Лекция 14. Решение многомерных уравнений в частных производных общего вида.

1. Постановки модельных задач.

$$Lu \equiv \sum_{\alpha=1}^{m} \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(\sum_{\beta=1}^{m}\left(k_{\alpha\beta}\frac{\partial u}{\partial x_\beta} + r_{0,\alpha\beta}u\right)\right) + \sum_{\alpha=1}^{m}\left(r_{1,\alpha}\frac{\partial u}{\partial x_\alpha}\right) - qu = -f\,, \quad \vec{x} \in D\,, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial^k u}{\partial t^k} = Lu + f \quad \left(k = 0,1,2\right), \quad \vec{x} \in D\,, \quad t > 0\,, \qquad (2)$$

Начальные условия:

$$u\,|_{t=0} = u_0\left(\vec{x}\right), \quad \vec{x} \in D. \qquad (3)$$

$$u\,|_{t=0} = u_0\left(\vec{x}\right), \quad \left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_{t=0} = u_1\left(\vec{x}\right), \quad \vec{x} \in D. \qquad (3')$$

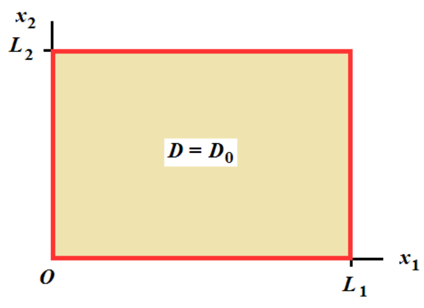
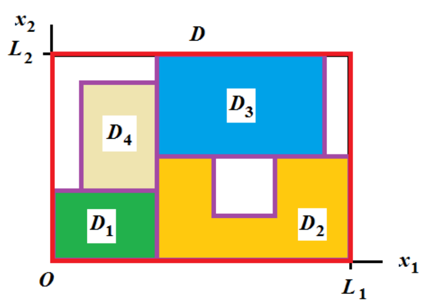
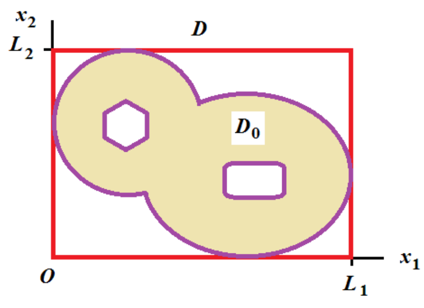
Варианты граничных условий:

1) условия Дирихле: $u = g$, $\vec{x} \in \partial D$;
2) условия Неймана: $\partial u / \partial n = 0$, $\vec{x} \in \partial D$;
3) условия третьего рода: $\partial u / \partial n = -\eta u$, $\vec{x} \in \partial D$;
4) условия смешанного типа: $g_1 u + g_2 \partial u / \partial n = g_3$, $\vec{x} \in \partial D$;
5) периодические условия;
6) интегральные условия.

Проблема решения задачи Неймана в стационарном случае.
Координаты: декартовы, цилиндрические, сферические, обобщенные.
Варианты задачи: линейная, квазилинейная, нелинейная.

2. Численные методы

Любой численный алгоритм существенно зависит от формы области, в которой решается задача.

<table>
<tr>
<td>
</td>
<td>
</td>
<td>
</td>
</tr>
<tr>
<td>Прямоугольная область</td>
<td>Область, составленная из прямоугольников</td>
<td>Область произвольной криволинейной формы</td>
</tr>
</table>

1) Численные методы в случае прямоугольной области:

Сеточные методы: метод конечных разностей (МКР) и метод конечных элементов (МКЭ).

$$\Lambda_h y_h = -\varphi_h\,, \quad \Lambda_h y_h \equiv \sum_{\alpha=1}^{m}\Lambda_{h,\alpha} y_h\,, \quad \Lambda_{h,\alpha} y_h = (\bar{k}_\alpha y_{x_\alpha})_{\bar{x}_\alpha}\,, \quad \vec{x} \in \Omega \qquad (4)$$

Аппроксимация по времени: явные и неявные схемы.

$$\frac{\hat{y}_h - y_h}{\tau} = \sigma\left[\hat{\Lambda}_h \hat{y}_h + \hat{\varphi}_h\right] + \left(1-\sigma\right)\left[\Lambda_h y_h + \varphi_h\right], \quad \vec{x} \in \Omega\,, \quad t > 0\,. \qquad (5)$$

$$\frac{\hat{y}_h - 2y_h + \breve{y}_h}{\tau^2} = \sigma\left[\hat{\Lambda}_h \hat{y}_h + \hat{\varphi}_h\right] + \left(1-2\sigma\right)\left[\Lambda_h y_h + \varphi_h\right] + \sigma\left[\breve{\Lambda}_h \breve{y}_h + \breve{\varphi}_h\right], \quad \vec{x} \in \Omega\,, \quad t > 0\,. \qquad (6)$$

Неявные схемы: прямые методы или итерационные.

2) Численные методы в областях, составленных из прямоугольников и параллелепипедов:

а) Метод нерегулярных шаблонов;
б) Метод фиктивных областей.

3) Численные методы в областях произвольной формы.

а) Метод нерегулярных шаблонов;
б) Метод фиктивных областей;
в) Нерегулярные сетки.

2.1. Метод нерегулярных шаблонов (МНШ)

Этапы метода:

- построение ***минимального окаймляющего параллелепипеда*** D, содержащего объединение $D_0 = \bigcup\limits_l D_l$;
- построение неравномерной сетки $\Omega = \prod\limits_{k=1}^{m} \overline{\omega}_{\hat{x}_k}$ в D ($\overline{\omega}_{\hat{x}_k}$ – одномерная неравномерная сетка по координате x_k, содержащая все ***опорные точки*** областей D_l);
- запись разностной схемы либо в узлах, либо в центрах ячеек, которые входят в область D_0 ;
- формирование итоговой системы алгебраических уравнений (AY=F) и выбор метода ее решения (прямой или итерационный);
- разбиение вектора неизвестных Y на фрагменты Y_k (k=0,...,p-1, p – количество вычислителей) и распределение их по вычислителям;
- вычисление решения.

2.2. Метод фиктивных областей (МФО)

Этапы метода:

- построение ***минимального окаймляющего параллелепипеда*** D, содержащего объединение $D_0 = \bigcup\limits_l D_l$;
- построение неравномерной сетки $\Omega = \prod\limits_{k=1}^{m} \overline{\omega}_{\hat{x}_k}$ в D ($\overline{\omega}_{\hat{x}_k}$ – одномерная неравномерная сетка по координате x_k, содержащая все ***опорные точки*** областей D_l);
- дополнение уравнения вне области D_0 :

$$\sum_{\alpha=1}^{m} \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(\tilde{k}_{\alpha\alpha}\frac{\partial u}{\partial x_\alpha}\right) - \tilde{q}u = 0, \quad \vec{x} \in D / D_0,$$

и добавление дополнительных условий (Дирихле или Неймана) на соответствующих участках границы;
- запись разностной схемы либо в узлах, либо в центрах ячеек;
- формирование итоговой системы алгебраических уравнений (AY=F) и выбор метода ее решения (прямой или итерационный);
- разбиение вектора неизвестных Y на фрагменты Y_k (k=0,...,p-1, p – количество вычислителей) и распределение их по вычислителям;
- вычисление решения.

2.3. Метод нерегулярных сеток (МНС)

Этапы метода:

- построение объединения $D_0 = \bigcup\limits_l D_l$;
- построение нерегулярной сетки Ω (симплексной – треугольники, тетраэдры, многогранники с плоскими гранями с числом вершин m+1, m – размерность пространства) в D_0 ;
- запись конечно-объемной схемы (метод конечных объемов, МКО) либо в узлах, либо в центрах ячеек, или конечно-элементной схемы (метод конечных элементов, МКЭ);
- формирование итоговой системы алгебраических уравнений (AY=F) и выбор метода ее решения (прямой или итерационный);
- разбиение вектора неизвестных Y на фрагменты Y_k (k=0,...,p-1, p – количество вычислителей) и распределение их по вычислителям;
- вычисление решения.

2.4. Сравнение методов

МНШ – универсальный, имеются лишние вычисления вследствие использования неравномерных сеток, использует стандартные методики обращения матриц, точность соответствует аппроксимации, трудно делать разбиение по вычислителям, неоднородные вычисления, нужна балансировка загрузки вычислителей.

МФО – специальный, имеются лишние вычисления вследствие использования фиктивных областей, использует стандартные методики обращения матриц, точность зависит от аппроксимации и выбора фиктивных уравнений, легко делать разбиение по вычислителям, нужна балансировка загрузки вычислителей.

МНС – универсальный, нет лишних вычислений, использует оригинальные методики обращения матриц, точность соответствует аппроксимации, трудно делать разбиение по вычислителям, неоднородные вычисления, нужна балансировка загрузки вычислителей.

3. Методы решения квазилинейной алгебраической задачи.

В результате построения численной схемы получаем алгебраическую задачу вида $AY = F$, которая может оказаться симметричной или несимметричной, линейной или нелинейной.

Для решения в нелинейном случае применяем итерации по нелинейности:

МПИ: $\overset{0}{Y}, \quad \forall s = 0,1,2,\ldots: \quad A\left(\overset{s}{Y}\right)\overset{s+1}{Y} = F\left(\overset{s}{Y}\right).$ (7)

МН: $\overset{0}{Y}, \quad \forall s = 0,1,2,\ldots: \quad A\left(\overset{s}{Y}\right)\overset{s+1}{Y} + \theta\left(\frac{\partial A}{\partial Y}\left(\overset{s}{Y}\right)\overset{s}{Y} - \frac{\partial F}{\partial Y}\left(\overset{s}{Y}\right)\right)\left(\overset{s+1}{Y} - \overset{s}{Y}\right) = F\left(\overset{s}{Y}\right).$ (8)

Можно использовать метод Ньютона общий и стационарный, параметр $0 < \theta \le 1$.

При распараллеливании важную роль играет метод реализации итераций, а также характер нелинейности: локальная и нелокальная.

4. Проблемы решения реальных задач на суперкомпьютерах.

4.1. Решение задач в областях сложной формы.

1) Построение нерегулярных сеток.

2) Построение схем МКО, МКЭ или гибридов.

3) Методы решения получаемых алгебраических уравнений.

4) Проблемы распараллеливания

4.2. Неоднородность задач (на примере многослойных областей, где пишутся различные системы уравнений).

4.3. Нелокальная нелинейность (в операторном виде).

4.4. Изменение размерности вектора неизвестных N=N(t) (на примере задач с движущимися особенностями и границами).

4.5. Как решение многих проблем - разбиение графов с учетом весов ребер и вершин.

Спектральный алгоритм. Иерархический алгоритм. Геометрический алгоритм.