МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»
(ННГУ)

Институт информационных технологий, математики и механики

Кафедра математического обеспечения и суперкомпьютерных технологий

Направление подготовки: «Прикладная математика и информатика»
Профиль подготовки: «Вычислительная математика и суперкомпьютерные технологии»

Отчет по лабораторной работе №3

Выполнил: студент группы 381903-3м
_____ Панов А.А.
Подпись

Проверил:
к.ф.-м. н., доц., доцент каф. МОСТ
_____ Баркалов К.А.
Подпись

Нижний Новгород
2020

Содержание

Введение

Многие физические задачи описываются дифференциальными уравнениями в частных производных. Очень часто аналитически решить такие уравнения невозможно. Такие уравнения обычно решаются численно. В данной лабораторной на примере решения динамической одномерной задачи теплопроводности (задача о «стержне») будут рассмотрены параллельные реализации некоторых методов.

1. Постановка задачи

С помощью метода частичной дискретизации, используя метод Рунге-Кутта 4-ого порядка решить динамическую одномерную задачу теплопроводности вида:

$$\frac{du(x,t)}{dt} = \frac{d^2u(x,t)}{dx^2} + f(x,t), x \in [0,L], t \in [0,T]$$

Со следующими граничными/начальными условиями:

$u(0,t) = v_0(t)$
$u(L,t) = v_n(t)$
$u(x,0) = u_0(x)$

Требуется найти численное решение $u(x,T)$ на равномерной сетке:

$$G = \left\{(x_i, t_j) : x_i = ih, t_j = j\tau, i = \overline{0,n}, j = \overline{0,m}\right\}$$

$$h = \frac{L}{n}, \tau = \frac{T}{m}$$

Программа на языке C++ должна реализовывать функцию со следующим заголовком:

```
class heat_task {
public:
 double T; // момент времени, в который необходимо аппроксимировать
              u(x, t)
 double L; // длина стержня
 int n; // размер сетки по x
 int m; // размер сетки по t
 double initial_condition(double x); // функция, задающая начальное
                                        условие
 double left_condition (double t); // функция, задающая граничное
                                     условие при x = 0
 double right_condition (double t); // функция, задающая граничное
                                      условие при x = L
 double f(double x, double t); // функция, задающая внешнее
                                  воздействие
};
void heat_equation_runge_kutta(heat_task task, double * v);
```

Должны быть выполнены условия на порядок сходимости: $o(\tau^4 + h^2)$

Размерность сетки $nm \leq 2^{26}$.

2. Метод частичной дискретизации

Рассмотрим простейшую версию уравнения теплопроводности:

$$\frac{du(x,t)}{dt} = \frac{d^2u(x,t)}{dx^2}, \qquad x \in [0,1], t \in [0,1]$$

$$u(0,t) = 0$$
$$u(L,t) = 0$$
$$u(x,0) = u_0(x)$$

Аппроксимируем вторую производную разностным оператором второго порядка:

$$\frac{u(x_i,t)}{dt} \approx \frac{u(x_{i+1},t) - 2u(x_i,t) + u(x_{i-1},t)}{h^2}$$

Выполним замену: $u(x_i,t) = v^i(t)$, после этого в матричном виде можно записать: $v'(t) = \frac{1}{h^2}Av(t)$, матрица A трех диагональная, с элементами $1, -2, 1$. Далее к этому выражение нужно применить метод Рунге-Кутта.

3. Метод Рунге-Кутта 4 порядка

Спомощью данного метода выражение вида $v'(t) = F(t, v) = \frac{1}{h^2} Av(t)$ можно вычислить итерационно:

$$v^{n+1} = v^n + \frac{\tau}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$k_1 = f(t^n, v^n)$$

$$k_2 = f(t^n + \frac{\tau}{2}, v^n + \frac{\tau}{2}k_1)$$

$$k_3 = f(t^n + \frac{\tau}{2}, v^n + \frac{\tau}{2}k_2)$$

$$k_4 = f(t^n + \tau, v^n + \tau k_3)$$

В данном случае, так как A матрица, то v^{n+1} и коэффициенты k_i будут векторными.

Лабораторной поставлена немного другая задача (с ненулевыми граничными условиями, и с внешней функцией воздействия f), но полученные формулы легко дополняются, в частности функция F будет иметь вид:

$$F(t, v) = \frac{1}{h^2} Av(t) + f(t) + (v^0(t), 0, \dots, 0, v^n(t))^T$$

3.1 Сходимость

Чтобы данный метод сходился необходимо чтобы шаг по времени был меньше квадрата шага по x, т. е. $\tau < h^2$. Порядок сходимости данного метода оценивается $o(\tau^4 + h^2)$.

4. Параллельная реализация

Реализация кода по формулам выполняется несложно (хотя нужно соблюдать аккуратность с коэффициентами).

Компоненты каждого векторного коэффициента $k_1, k_2 \ldots$ можно вычислять параллельно. Также компоненты v^{n+1} можно вычислять параллельно. Единственная проблема, что внутри таких параллельных циклов довольно мало вычислений. В таком случае доля накладных расходов связанных с синхронизацией после каждого параллельного цикла, довольна большая, что плохо сказывается на масштабируемости. Также «вредит» большое количество операций чтения/записей относительно количества вычислительных операций.

Общий вычислительный цикл выглядит так:

```
for (int tick = 0; tick < m; tick++)
{
    curTime = dt * tick;
    v[0] = task.left_condition(curTime);
    v[n] = task.right_condition(curTime);
    calc_k1(task, v, k1, curTime);
    calc_k2(task, v, k1, k2, curTime + dt/2, tmp.data());
    calc_k3(task, v, k2, k3, curTime + dt/2, tmp.data());
    calc_k4(task, v, k3, k4, curTime + dt, tmp.data());
    calc(task, v, k1, k2, k3, k4, curTime);
}
```

Пример вычисления коэффициента k2 (вычисления других k аналогично):

```
void calc_k2(heat_task &task, const double *v, const double *k1, double *k2, double t,
             double *tmp)
{
    const int n = task.n;
    const double h = task.L / n;
    const double coeff = 1 / (h*h);
    const double dt = task.T/(task.m * 2.0);
    tmp[0] = task.left_condition(t);
    tmp[n] = task.right_condition(t);
    #pragma omp parallel for
    for (int i = 1; i < n; i++)
        tmp[i] = v[i] + dt * k1[i];
    #pragma omp parallel for
    for (int i = 1; i < n; i++)
        k2[i] = coeff * (tmp[i + 1] - 2 * tmp[i] + tmp[i - 1]) + task.f(h*i, t);
}
```

4.1 Проверка корректности

Для проверки корректности была составлена задача с заранее известным аналитическим ответом. Это делалась следующим образом:

Была выбрана функция $u(x,t) = -x(x-100) + \cos(x) + t^3$

$$\frac{du(x,t)}{dt} = 3t^2$$

$$\frac{d^2u(x,t)}{dx^2} = -2 - \cos(x)$$

Из условия нашей задачи:

$$\frac{du(x,t)}{dt} = \frac{d^2u(x,t)}{dx^2} + f(x,t), x \in [0,L], t \in [0,T]$$

$$3t^2 = -2 - \cos(x) + f(x,t)$$

Отсюда:

$$f(x,t) = 2 + \cos(x) + 3t^2$$

$u(0,t) = \cos(0) + t^3$
$u(L,t) = -L^2 + 100L + \cos(L) + t^3$
$u(x,0) = -x^2 + 100x + \cos(x)$
Таким образом была получена задача с известным аналитическим решением:

$$u(x,t) = -x(x-100) + \cos(x) + t^3$$

Для проверки корректности сравнивался ответ полученный алгоритмом, с аналитическим ответом. Использовались следующие параметры:

T = 0.1, n = 50000, m = 50000, $h = \frac{L}{n} = 0.002$, $\tau = \frac{T}{m} = 0.000002$

Норма вида бесконечность от разности численного и аналитического решения не превышала $3 * 10^{-8}$. При этом, при увеличении h в 10 раз «ошибка» увеличилась приблизительно в 100 раз до $3 * 10^{-6}$, что соотносится с порядком сходимости метода $o(\tau^4 + h^2)$.

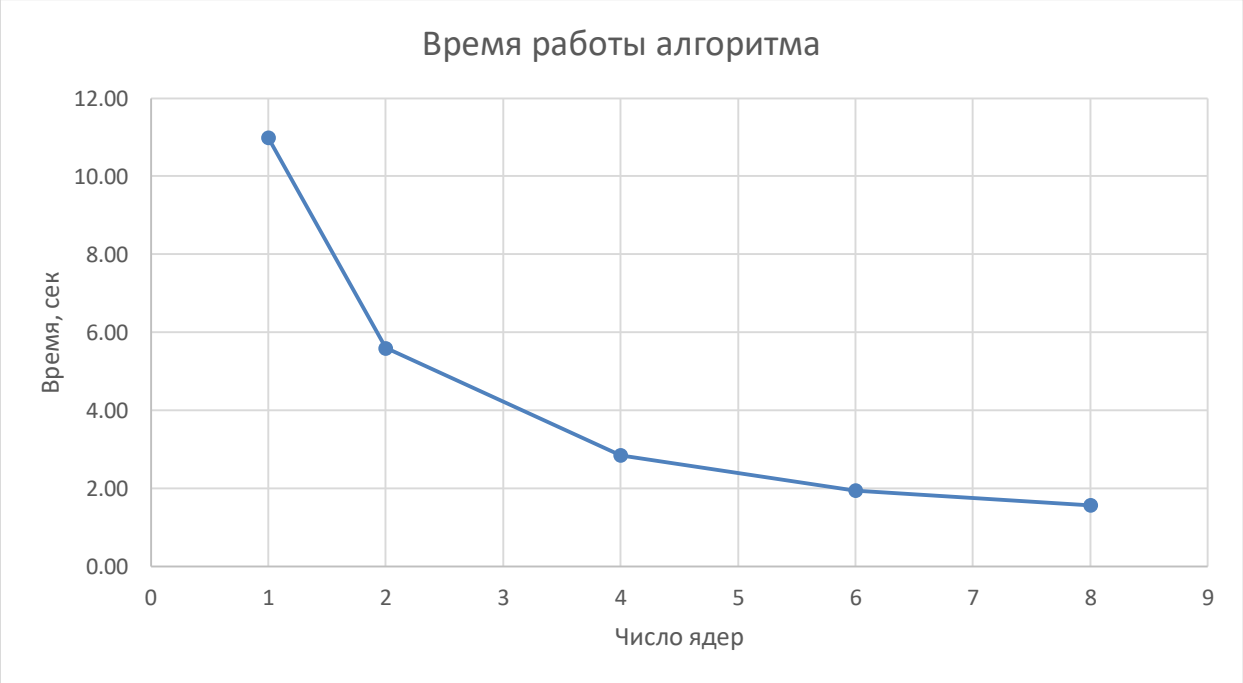
5. Вычислительные эксперименты

Решалась задача с длиной стрежня L=100, временем T = 0.1, n = 50000, m = 50000 (шаг по времени должен быть ограничен шагом по пространству), $h = \frac{L}{n} = 0.002$, $\tau = \frac{T}{m} = 0.000002$. Функция f и начальные/граничные условия использовались такие же, как в задаче с проверкой корректности.

Запуск производился на восьми ядерном процессоре Intel core i7 9700K, 16 gb ОЗУ. Использовался Intel® C++ Compiler 19.1 for Windows* с оптимизацией O2.

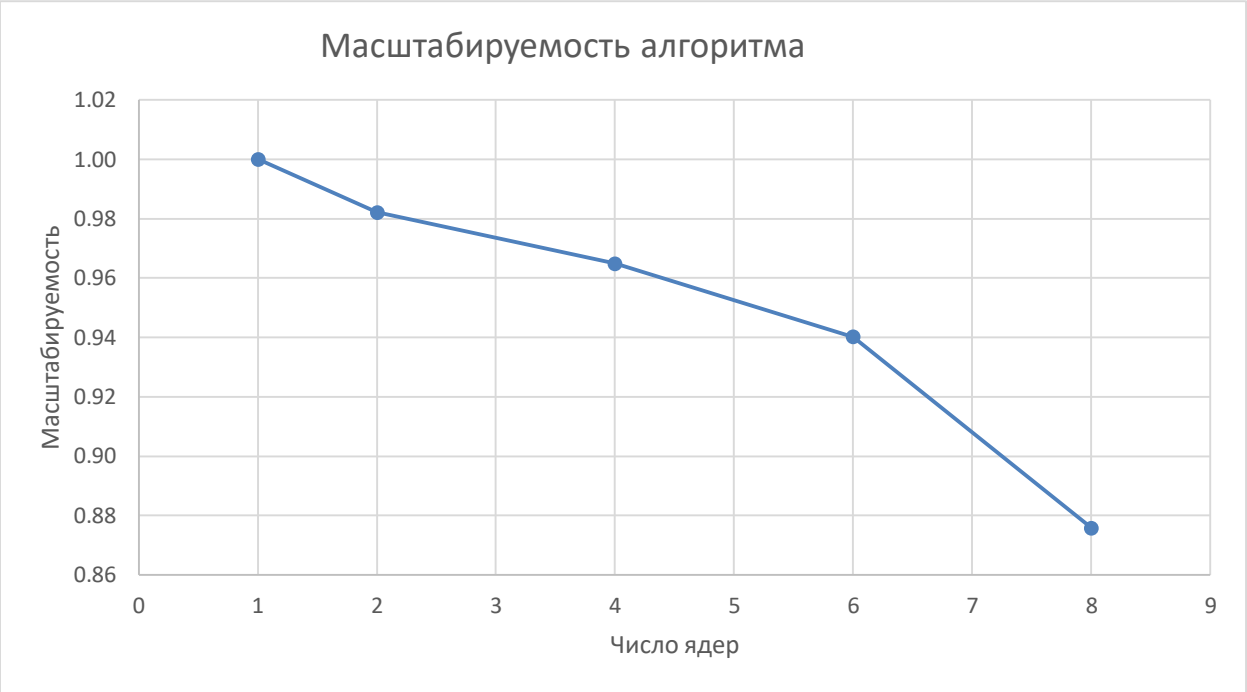
Время, сек.	1 core	2 core	4 core	6 core	8 core
	11.00	5.60	2.85	1.95	1.57

Таблица 1. Время решения задачи.



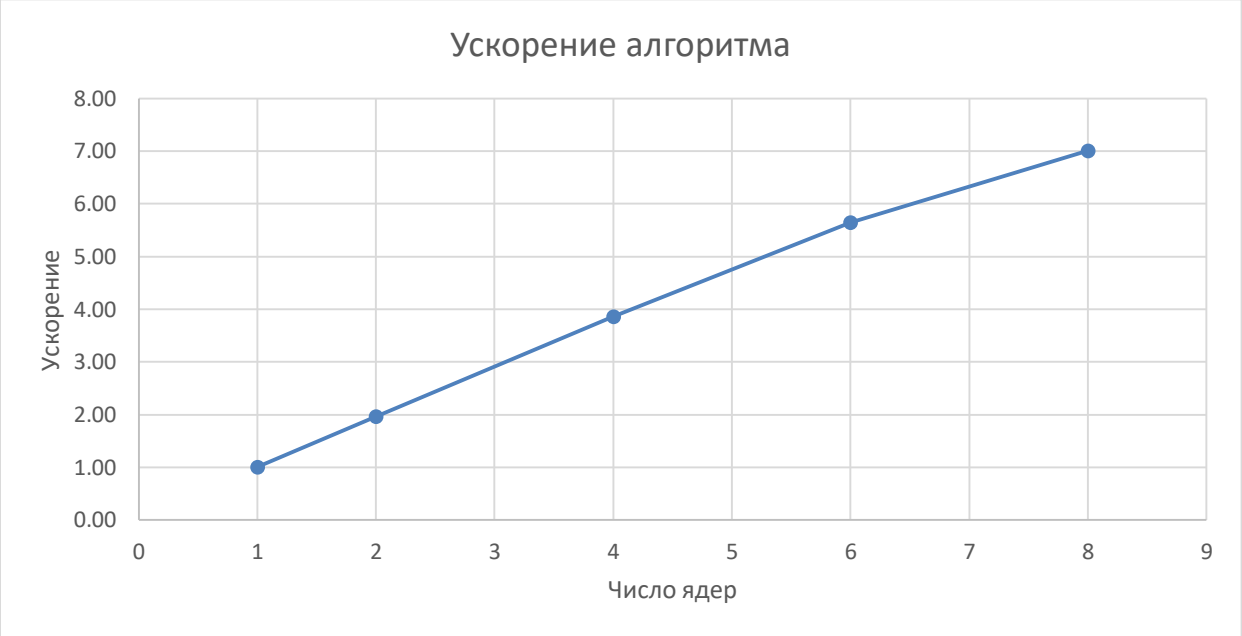
Масштабируемость	1 core	2 core	4 core	6 core	8 core
	1.00	0.98	0.96	0.94	0.88

Таблица 2. Масштабируемость алгоритма.



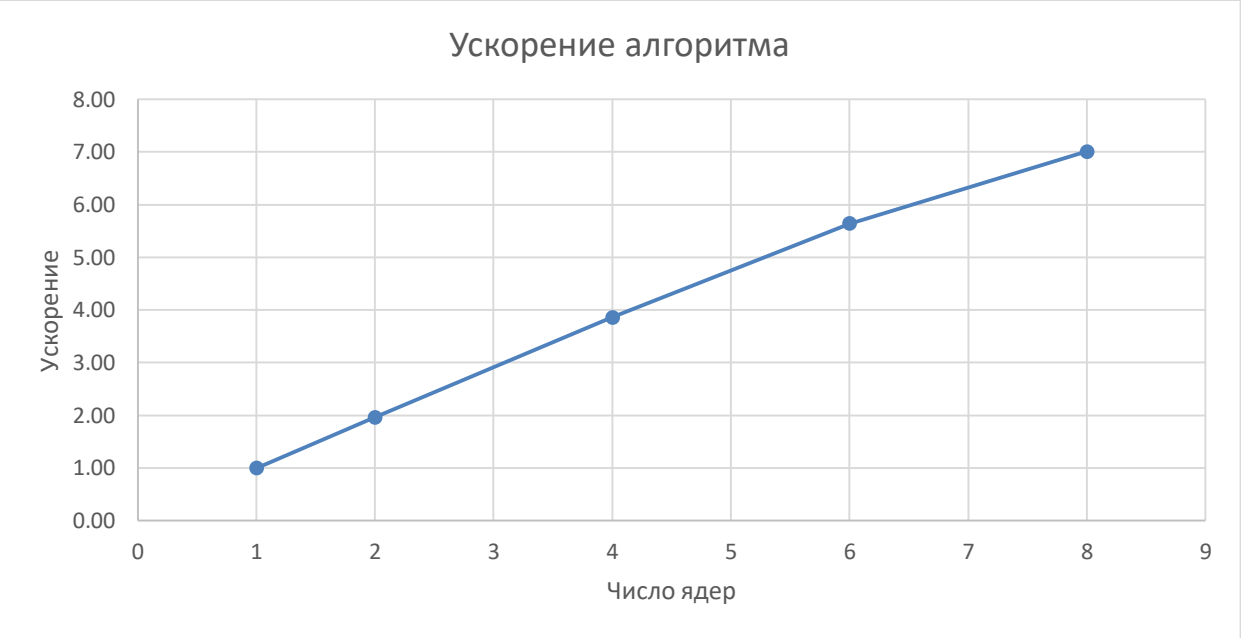
Ускорение	1 core	2 core	4 core	6 core	8 core
	1.00	1.96	3.86	5.64	7.01

Таблица 3. Ускорение алгоритма.



6. Заключение

Численный эксперимент показал, что можно получить довольно неплохую масштабируемость (88% на 8 ядрах) при правильно подобранных n и m. Важно, чтобы n было довольно большим, чтобы время синхронизации занимало малую долю времени от общего времени вычислений. Еще одна проблема заключается в том, что параллелится цикл, сложность которого линейно зависит от количества данных. Таким образом увеличение размера данных, увеличивает число чтений/записей пропорционально числу вычислений. Таким образом, производительность упирается в скорость «памяти», а не процессора. Можно заметить, что чем сложнее функция f, тем больше будет вычислений, тем лучшей масштабируемости можно будет добиться. В целом, распараллеливание методов частичной дискретизации и Рунге-Кутта может принести значительное ускорение (в 7 раз на 8 ядрах).



Список литературы

1. Баркалов К.А. Параллельные численные методы.
2. Самарский А. А. Введение в численные методы. – Лань, 2009.