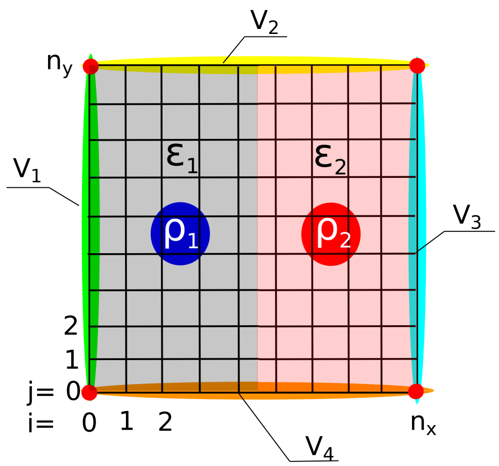
Projekt 6: Równanie Poissona - rozwiązanie metodą algebraiczną.

Tomasz Chwiej

29 sierpnia 2018

1 Wstęp

1.1 Dyskretyzacja



Rysunek 1: Geometria układu i schemat siatki obliczeniowej (docelowej). Potencjały V_1, V_2, V_3, V_4 określają warunki brzegowe Dirichleta, ρ_1, ρ_2 to gęstości ładunku, $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ - stałe dielektryczne w obszarze lewym i prawym. Potencjał w 4 narożnych czerwonych węzłach nie wpływa na rozwiązanie i może mieć w nich dowolną wartość.

Na zajęciach rozwiążemy równanie Poissona dla układu pokazanego na Rys.1 postępując następująco: i) zdyskretyzujemy równanie na regularnej siatce przy użyciu ilorazów różnicowych, ii) zapiszemy równanie jako układ równań liniowych z macierzą rzadką, iii) układ równań rozwiążemy stosując metody dla macierzy rzadkich.
Ogólne rów. Poissona dla obszaru obejmującego różne wartości stałej dielektrycznej

$$\nabla \varepsilon \nabla V = -\rho \tag{1}$$

zapisujemy jako

$$\varepsilon \nabla^2 V + \nabla \varepsilon \cdot \nabla V = -\rho \tag{2}$$

Dyskretyzujemy rów. Poissona stosując ilorazy różnicowe: $\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{2\Delta x}$ (dokładność $O(\Delta x^2)$) oraz $\frac{df}{dx} = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x}$ (gorsza dokładność $O(\Delta x)$ ale skok ε dokonuje się na jednym oczku siatki). Przyjmujemy oznaczenia

$$\Delta x = \Delta y = \Delta \tag{3}$$

$$x_i = \Delta \cdot i, \quad i = 0, 1, 2, \ldots, n_x \tag{4}$$

$$y_i = \Delta \cdot j, \quad j = 0, 1, 2, \ldots, n_y \tag{5}$$

$$V(x, y) \to V(x_i, y_j) \to V_{i,j} \tag{6}$$

$$\rho(x, y) \to \rho(x_i, y_j) \to \rho_{i,j} \tag{7}$$

$$\varepsilon(x, y) \to \varepsilon(x_i, y_j) \to \varepsilon_{i,j} \tag{8}$$

wówczas równanie zdyskretyzowane ma postać

$$
\begin{aligned}
& \varepsilon_{i,j}\left(\frac{V_{i+1,j}-2V_{i,j}+V_{i-1,j}}{\Delta^2}+\frac{V_{i,j+1}-2V_{i,j}+V_{i,j-1}}{\Delta^2}\right) \\
+ & \left(\frac{\varepsilon_{i+1,j}-\varepsilon_{i,j}}{\Delta}\frac{V_{i+1,j}-V_{i,j}}{\Delta}+\frac{\varepsilon_{i,j+1}-\varepsilon_{i,j}}{\Delta}\frac{V_{i,j+1}-V_{i,j}}{\Delta}\right) \\
= & -\rho_{i,j} \qquad (9)
\end{aligned}
$$

1.2 Algebraizacja równania

Równanie (9) zapiszemy w postaci macierzowej. Najpierw dokonamy reindekscaji węzłów, węzły ponumeryjemy tak aby każdemu odpowiadał jeden indeks (l) zamiast dwóch (i,j)

$$l = i + j\cdot(n_x+1), \quad (i=0,1,\dots,n_x; \quad j=0,1,2,\dots,n_y) \qquad (10)$$

$$l = 0,1,2,\dots,N-1, \quad N=(n_x+1)\cdot(n_y+1) \qquad (11)$$

przejście w drugą stronę $l \to (i,j)$ (przydatne np. przy sprządzaniu map potencjału)

$$j = floor\left(\frac{l}{n_x+1}\right) \quad \text{(wyznaczamy część całkowitą)} \qquad (12)$$

$$i = l - j\cdot(n_x+1) \qquad (13)$$

Równanie (9) zapiszemy w postaci macierzowej (algebraicznej)

$$A\vec{V}=\vec{b} \qquad (14)$$

w której mnożenie l-tego wiersza A przez $\vec{V}$ przebiega jak poniżej

$$a_{l,l-n_x-1}\cdot V_{l-n_x-1}+a_{l,l-1}\cdot V_{l-1}+a_{l,l}\cdot V_l+a_{l,l+1}\cdot V_{l+1}+a_{l,l+n_x+1}\cdot V_{l+n_x+1}=b_l \qquad (15)$$

a elementy macierzowe są zdefiniowane następująco

$$a_{l,l-n_x-1} = \frac{\varepsilon_l}{\Delta^2} \qquad (16)$$

$$a_{l,l-1} = \frac{\varepsilon_l}{\Delta^2} \qquad (17)$$

$$a_{l,l} = -\frac{2\varepsilon_l+\varepsilon_{l+1}+\varepsilon_{l+n_x+1}}{\Delta^2} \qquad (18)$$

$$a_{l,l+1} = \frac{\varepsilon_{l+1}}{\Delta^2} \qquad (19)$$

$$a_{l,l+n_x+1} = \frac{\varepsilon_{l+n_x+1}}{\Delta^2} \qquad (20)$$

Macierz układu jest macierzą rzadką, 5-przekątniową (zob. Rys.2).
Zmianę stałej dielektrycznej w przestrzeni określa poniższa relacja

$$\varepsilon_l = \begin{cases} \varepsilon_1, & i \leqslant n_x/2 \\ \varepsilon_2, & i > n_x/2 \end{cases} \qquad (21)$$

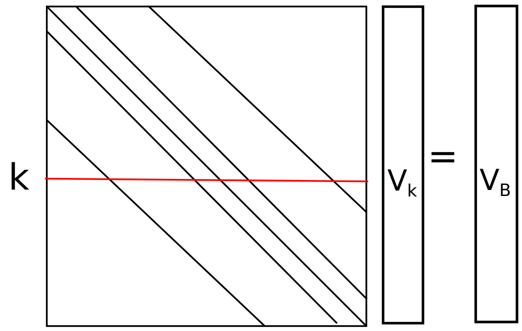
1.3 Warunki brzegowe Dirichleta

Zastosujemy warunki brzegowe Dirichelta tj. ustalone wartości potencjału w węzłach leżących na brzegu obszaru (rys. 1). Dla węzła leżącego na brzegu (indeks k na rys.2) WB wprowadzamy następująco:

$$a_{k,k-n_x-1}=a_{k,k-1}=a_{k,k+1}=a_{k,k+n_x+1}=0 \text{ (zerowanie wiersza poza diagonalą)} \qquad (22)$$

$$a_{k,k}=1 \text{ (diagonala)} \qquad (23)$$

$$b_k=V_B \text{ (wartość potencjału na danym brzegu)} \qquad (24)$$



Rysunek 2: Macierz układu jest macierzą rzadką 5-przekątniową.

2 Zadania do wykonania

Macierz układu zapiszemy w formacie CSR (compressed sparse row) indeksując elementy zaczynając od 0. Układ rozwiążemy stosując metodę GMRES używając procedury numerycznej napisanej w języku C. Aby sprawnie rozwiązać problem proszę postępować według poniższych wskazówek

1. Ustalamy początkowe wartości parametrów: $\Delta = 0.1$, $n_x = n_y = 4$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$, $V_1 = V_3 = 10$, $V_2 = V_4 = -10$, $\rho_1(x, y) = \rho_{x,y} = 0$, $N = (n_x + 1)(n_y + 1)$

2. Tworzymy 3 wektory definiujące macierz układu: $\boldsymbol{a}$,$\boldsymbol{ia}$,$\boldsymbol{ja}$ oraz wektor wyrazów wolnych $\boldsymbol{b}$ i wektor rozwiązań $\boldsymbol{V}$ gdzie:

   - $\boldsymbol{a}$ to wektor typu *double* o $5 \cdot N$ elementach (niezerowe wartości el. macierzowych)
   - $\boldsymbol{ja}$ to wektor typu *int* o $5 \cdot N$ elementach (przechowuje informacje o numerach kolumn)
   - $\boldsymbol{ia}$ - wektor typu *int*, ilość elementów $N+1$ (wskaźniki do elementów rozpoczynających dany wiersz). Uwaga: po utworzeniu wektora $\boldsymbol{ia}$ wszystkie jego elementy wypełniamy wartością -1.
   - $\boldsymbol{b}$ i $\boldsymbol{V}$ to wektory typu *double* o N elementach

3. Wyznaczamy niezerowe elementy macierzy A oraz wektora wyrazów wolnych $\boldsymbol{b}$ uwzględniając WB Dirichleta zgodnie z algorytmem przedstawionym w sekcji (3). W celu sprawdzenia poprawności wypełnienia macierzy A i wektora $\boldsymbol{b}$ należy zapisać je do pliku, podając niezerowe elementy $l, i_l, j_l, a[l]$ (dla macierzy) oraz $l, i_l, j_l, b[l]$ (dla wektora). 20 pkt.

4. Rozwiązujemy układ równań z macierzą rzadką stosując procedurę (dołączyć pliki: *mgmres.c* i *mgmres.h*)

   ```
   void pmgmres_ilu_cr( int N, int nz_num, int ia[], int ja[], double a[],
     double V[], double b[], int itr_max, int mr, double tol_abs,
     double tol_rel )
   ```

   Opis znaczenia argumentów znaleźć można w pliku *mgmres.c*. Wraz ze zmianą n_x i n_y zmieniają się: N - rozmiar układu (wzór 11) oraz *nz_num* - ilość elementów niezerowych w macierzy A (przedostatnia instrukcja w algorytmie w sekcji 3), dla pozostałych parametrów można przyjąć następujące wartości: $itr\_max = 500$, $mr = 500$, $tol\_abs = 10^{-8}$, $tol\_rel = 10^{-8}$.

5. Sporządzić mapy potencjału dla $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$, $V_1 = V_3 = -V_2 = -V_4 = 10$, $\rho^{(1)} = \rho^{(2)} = 0$ i trzech siatek: a) $n_x = n_y = 50$, b) $n_x = n_y = 100$, c) $n_x = n_y = 200$. 50 pkt.

6. Ustalamy wartości parametrów: $n_x = n_y = 100$, $V_1 = V_3 = V_2 = V_4 = 0$, $x_{max} = \Delta \cdot n_x$,

$y_{max} = \Delta \cdot n_y$, $\sigma = x_{max}/10$ oraz

$$\rho^{(1)}(x,y) = (+1) \cdot \exp\left(-\frac{(x - 0.25 \cdot x_{max})^2}{\sigma^2} - \frac{(y - 0.5 \cdot y_{max})^2}{\sigma^2}\right) \tag{25}$$

$$\rho^{(2)}(x,y) = (-1) \cdot \exp\left(-\frac{(x - 0.75 \cdot x_{max})^2}{\sigma^2} - \frac{(y - 0.5 \cdot y_{max})^2}{\sigma^2}\right) \tag{26}$$

Znaleźć rozkłady potencjału dla 3 przypadków: a) $\varepsilon_1 = 1$ i $\varepsilon_2 = 1$, b) $\varepsilon_1 = 1$ i $\varepsilon_2 = 2$ oraz c) $\varepsilon_1 = 1$ i $\varepsilon_2 = 10$. Za przedstawienie 3 map potencjału 30 pkt.

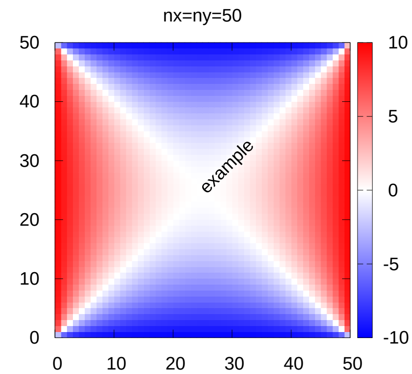
3 Algorytm wypełniania macierzy rzadkiej w formacie CSR + WB Dirichleta

Po utworzeniu tablic: ***a***, ***ia***, ***ja*** oraz wektora wyrazów wolnych ***b***, ich elementy wypełniamy zgodnie z poniższym algorytmem

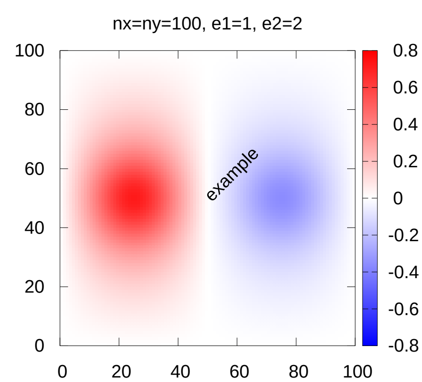
```
inicjalizacja: k=-1 //numeruje niezerowe elementy A

FOR l=0 TO l<N STEP 1 DO

  int brzeg=0  //wskaźnik położenia: 0-środek obszaru; 1-brzeg
  double vb=0. //potencjal na brzegu

  IF(i==0)THEN //lewy brzeg
    brzeg=1
    vb=v1
  END IF

  IF(j==ny)THEN //górny brzeg
    brzeg=1
    vb=v2
  END IF

  IF(i==nx)THEN //prawy brzeg
    brzeg=1
    vb=v3
  END IF

  IF(j==0)THEN //dolny brzeg
    brzeg=1
    vb=v4
  END IF

  //wypełniamy od razu wektor wyrazów wolnych
  b[l]=-(ρ_l^(1)+ρ_l^(2)); //jeśli w środku jest gęstość

  IF(brzeg==1)THEN
    b[l]=vb; //wymuszamy wartość potencjału na brzegu
  END IF


  //wypełniamy elementy macierzy A
```

```
  ia[l]=-1; //wskaźnik dla pierwszego el. w wierszu

  //lewa skrajna przekatna
    IF(l-nx-1>=0 AND brzeg==0 )THEN
      k++
      if(ia[l]<0)ia[l]=k
      a[k]=$a_{l,l-n_x-1}$
      ja[k]=$l-n_x-1$
    ENDIF

  //poddiagonala
    IF(l-1>=0 AND brzeg==0 )THEN
      k++
      if(ia[l]<0)ia[l]=k
      a[k]=$a_{l,l-1}$
      ja[k]=$l-1$
    END IF

  //diagonala
      k++
      if(ia[l]<0)ia[l]=k
      IF(brzeg==0)THEN
        a[k]=$a_{l,l}$
      ELSE
        a[k]=1
      END IF
      ja[k]=$l$

  //naddiagonala
    IF(l<N AND brzeg==0 )THEN
      k++
      a[k]=$a_{l,l+1}$
      ja[k]=$l+1$
    END IF

  //prawa skrajna przekątna
    IF(l<$N-n_x-1$ AND brzeg==0 )THEN
      k++
      a[k]=$a_{l,l+n_x+1}$
      ja[k]=$l+n_x+1$
    END IF

END DO
  nz_num=k+1  //ilosc niezerowych elementow (1 element ma indeks 0)
  ia[N]=nz_num
```

4 Przykładowe rozwiązania



Rysunek 3: $n_x = n_y = 50$, $\rho^{(1)} = \rho^{(2)} = 0$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$



Rysunek 4: $n_x = n_y = 100$, $\rho^{(1)} = \rho^{(2)} \neq 0$, $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 2$