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

Павлишин Кирилл Юрьевич
608 группа
9 вариант

Приближенное решение краевой задачи для уравнения Пуассона с потенциалом в прямоугольной области методом конечных разностей

Москва
2022

1 Введение

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.

2 Математическая постановка задачи

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

$$\gamma_R = \{(A_2, y), B_1 \leqslant y \leqslant B_2\}, \quad \gamma_L = \{(A_1, y), B_1 \leqslant y \leqslant B_2\},$$
$$\gamma_T = \{(x, B_2), A_1 \leqslant x \leqslant A_2\}, \quad \gamma_B = \{(x, B_1), A_1 \leqslant x \leqslant A_2\},$$

рассматривается дифференциальное уравнение Пуассона с потенциалом

$$-\Delta u + q(x, y)u = F(x, y), \tag{1}$$

в котором оператор Лапласа

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

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):

$$u(x, y) = \varphi(x, y); \tag{2}$$

2. условия второго типа (условия Неймана):

$$\Big(k\,\frac{\partial u}{\partial n}\Big)(x, y) = \psi(x, y), \tag{3}$$

3. условия третьего типа:

$$\Big(k\,\frac{\partial u}{\partial n}\Big)(x, y) + \alpha u(x, y) = \psi(x, y), \tag{4}$$

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 $\alpha \geqslant 0$ считаются известными, функцию $u(x, y)$, удовлетворяющую уравнению (1) 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.

3 Разностная схема решения задачи

Краевые задачи для уравнения Пуассона с потенциалом (1) предлагается численно решать методом конечных разностей. В расчетной области П 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 Г.

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

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

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

$$\rho^{(1)}(x_i) = \left[\begin{array}{rl} 1, & 1 \leqslant i \leqslant M-1 \\ 1/2, & i = 0,\ i = M \end{array}\right. \qquad \rho^{(2)}(y_j) = \left[\begin{array}{rl} 1, & 1 \leqslant j \leqslant N-1 \\ 1/2, & j = 0,\ j = N \end{array}\right.$$

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

$$Aw \ = \ B, \tag{6}$$

где $A : H \to H$ – 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 (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 (1) во всех внутренних точках сетки аппроксимируется разностным уравнением

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

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

$$\Delta_h w_{ij} = \frac{1}{h_1}\Big(k(x_i + 0.5h_1, y_j)\frac{w_{i+1j} - w_{ij}}{h_1} - k(x_i - 0.5h_1, y_j)\frac{w_{ij} - w_{i-1j}}{h_1}\Big) +$$
$$+ \frac{1}{h_2}\Big(k(x_i, y_j + 0.5h_2)\frac{w_{ij+1} - w_{ij}}{h_2} - k(x_i, y_j - 0.5h_2)\frac{w_{ij} - w_{ij-1}}{h_2}\Big).$$

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

$$w_{x,ij} = \frac{w_{i+1j} - w_{ij}}{h_1}, \quad w_{\overline{x},ij} = w_{x,i-1j} = \frac{w_{ij} - w_{i-1j}}{h_1},$$
$$w_{y,ij} = \frac{w_{ij+1} - w_{ij}}{h_2}, \quad w_{\overline{y},ij} = w_{y,ij-1} = \frac{w_{ij} - w_{ij-1}}{h_2},$$

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

$$\Delta_h w_{ij} = \left(a w_{\overline{x}}\right)_{x,ij} + \left(b w_{\overline{y}}\right)_{y,ij} \ .$$

Краевые условия первого типа аппроксимируются точно равенством

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

Переменные w_{ij}, заданные равенством (8), исключаются из разностной схемы, а соответствующие узлы $P_{ij}(x_i, y_j)$ – из расчетной сетки $\overline{\omega}_h$. 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:

$$\begin{gathered}(2/h_1)(a w_{\overline{x}})_{Mj} + \left(q_{Mj} + 2\alpha_R/h_1\right) w_{Mj} - \left(b w_{\overline{y}}\right)_{y,Mj} = F_{Mj} + (2/h_1)\psi_{Mj}, \\ -(2/h_1)(a w_{\overline{x}})_{1j} + \left(q_{0j} + 2\alpha_L/h_1\right) w_{0j} - \left(b w_{\overline{y}}\right)_{y,0j} = F_{0j} + (2/h_1)\psi_{0j}, \ j = \overline{1, N-1}.\end{gathered} \tag{9}$$

На верхней и нижней сторонах соответственно имеем:

$$\begin{gathered}(2/h_2)(b w_{\overline{y}})_{iN} + \left(q_{iN} + 2\alpha_T/h_2\right) w_{iN} - \left(a w_{\overline{x}}\right)_{x,iN} = F_{iN} + (2/h_2)\psi_{iN}, \\ -(2/h_2)(b w_{\overline{y}})_{i1} + \left(q_{i0} + 2\alpha_B/h_2\right) w_{i0} - \left(a w_{\overline{x}}\right)_{x,i0} = F_{i0} + (2/h_2)\psi_{i0}, \ i = \overline{1, M-1}.\end{gathered} \tag{10}$$

Здесь α_R, α_L, α_T, α_B – параметры в граничных условиях третьего типа, которые мы будем считать неизменными вдоль отрезков γ_R, γ_L, γ_T, γ_B соответственно.

Аппроксимация граничных условий второго типа на правой, левой, верхней, нижней сторонах прямоугольника П получается из равенств (9),(10), если положить равными нулю параметры α_R, α_L, α_T, α_B соответственно.

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

$$\begin{aligned}-(2/h_1)(a w_{\overline{x}})_{10} - (2/h_2)(b w_{\overline{y}})_{01} + \left(q_{00} + 2\alpha_L/h_1 + 2\alpha_B/h_2\right) w_{00} = \\ = F_{00} + \left(2/h_1 + 2/h_2\right)\psi_{00}\end{aligned} \tag{11}$$

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

$$\begin{aligned}(2/h_1)(a w_{\overline{x}})_{M0} - (2/h_2)(b w_{\overline{y}})_{M1} + \left(q_{M0} + 2\alpha_R/h_1 + 2\alpha_B/h_2\right) w_{M0} = \\ = F_{M0} + \left(2/h_1 + 2/h_2\right)\psi_{M0}\end{aligned} \tag{12}$$

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

$$\begin{aligned}(2/h_1)(a w_{\overline{x}})_{MN} + (2/h_2)(b w_{\overline{y}})_{MN} + \left(q_{MN} + 2\alpha_R/h_1 + 2\alpha_T/h_2\right) w_{MN} = \\ = F_{MN} + \left(2/h_1 + 2/h_2\right)\psi_{MN}\end{aligned} \tag{13}$$

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

$$\begin{aligned}-(2/h_1)(a w_{\overline{x}})_{1N} + (2/h_2)(b w_{\overline{y}})_{0N} + \left(q_{0N} + 2\alpha_L/h_1 + 2\alpha_T/h_2\right) w_{0N} = \\ = F_{0N} + \left(2/h_1 + 2/h_2\right)\psi_{0N}\end{aligned} \tag{14}$$

– 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

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

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 $w^{(k)} \in H$, $k = 1, 2, \ldots$, сходящуюся по норме пространства H к решению разностной схемы, т.е.

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

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:

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

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

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

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

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

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(5) задания:

$$u(x, y) = 2/(1 + x^2 + y^2),\ \Pi = [-2, 3] \times [-1, 4]$$
$$k(x, y) = 4 + x$$
$$q(x, y) = 1$$
$$\gamma_R - 3\,\text{тип},\ \gamma_L - 3\,\text{тип},\ \gamma_T - 3\,\text{тип},\ \gamma_B - 1\,\text{тип}$$

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

Расчётная область была разбита на двумерные подобласти таким образом, чтобы соотношение количества узлов по переменным x и y находилось в промежутке [1/2, 2] в каждой подобласти и количество узлов по переменным x и y любых двух подобластей отличается не более, чем на единицу. Таким образом, на каждую подобласть приходится своя часть сетки.

Далее, в каждой из них заполняется своя часть матрицы коэффициентов и правой части, производится вычисление метода минимальных невязок. Для подсчёта осуществляется поиск соседей каждого процесса по 4 направлениям и перессылки необходимых значений вектора для расчёта на границах процессов.

С помощью OMP параллелятся внутренние циклы расчёта на каждом процессе, поскольку они являются независимыми друг от друга.

7 Исследование мастшабируемости программы на системе Polus

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

Число процессов MPI	**Число точек сетки** $M \times N$	**Время решения (с)**	**Ускорение**
4	500×500	208.347	1
8	500×500	112.623	1.8499
16	500×500	63.952	3.2578
32	500×500	32.487	6.4132
4	500×1000	315.284	1
8	500×1000	181.475	1.7373
16	500×1000	95.602	3.2978
32	500×1000	49.196	6.4087

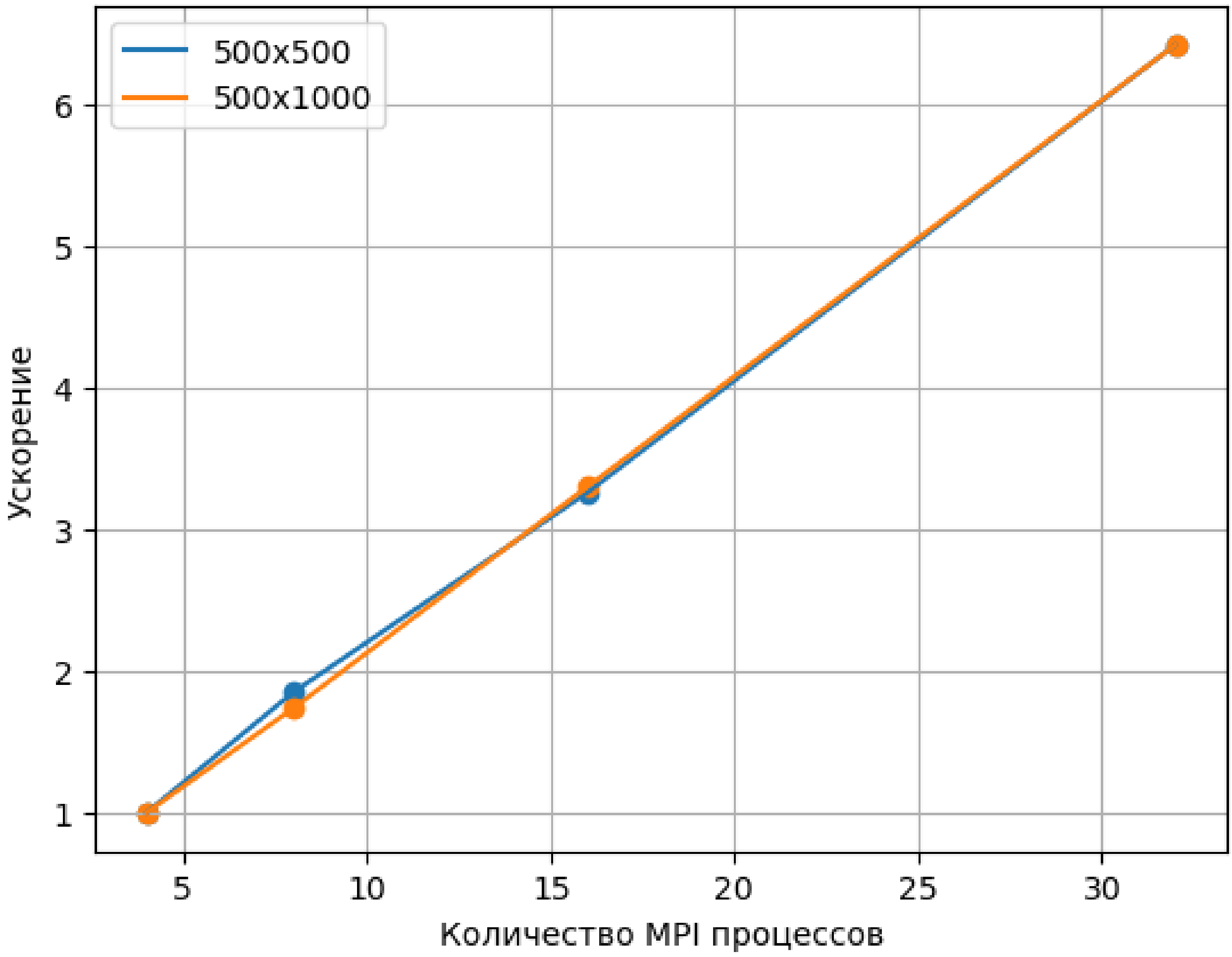

Рис. 1: Зависимость ускорения программы
от числа используемых MPI-процессов
для каждого размера сетки
в MPI программе

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	413.285	1
2	4	500×500	221.374	1.8669
4	4	500×500	115.692	3.5722
8	4	500×500	62.313	6.6324
1	4	500×1000	607.064	1
2	4	500×1000	371.853	1.6325
4	4	500×1000	179.461	3.3827
8	4	500×1000	97.701	6.2134

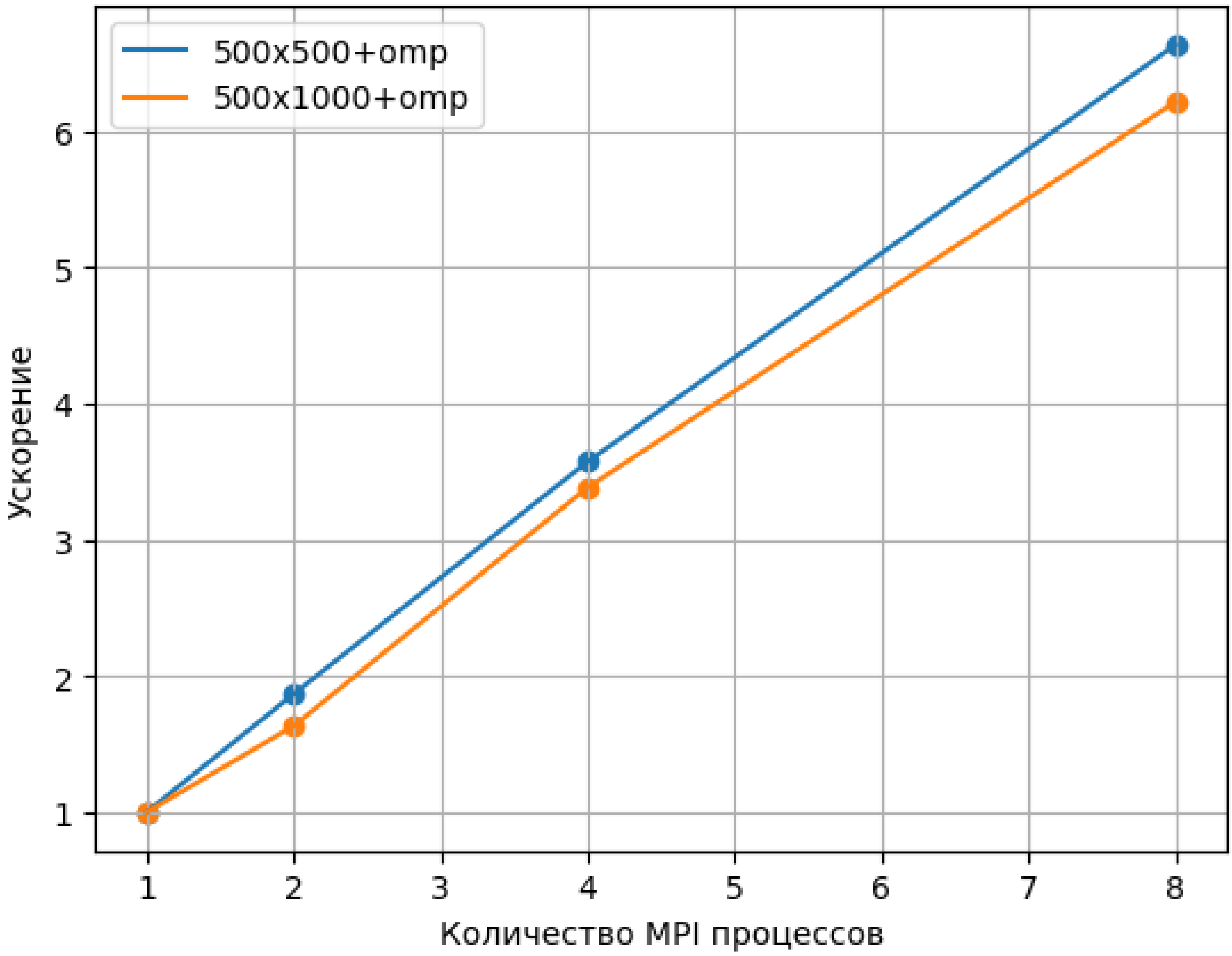

Рис. 2: Зависимость ускорения программы
от числа используемых MPI-процессов
для каждого размера сетки в MPI + OMP программе
для количества OMP нитей в процессе равного 4

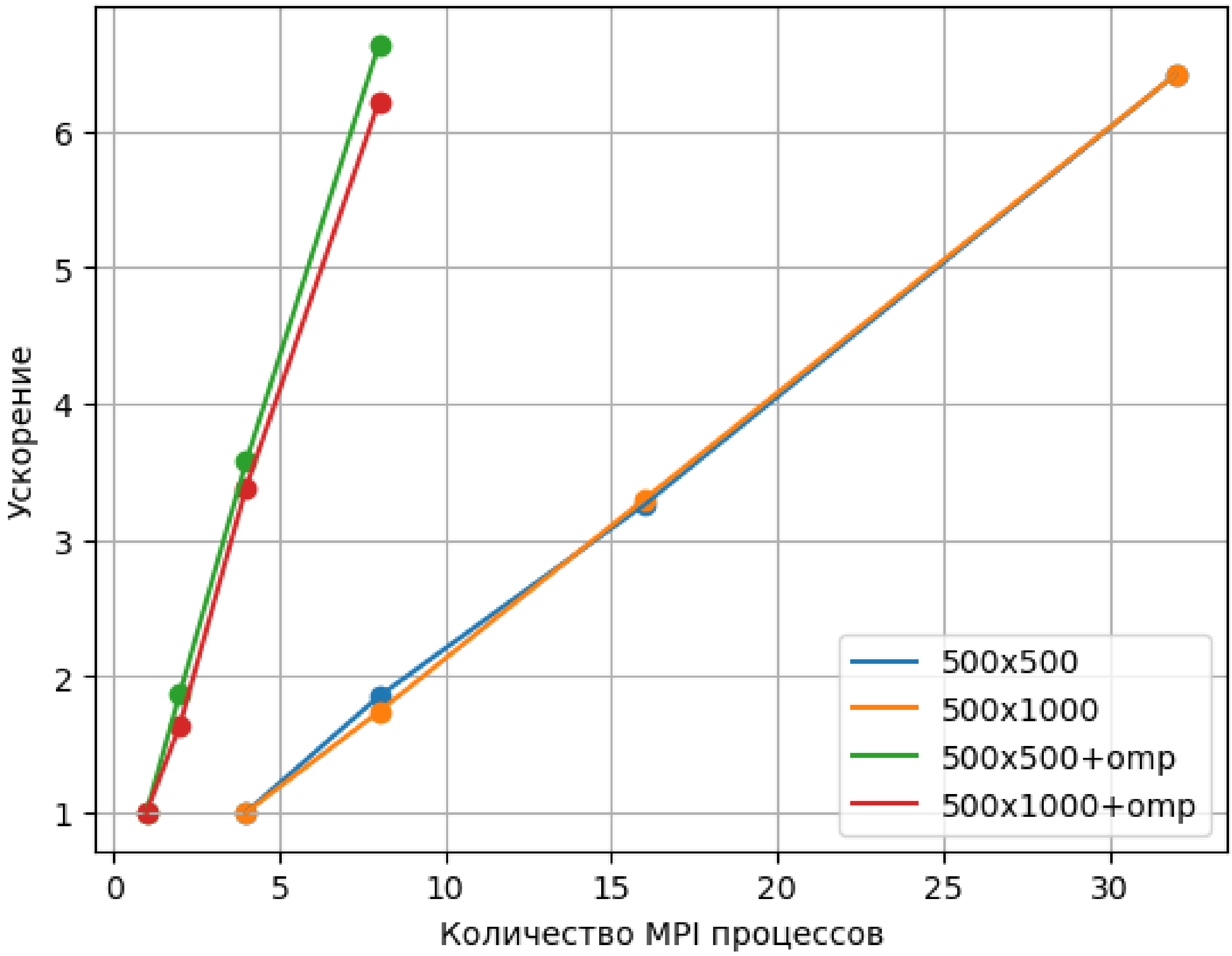

Рис. 3: Сравнительный график зависимости ускорения программы
от числа используемых MPI-процессов
для каждого размера сетки в MPI и MPI + OMP программе
для количества OMP нитей в процессе равного 4

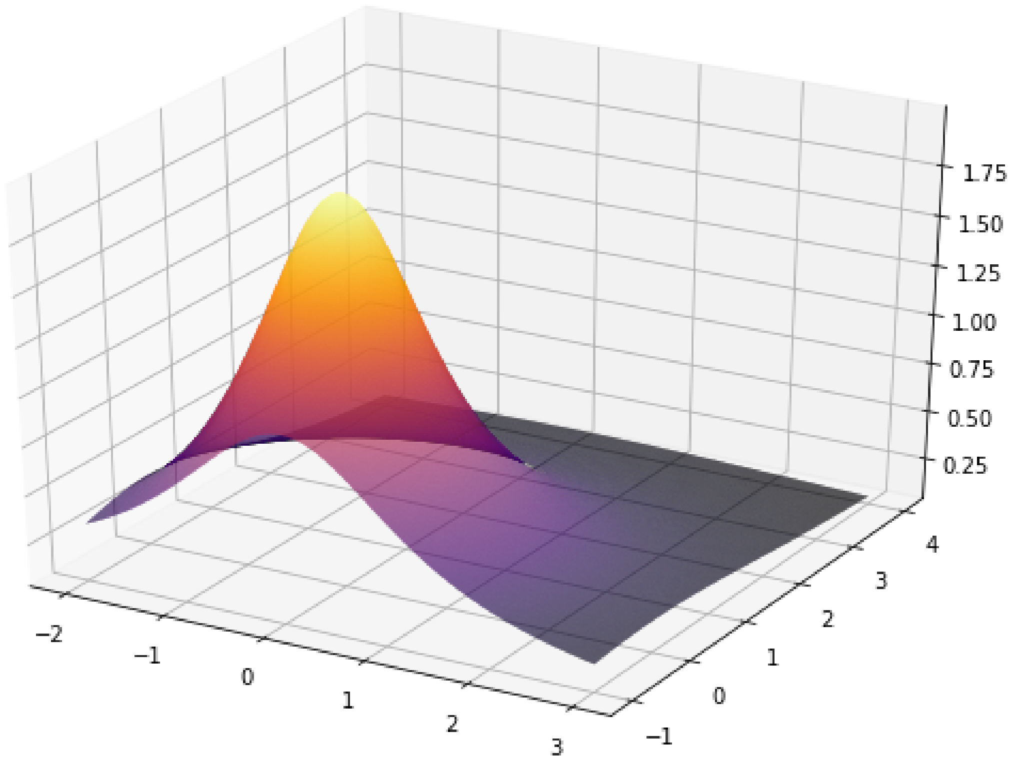

Рис. 4: Приближенное решение на сетке с наибольшим количеством узлов

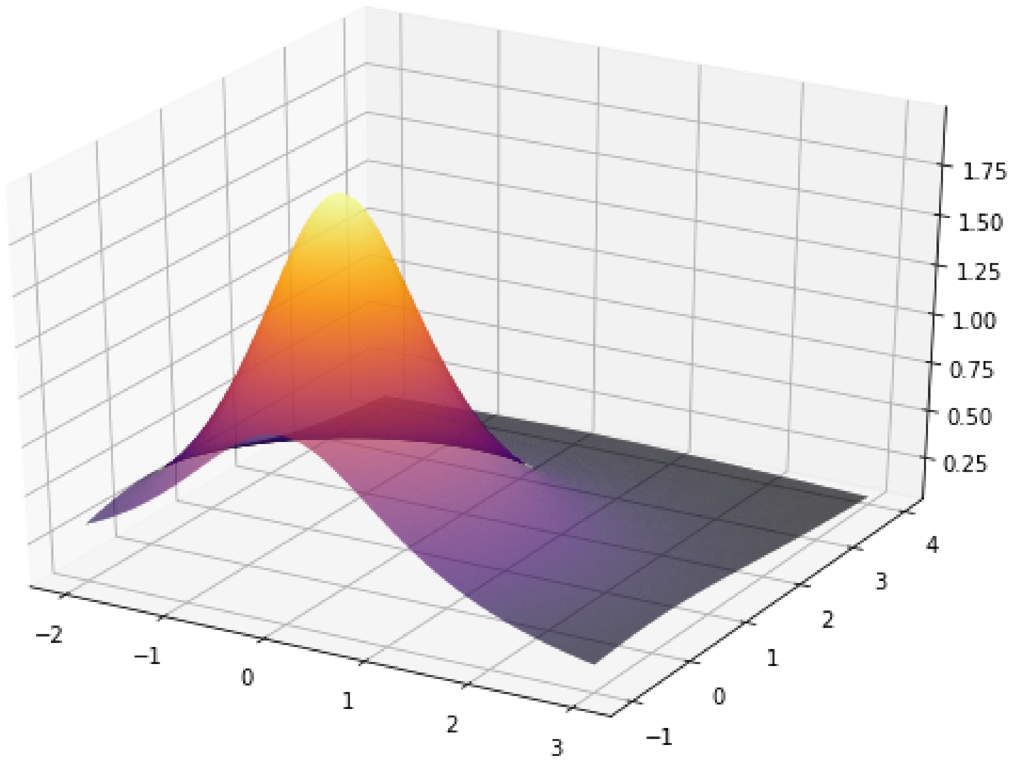

Рис. 5: Точное решение на сетке с наибольшим количеством узлов