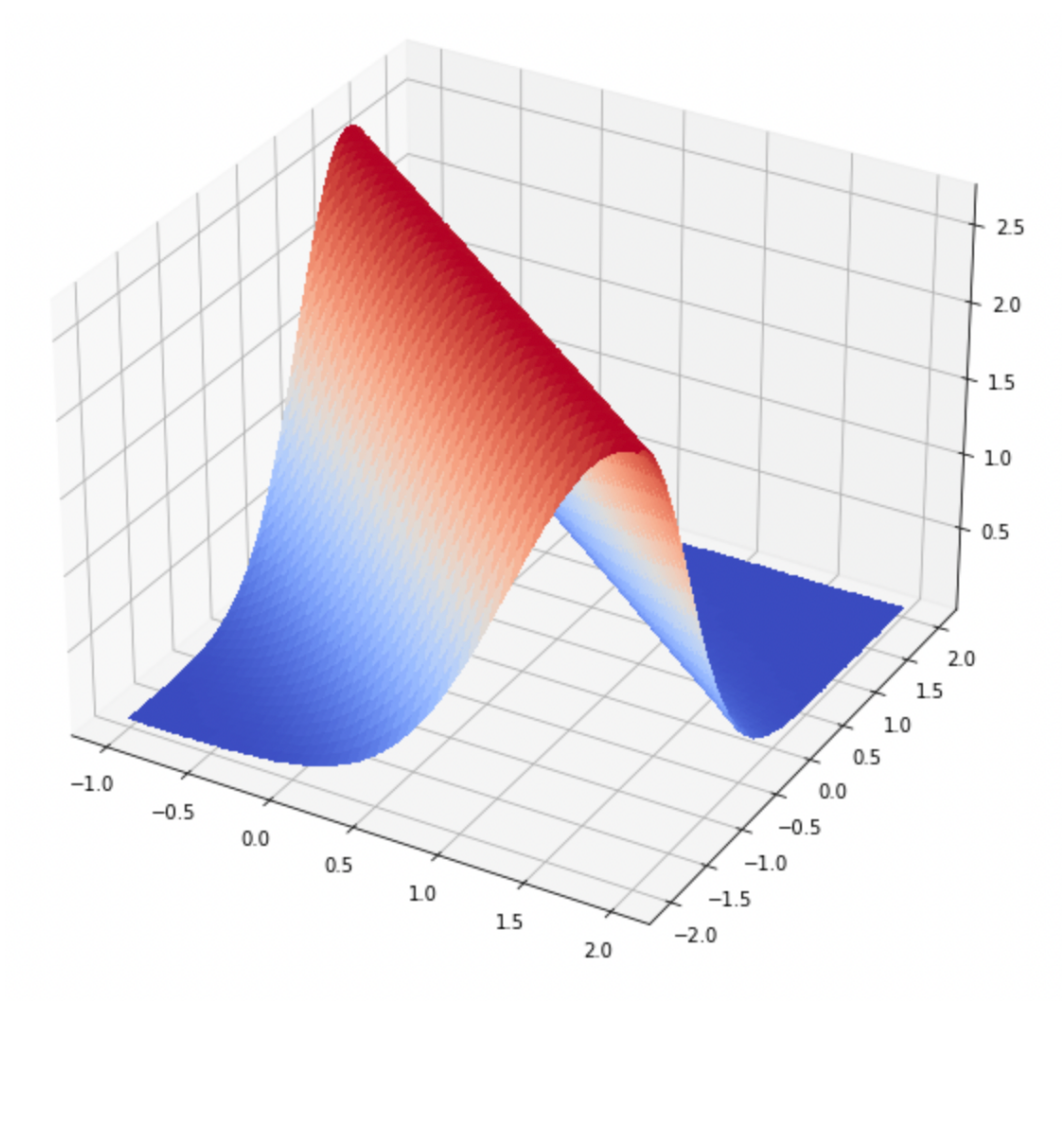


Рис. 4: Визуализация приближенного решения, полученного на сетке с наибольшим количеством узлов