Poisson.h 文档说明

Haochen Huang

西安交通大学 MFM 课题组

版本: 3.02test

日期: 2023年3月22日

目录

1	理论背景	1
1.1	Poisson 方程由来	1
1.2	Relaxation 函数由来	2
1.3	Jacobi 迭代	2
2	具体算法	3
3	源代码解析	4
3.1	源代码构成及结构简介	4
3.2	Multigrid cycle 函数	5
3.3	Multigrid solver 函数	6
3.4	重要计算函数的构建	9
3.5	具体使用示例	13
	参考文献·	14

摘 要

本文为 basilisk 的头文件 Poisson.h 的说明文档。

2.02 更新: 更新模板添加高亮、索引, 更新文章内容, 修正某些显示错误并添加程序结构图及说明。

3.02 更新: 更正 relax 函数中 Jacobi 与 GS 迭代之间的关系,回顾之前相关使用函数指针进行输入的地方,指出改装求解器的可能条件。

1. 理论背景

该离散格式可参见 Basilisk 原作者著作 [1]

1.1 Poisson 方程由来

我们可以由 bcg.h 中的对流方程求出一个速度场 U^{**} ,由于速度物理特性,其必然是光滑且连续的,由 Hodge 分解可得,该速度场可以分为一个无散场与无旋场即:

$$U^{**} = U + \nabla \phi \tag{1}$$

其中 $\nabla U = 0$ 这样U就既满足动量方程又满足不可压方程,为真实速度解。

1.2 Relaxation 函数由来

求解 Poisson 方程

$$\nabla^2 \phi = \nabla U^{**} \tag{2}$$

针对某一个单元, 在单元内部对上式进行体积分有:

$$\int_{\partial \mathscr{B}} \nabla \phi \cdot \mathbf{n} = \int_{\mathscr{B}} \nabla U^{**} \tag{3}$$

在单元上进行离散有:

$$\sum_{d} h \nabla_{d} \phi = h^{2} \nabla \cdot U^{**} \tag{4}$$

其中下角标 d 表示方向,在离散过程中等式左边数据储存于单元面中心,而等式右边则是单元体中心。在 bcg.h 中我们已经利用已知的 u^n 将 U^{**} 计算出来了,现在的目标则是计算 ϕ 。

为了得到 ϕ , 我们假设 ϕ 在单元表面上的梯度值 $\nabla_d \phi$ 可以用在单元中心的 ϕ 线性表示, 即:

$$\nabla_d \phi = \alpha_d \phi + \beta_d \tag{5}$$

其中 α , β 均为常数,其值根据周边网格情况等可以计算出来,暂时按下不表。由此我们可以得到相应 ϕ 值表达式

$$\sum_{d} h \nabla_{d} \phi = \sum_{d} \alpha_{d} \phi + \sum_{d} \beta_{d} \tag{6}$$

即有:

$$\mathscr{R}(\phi, \nabla U^{**}) = \phi \leftarrow \frac{h\nabla \cdot U^{**} - \sum_{d} \beta_d}{\sum_{d} \alpha_d}$$
 (7)

即能够构成 $\mathcal{L}(A) = B$ 的 A, B 都可以满足 Relaxation 函数关系。

1.3 Jacobi 迭代

在构建完 Relaxation 函数后,我们将对其使用 Jacobi 迭代,以完成相应求解。 假设我们有方程组

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{11}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2$$

$$\vdots \quad \vdots$$
(8)

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n$$

不考虑收敛问题,我们将 $\mathbf{x}^0 = x_1^0, x_2^0 \cdots x_n^0$ 依次带入方程求解得到 $\mathbf{x}^1 = x_1^1, x_2^1 \cdots x_n^1$,依次迭代,依据相应理论,在迭代次数足够多的情况下,解最终会收敛于方程真解。

根据之前构建的 Relaxation 函数,由于 ∇U^{**} 已知,我们可以对场量 ϕ 采取类似的迭代方式,最终得到目的解。

Algorithm 1: Poisson solver 框架

Input: 初始 ϕ^0 ,最密网格 M_L

Output: 相应计算区域中全场 ϕ 值

由 ϕ^0 计算再 M_L 上的残差 R_L

while $|\alpha R_L|_{\infty} < \epsilon$ do

for $l = L - 1; l \ge 0; l - - do$

| 由 R_{l+1} 计算 R_l ;

在最低级网格 M_0 上使用 $\mathcal{R}(\delta\phi, R_0)$ 直到最后的值收敛;

for l = 1; l < L; l + + do

将在 M_{l-1} 上获得的 $\delta \phi$ 在空间上进行插值后直接作为初始猜测值进行 $\mathcal{R}(\delta \phi, R_l)$

的 n 次迭代;

将迭代计算出的 $\delta \phi$ 附加在原本 M_L 的 ϕ 值上;

再次计算 R_L ;

return ϕ ;

2. 具体算法

£ 为线性算子即:

$$\mathcal{L}(\phi + \delta\phi) = \mathcal{L}(\phi) + \delta\phi \tag{9}$$

其中 $\mathcal{L}(\phi + \delta \phi) = \nabla U^{**}$ 而 ϕ 为预测值,那么 $\delta \phi$ 就是预测值与真实值之差,令残差 R 为

$$R = \nabla U^{**} - \mathcal{L}(\phi) \tag{10}$$

由此 $\delta\phi$ 与 R 构成了拉普拉斯算对,他们之间的关系就可以用 Relaxation 函数 $\mathscr R$ 来表示。接下来介绍 Basilisk 的自适应网格模式。

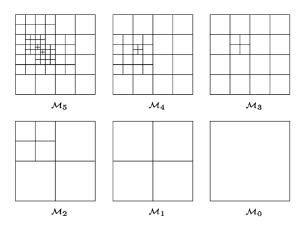


图 1: 二维情况下,同一单元网格级别变化情况,摘自[1]

如图1中所示,其中Ml表示网格加密级别;注意,这是同一个网格的不同加密形式。l层的 残差可以由l+11 计算得出即

$$R_l = \frac{\sum_i h^2 R_{l+1}}{\sum_i h^2} \tag{11}$$

3. 源代码解析

3.1 源代码构成及结构简介

Poisson.h 主要求解的方程为广义的 Poisson-Helmholtz 即:

$$L(a) = \nabla \cdot (\alpha \nabla a) + \lambda a = b \tag{12}$$

源代码一共分为四个部分,分别是:

- 1. Multigrid cycle 函数的构建3.2,此函数表示算法中的第二个 for 循环,即在已知各个级别网格的残差后,通过 $\mathscr R$ 函数进行迭代,并向高一层级网格进行差分,得到该网格 δa 的初始值,该函数并没有 $\mathscr R$ 的定义
- 2. Multigrid solver 函数构建3.3,该函数与 Multigrid cycle 函数一同构成完整的算法循环框架 (Multigrid cycle 将会在其中被引用),该函数负责判断计算域内的最大残差是否满足标准,以及当某些限定情况发生时,对迭代次数进行改变
- 3. 两个重要功能函数的构建3.4: relax 函数即 \mathcal{R} ,以及计算残差的 residual 函数,这两个函数 在之前构建的整体框架中均被引用。
- 4. 整体合并解决问题的示例3.5

其相互关系如下图所示:由图所示,mg solver 为求解器的主体部分,其主要功能在于调配各个

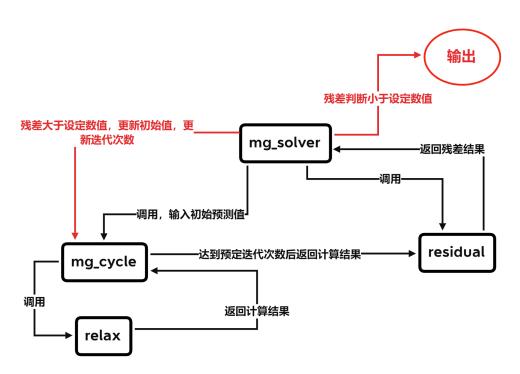


图 2: poisson.h 头文件中主要函数关系

函数的调用顺序,判断是否满足输出标准,以及调整循环的次数,而 mg cycle 与 relax 函数则构成了一次或数次(基于 mg solver 传入参数调控)完整的 G-S 迭代,并更新初始值,并将结果传递至 residual 计算残差,residual 返回残差供 mg solver 进行判断,选择调整参数再次进入循环或者跳出循环输出结果。

3.2 Multigrid cycle 函数

函数输入计算目标指针 a,残差指针 res,修正目标值指针 da,以及 $\mathscr R$ 函数指针 relax 等进行从最低层级向最高层级网格的残差修正。

注意此处输入值中包含函数指针,修改者可以通过传入具有相同参变量的函数达到改装求 解器的目的。

```
void mg_cycle (scalar * a, scalar * res, scalar * da,
            void (* relax) (scalar * da, scalar * res,
                int depth, void * data),
            void * data,
            int nrelax, int minlevel, int maxlevel)
    restriction (res);//将叶网格方程残差值 R 逐步插值至最疏网格
    //从最低的网格密度层级开始对相应的计算区域进行 Jacobi 迭代
    minlevel = min (minlevel, maxlevel);
10
    for (int 1 = minlevel; 1 <= maxlevel; 1++) {</pre>
11
      if (1 == minlevel)
13
        foreach_level_or_leaf(1)//在这里由于我们对网格单元进行稀疏简化,所以并不
14
        → 能直接套用惯常命令 foreach()
          for (scalar s in da)
15
             foreach_blockf (s)//该命令的具体接口并不明确,但可以从解释来看,是由
16
             → 于 Basilisk 针对某种数据存储格式在默认情况下是关闭的,需要该函数
             → 命令对其进行处理
                s[] = 0.;
17
      //在轮到 l 级网格时,由于网格加密导致网格中心位置变动,需要对上一级中求出的
      → da 进行插值,并将其作为本轮 Jacobi 迭代的初始值
      else
19
        foreach_level (1)
20
          for (scalar s in da)
             foreach_blockf (s)
22
                s[] = bilinear (point, s);
23
24
      boundary_level (da, 1);
      for (int i = 0; i < nrelax; i++) {</pre>
26
        relax (da, res, l, data); ^ I//利用 @ 函数进行 Jacobi 迭代, 迭代次数为输
        → 入值 nrelax, 该数值在后面会视情况而改变。
```

```
boundary_level (da, 1);
28
        }
29
      }
31
      foreach() {
32
        scalar s, ds;
33
        for (s, ds in a, da)
34
          foreach_blockf (s)
35
            s[] += ds[];//更新最密网格中的目标数值 a
36
     }
37
   }
38
```

由此,算法中的 Jacobi 迭代进行完毕。

3.3 Multigrid solver 函数

该函数通过在其中通过引用 Multigrid cycle 构建完整的算法结构,其首先定义两种数据结构,首先是表示整个计算域状态的数据结构 *mgstats*:

以及所需要求解目标函数的数据结构:

```
struct MGSolve {

scalar * a, * b;

double (* residual) (scalar * a, scalar * b, scalar * res,

void * data);// 求解残差的函数, 在下一节会出现

void (* relax) (scalar * da, scalar * res, int depth,

void * data);

void * data;// 该参数的具体细节将在下一节展示
```

```
int nrelax;
scalar * res;
int minlevel;
double tolerance;
};
```

我们构成的函数 mg_solve 返回值的数据类型为 mgstats 即循环状态,输入值则为 mg_solve 型数据 p

```
mgstats mg_solve (struct MGSolve p)
   {
2
     //根据输入数据格式的 a 分配修正数据的指针,即保证 da 与其有相同的分布与边界条件
3
     scalar * da = list_clone (p.a), * res = p.res;
     if (!res)
       res = list_clone (p.b);
     The boundary conditions for the correction fields are the
     *homogeneous* equivalent of the boundary conditions applied to
10
     *a*. */
12
     for (int b = 0; b < nboundary; b++)</pre>
13
       for (scalar s in da)
14
         s.boundary[b] = s.boundary_homogeneous[b];
15
16
     // s 即为要返回的 mgstats 型数据, 先对其进行初始化
17
     mgstats s = \{0\};
18
     double sum = 0.;
19
     foreach (reduction(+:sum))
20
       for (scalar s in p.b)
21
         sum += s[];
22
     s.sum = sum; //对等式右端 (r.h.s.) 进行赋值
23
     s.nrelax = p.nrelax > 0 ? p.nrelax : 4; //默认的 <math>\mathcal{R} 迭代次数为 4, 如果自带则使
24
        用自带参数
25
     //使用 residual 函数计算该计算域内最大残差并赋值
26
     double resb;
27
     resb = s.resb = s.resa = p.residual (p.a, p.b, res, p.data);
28
```

```
//设定残差判定的默认值
30
     if (p.tolerance == 0.)
31
       p.tolerance = TOLERANCE;
32
     //开始进入算法中的 while 循环
34
     for (s.i = 0;
35
         s.i < NITERMAX && (s.i < NITERMIN || s.resa > p.tolerance);
36
37
       //引用 mg cycle 函数, 开始进入 Jacobi 迭代循环
38
       mg_cycle (p.a, res, da, p.relax, p.data,
39
            s.nrelax,
40
            p.minlevel,
41
            grid->maxdepth);
42
43
       //再次计算残差, 用于判断
       s.resa = p.residual (p.a, p.b, res, p.data);
45
46
   //进入对 Jacobi 迭代次数的调整
47
   #if 1
48
       if (s.resa > p.tolerance) {
49
         if (resb/s.resa < 1.2 && s.nrelax < 100)//如果在经历迭代后的残差 R_a 与迭
         → 代前的残差 R_b 之比小于 1.2, 则扩大迭代次数
       s.nrelax++;
         else if (resb/s.resa > 10 && s.nrelax > 2)//如果残差收敛效果好,则适当减
52
         → 少迭代次数,加速计算
       s.nrelax--;
53
       }
   #else
55
       if (s.resa == resb) /* convergence has stopped!! */
56
57
       if (s.resa > resb/1.1 && p.minlevel < grid->maxdepth)
         p.minlevel++;//如果迭代效果不理想,且网格密度大于迭代过程中的最小网格级别,
59
         → 则抬高该级别
   #endif
60
61
       resb = s.resa;
62
```

```
}//while 循环终止处
     s.minlevel = p.minlevel;
64
     /**
66
     If we have not satisfied the tolerance, we warn the user. */
     if (s.resa > p.tolerance) {
69
       scalar v = p.a[0];
70
       fprintf (ferr,
71
            "WARNING: convergence for %s not reached after %d iterations\n"
72
            " res: %g sum: %g nrelax: %d\n", v.name,
73
            s.i, s.resa, s.sum, s.nrelax), fflush (ferr);
74
     }//在数次循环后依旧无法满足判定标准,而是达到最大循环次数才实现跳脱循环,则需要
75
        向标准输出端发出警告。
76
     /**
     We deallocate the residual and correction fields and free the lists. */
78
     //清除栈
79
     if (!p.res)
80
       delete (res), free (res);
     delete (da), free (da);
82
     return s;
84
   }
```

3.4 重要计算函数的构建

我们在之前两节中完整的构建了算法循环,本节我们来解析其中最重要的两个函数, relax 与 residual。首先讲解 relax 函数。

relax 函数的目的是根据输入的数据对位于 (i,j) 上的 a 进行计算,对12进行离散有:

$$\frac{\alpha_{i+\frac{1}{2},j} \frac{a_{i+1,j} - a_{i,j}}{\Delta} - \alpha_{i-\frac{1}{2},j} \frac{a_{i,j} - a_{i-1,j}}{\Delta}}{\Delta} + \frac{\alpha_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{a_{i,j+1} - a_{i,j}}{\Delta} - \alpha_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{a_{i,j} - a_{i,j-1}}{\Delta}}{\Delta} + \lambda a_{i,j} - \gamma = b \quad (13)$$

$$a_{i,j}^{n+1} = \frac{\alpha_{i+\frac{1}{2},j}a_{i+1,j} + \alpha_{i-\frac{1}{2},j}a_{i-1,j} + \alpha_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}a_{i,j+1} + \alpha_{i,j-\frac{1}{2}}a_{i,j-1} - b\Delta^2 - \gamma\Delta^2}{\alpha_{i+\frac{1}{2},j} + \alpha_{i-\frac{1}{2},j} + \alpha_{i,j+\frac{1}{2}} + \alpha_{i,j-\frac{1}{2}} - \lambda\Delta^2}$$
(14)

可以看到在 2 维情况下我们使用五点插值计算当地的 a 值,由此可以进行迭代。需要强调的是,该离散方程也满足 da, R。

此处另一个值得注意的细节为迭代方式的选取,若无提前指定,函数迭代模式为 Gauss-Seidel 迭代,反之则为 Jacobi 形式的松弛因子迭代。具体实现方式为,设定中间变量 c ,当没

有提前声明时 c 会直接指向输入场 a,由此 (14) 中右侧的部分数值会随着遍历的顺序变为 n+1 次循环值; 而当进行 Jacobi 时 c 会成为新定义的 scalar 型数据, 计算的结果会首先储存在其中, 待计算完成后统一更新, 从而保证了 (14) 左端为第 n 次的循环值。

```
struct Poisson {
    scalar a, b;
    (const) face vector alpha;
    (const) scalar lambda;
    double tolerance;
    int nrelax, minlevel;
    scalar * res;

#if EMBED
    double (* embed_flux) (Point, scalar, vector, double *);

#endif
};
```

此数据类型即在前文中出现过的 data 数据类型,对方程12中的重要参数 λ, α 做了详尽定义

```
static void relax (scalar * al, scalar * bl, int l, void * data)
2
     scalar a = al[0], b = bl[0];//需要注意的是, relax 函数给了别的 a,b 的接口, 而
     → 并非直接从 data 型数据中提取,在正式的算法中,这两值分别为修正值 da 以及残

→ 差 R

     struct Poisson * p = (struct Poisson *) data;
     (const) face vector alpha = p->alpha;
     (const) scalar lambda = p->lambda;
     //此为迭代模式的选择, 当选择 JACOBI 后, 对 a 的迭代会变为 \frac{1}{3}a + \frac{2}{3}c, 而如果并不选
     → 择该模式,则会直接用新计算出来的数值取代
   #if JACOBI
     scalar c[];
9
   #else
10
     scalar c = a;
11
   #endif
12
13
     /**
14
     We use the face values of \alpha to weight the gradients of the
15
     5-points Laplacian operator. We get the relaxation function. */
16
17
     foreach_level_or_leaf (1) {
```

```
double n = - sq(Delta)*b[], d = - lambda[]*sq(Delta);
19
        foreach_dimension() {
20
          n += alpha.x[1]*a[1] + alpha.x[]*a[-1];
          d += alpha.x[1] + alpha.x[];//此为实现上文公式中的离散格式
22
        }
23
    #if EMBED
24
        if (p->embed_flux) {
25
          double c, e = p->embed_flux (point, a, alpha, &c);
26
          n -= c*sq(Delta);
27
          d += e*sq(Delta);
28
        }
29
        if (!d)
30
          c[] = b[] = 0.;
31
        else
32
    #endif // EMBED
33
          c[] = n/d;//计算该迭代层的 da
      }
35
36
      /**
37
      For weighted Jacobi we under-relax with a weight of 2/3. */
39
    #if JACOBI
40
      foreach_level_or_leaf (1)
41
        a[] = (a[] + 2.*c[])/3.;
42
    #endif
43
44
    #if TRASH
45
      scalar a1[];
46
      foreach_level_or_leaf (1)
47
        a1[] = a[];
48
     trash ({a});
49
      foreach_level_or_leaf (1)
50
        a[] = a1[];
51
    #endif
52
   }
53
```

接下来则是 residual 函数, 其目的是求解给定值的残差 R, 即:

$$R = \mathcal{L}(\delta a) = b - \mathcal{L}(a) = b - \lambda a - \nabla \cdot (\alpha \nabla a)$$
(15)

输入值即为上式中的b,a, 具体代码如下:

```
static double residual (scalar * al, scalar * bl, scalar * resl, void * data)
     {
        scalar a = al[0], b = bl[0], res = resl[0];
        struct Poisson * p = (struct Poisson *) data;
        (const) face vector alpha = p->alpha;
        (const) scalar lambda = p->lambda;
        double maxres = 0.;
     #if TREE
        //此为 2 阶精度, 其离散格式为
        \leftrightarrow \quad \frac{(\alpha_{i+\frac{1}{2},j}-\alpha_{i-\frac{1}{2},j})^{\frac{a_{i,j}-a_{i-1,j}}{\Delta}}}{\Lambda} + \frac{(\alpha_{i,j+\frac{1}{2}}-\alpha_{i,j-\frac{1}{2}})\Delta^{\frac{a_{i,j}-a_{i,j-1}}{\Delta}}}{\Lambda} + \lambda a_{i,j} - \gamma = b
        face vector g[];
10
        foreach_face()
           g.x[] = alpha.x[]*face_gradient_x (a, 0);
12
        foreach (reduction(max:maxres), nowarning) {
           res[] = b[] - lambda[]*a[];
14
           foreach_dimension()
15
             res[] -= (g.x[1] - g.x[])/Delta;
16
     #if EMBED
           if (p->embed_flux) {
18
             double c, e = p->embed_flux (point, a, alpha, &c);
19
             res[] += c - e*a[];
20
           }
21
     #endif // EMBED
22
           if (fabs (res[]) > maxres)
23
             maxres = fabs (res[]);
        }
25
     #else // !TREE
26
        /* "naive" discretisation (only 1st order on trees) */
27
        //此为一阶精度格式,离散格式为
28
             \frac{\alpha_{i+\frac{1}{2},j}\frac{a_{i+1,j}-a_{i,j}}{\Delta}-\alpha_{i-\frac{1}{2},j}\frac{a_{i,j}-a_{i-1,j}}{\Delta}}{\Lambda}+\frac{\alpha_{i,j+\frac{1}{2}}\frac{a_{i,j+1}-a_{i,j}}{\Delta}-\alpha_{i,j-\frac{1}{2}}\frac{a_{i,j}-a_{i,j-1}}{\Delta}}{\Lambda}+\lambda a_{i,j}-\gamma=b
        foreach (reduction(max:maxres), nowarning) {
29
           res[] = b[] - lambda[]*a[];
          foreach dimension()
31
             res[] += (alpha.x[0]*face_gradient_x (a, 0) -
32
                alpha.x[1]*face_gradient_x (a, 1))/Delta;
33
```

```
#if EMBED
34
        if (p->embed_flux) {
35
          double c, e = p->embed_flux (point, a, alpha, &c);
36
          res[] += c - e*a[];
37
        }
38
    #endif // EMBED
39
        if (fabs (res[]) > maxres)
40
          maxres = fabs (res[]);//选取计算域中最大的残差返回
41
     }
42
    #endif // !TREE
43
     return maxres;
44
   }
45
```

3.5 具体使用示例

最终提供一个能够被广泛运用的函数调用模板,求解的方程为

$$\nabla \cdot (\alpha \nabla a) + \lambda a = b \tag{16}$$

模板函数返回值类型为 mgstats,输入值类型为 structPoisson,调用 mg cycle, mg solve 等函数

```
mgstats poisson (struct Poisson p)
   {
     //如果 \alpha,\lambda 没有设置,则默认其为单位场
3
     if (!p.alpha.x.i)
       p.alpha = unityf;
     if (!p.lambda.i)
       p.lambda = zeroc;
     //将这两个参数赋值到每一层级网格中
     face vector alpha = p.alpha;
10
     scalar lambda = p.lambda;
11
     restriction ({alpha,lambda});
12
13
     //设置残差容忍,该常数是跳出循环的判定参数,如果没有设置,则使用默认参数值
14
15
     double defaultol = TOLERANCE;
16
     if (p.tolerance)
17
       TOLERANCE = p.tolerance;
18
```

```
19
     scalar a = p.a, b = p.b;
20
   #if EMBED
21
     if (!p.embed_flux && a.boundary[embed] != symmetry)
22
       p.embed_flux = embed_flux;
23
   #endif // EMBED
24
     mgstats s = mg_solve ({a}, {b}, residual, relax,
25
                &p, p.nrelax, p.res, minlevel = max(1, p.minlevel));//注释: 多重网
26
                → 格法中将残差值插值到最小网格层 minlevel, 默认 minlevel=1
27
     /**
28
     We restore the default. */
29
30
     if (p.tolerance)
31
       TOLERANCE = defaultol;
32
33
     return s;
34
   }
35
```

参考文献

[1] Stéphane Popinet. "Gerris: a tree-based adaptive solver for the incompressible Euler equations in complex geometries". In: *Journal of computational physics* 190.2 (2003), pp. 572–600.