Задание по курсу «Суперкомпьютерное моделирование и технологии»

Октябрь 2018

Содержание

1 Введение

Требуется методом конечных разностей приближенно решить краевую задачу для уравнения Пуассона в прямоугольной области. Задание необходимо выполнить на следующих ПВС Московского университета:

1. IBM Blue Gene/P,
2. IBM Polus.

2 Математическая постановка дифференциальной задачи

В прямоугольнике $\Pi = [A_1, A_2] \times [B_1, B_2]$, 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 $-\Delta u = F(x, y)$, в котором оператор Лапласа

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}.$$

Для выделения единственного решения уравнение дополняется граничными условиями одним из перечисленных ниже способов:

1. условия первого рода (условия Дирихле):
$$u\big|_{\Gamma} = \varphi(x,y); \tag{1}$$
2. условия второго рода (условия Неймана):
$$-\frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{\Gamma} = \psi(x,y), \tag{2}$$
где n – единичная внешняя нормаль к границе Γ;
3. условия смешанного типа, в которых на части границы прямоугольника задано условие первого рода, на оставшейся части границы – условие второго рода, а именно:

$$\left.\begin{array}{rcll} u(x,y) & = & \varphi(x,y), & (x,y)\in\gamma_R\cup\gamma_T\cup\gamma_L \\ -\dfrac{\partial u}{\partial n}(x,y) & = & \psi(x,y), & (x,y)\in\gamma_B \end{array}\right\}, \tag{3}$$

$$\left.\begin{array}{rcll} u(x,y) & = & \varphi(x,y), & (x,y)\in\gamma_R \\ -\dfrac{\partial u}{\partial n}(x,y) & = & \psi(x,y), & (x,y)\in\gamma_T\cup\gamma_L\cup\gamma_B \end{array}\right\}, \tag{4}$$

$$\left.\begin{array}{rcll} u(x,y) & = & \varphi(x,y), & (x,y)\in\gamma_R\cup\gamma_T \\ -\dfrac{\partial u}{\partial n}(x,y) & = & \psi(x,y), & (x,y)\in\gamma_L\cup\gamma_B \end{array}\right\}, \tag{5}$$

$$\left.\begin{array}{rcll} u(x,y) & = & \varphi(x,y), & (x,y)\in\gamma_L\cup\gamma_R \\ -\dfrac{\partial u}{\partial n}(x,y) & = & \psi(x,y), & (x,y)\in\gamma_B\cup\gamma_T \end{array}\right\}. \tag{6}$$

Функции $F(x,y)$, $\varphi(x,y)$, $\psi(x,y)$ считаются известными, функцию $u(x,y)$, удовлетворяющую уравнению Пуассона и граничному условию, определенному вариантом задания, требуется найти.

Замечание 1. Нормаль n не определена в угловых точках прямоугольника. Краевое условие второго рода следует рассматривать лишь в тех точках границы, где нормаль существует.

Замечание 2. Особенность задачи Неймана заключается в том, что она имеет решение не при любых $F(x,y)$ и $\psi(x,y)$. Условие разрешимости имеет вид:
$$\int_{\Gamma}\psi(x,y)dl = \iint_{\Pi} F(x,y)dxdy.$$
Если решение $u(x,y)$ существует, то оно определено неоднозначно: любое другое решение отличается от данного на константу.

3 Разностная схема решения задачи.

Краевые задачи для уравнения Пуассона предлагается численно (приближенно) решать методом конечных разностей. В расчетной области Π 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

$$[u, v] = \sum_{i=0}^{M} h_1 \sum_{j=0}^{N} h_2 \rho_{ij} u_{ij} v_{ij}, \quad \|u\|_E = \sqrt{[u, u]}. \tag{7}$$

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

$$Aw \ = \ B, \tag{8}$$

где $A : H \to H$ – оператор, определенный в пространстве сеточных функций, $B \in H$ – известная правая часть. Задача (8) 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 Пуассона во всех внутренних точках сетки аппроксимируется разностным уравнением

$$-\frac{1}{h_1^2}\big(w_{i+1j} - 2w_{ij} + w_{i-1j}\big) - \frac{1}{h_2^2}\big(w_{ij+1} - 2w_{ij} + w_{ij-1}\big) = F_{ij},\ i = \overline{1, M-1},\ j = \overline{1, N-1}, \tag{9}$$

где $F_{ij} = F(x_i, y_j)$.

Краевые условия первого рода аппроксимируются точно равенством

$$w_{ij} = \varphi(x_i, y_j). \tag{10}$$

Переменные w_{ij}, заданные равенством (10), исключаются из разностной схемы, а соответствующие узлы P_{ij} – из расчетной сетки $\overline{w}_h$. В скалярном произведении (7) слагаемые, отвечающие данным граничным узлам, считаются равными нулю.

Аппроксимация граничных условий второго рода имеет вид:

$$\frac{2}{h_1^2}(w_{Mj} - w_{M-1j}) - \frac{1}{h_2^2}\big(w_{Mj+1} - 2w_{Mj} + w_{Mj-1}\big) = F_{Mj} - \frac{2}{h_1}\psi_{Mj},\ j = \overline{1, N-1} \tag{11}$$

– на правой стороне прямоугольника,

$$-\frac{2}{h_1^2}(w_{1j} - w_{0j}) - \frac{1}{h_2^2}\big(w_{0j+1} - 2w_{0j} + w_{0j-1}\big) = F_{0j} - \frac{2}{h_1}\psi_{0j},\ j = \overline{1, N-1} \tag{12}$$

– на левой стороне прямоугольника,

$$\frac{2}{h_2^2}(w_{iN} - w_{iN-1}) - \frac{1}{h_1^2}\big(w_{i+1N} - 2w_{iN} + w_{i-1N}\big) = F_{iN} - \frac{2}{h_2}\psi_{iN},\ i = \overline{1, M-1} \tag{13}$$

– на верхней стороне прямоугольника,

$$-\frac{2}{h_2^2}(w_{i1}-w_{i0})-\frac{1}{h_1^2}\big(w_{i+1\,0}-2w_{i0}+w_{i-1\,0}\big)=F_{i0}-\frac{2}{h_2}\psi_{i0},\ i=\overline{1,M-1} \tag{14}$$

– на нижней стороне прямоугольника.

Сеточных уравнений (9)-(14) недостаточно, чтобы определить разностную схему для задачи с граничными условиями (2),(4),(5). Требуются сеточные уравнения для угловых точек прямоугольника П. Они имеют следующий вид:

$$-\frac{2}{h_1^2}(w_{1\,0}-w_{00})-\frac{2}{h_2^2}(w_{01}-w_{00})=F(P)-\Big(\frac{2}{h_1}+\frac{2}{h_2}\Big)\psi(P) \tag{15}$$

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

$$\frac{2}{h_1^2}(w_{M\,0}-w_{M-1\,0})-\frac{2}{h_2^2}(w_{M1}-w_{M0})=F(P)-\Big(\frac{2}{h_1}+\frac{2}{h_2}\Big)\psi(P) \tag{16}$$

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

$$\frac{2}{h_1^2}(w_{MN}-w_{M-1N})+\frac{2}{h_2^2}(w_{MN}-w_{MN-1})=F(P)-\Big(\frac{2}{h_1}+\frac{2}{h_2}\Big)\psi(P) \tag{17}$$

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

$$-\frac{2}{h_1^2}(w_{1N}-w_{0N})+\frac{2}{h_2^2}(w_{0N}-w_{0N-1})=F(P)-\Big(\frac{2}{h_1}+\frac{2}{h_2}\Big)\psi(P) \tag{18}$$

– в вершине $P(A_1,B_2)$ прямоугольника.

Замечание. Разностные схемы (8), аппроксимирующие все описанные выше краевые задачи для уравнения Пуассона, за исключением задачи Неймана, обладают самосопряженным и положительно определенным оператором A и имеют единственное решение при любой правой части. Оператор A схемы для задачи Неймана также самосопряжен, но вырожден и только лишь неотрицателен. Его ядро одномерно. Базис ядра образует сеточная функция, равная единице во всех узлах сетки. Для существования решения разностной схемы (8) требуется ортогональность правой части B ядру оператора A, что гарантирует принадлежность правой части образу оператора. Решение определено неоднозначно: разность любых двух решений равна константе во всех узлах расчетной сетки.

Пример аппроксимации краевой задачи. Пользуясь равенствами (9)-(18), соберем разностную схему для уравнения Пуассона с граничными условиями смешанного типа (4). Во всех внутренних узлах сетки численное решение удовлетворяет равенству (9). На левой, верхней и нижней сторонах прямоугольника используем условия (12), (13), (14) соответственно. Эти уравнения справедливы во всех граничных точках, за исключением угловых. К полученной системе уравнений следует добавить равенства (15) и (18) – условия, которым удовлетворяет численное решение в вершинах (A_1,B_1) и (A_1,B_2) прямоугольника. Всюду на правой границе решение определено равенством (10). Переменные w_{Mj}, $j=0,1,2,\dots,N$ исключаются из полученных ранее уравнений и система принимает вид:

$$
\begin{aligned}
-\frac{1}{h_1^2}\big(w_{i+1j}-2w_{ij}+w_{i-1j}\big)-\frac{1}{h_2^2}\big(w_{ij+1}-2w_{ij}+w_{ij-1}\big) &= F_{ij},\\
i=1,2,\ldots,M-2,\ j=1,2,\ldots,N-1,&\\
-\frac{1}{h_1^2}\big(-2w_{M-1j}+w_{M-2j}\big)-\frac{1}{h_2^2}\big(w_{M-1j+1}-2w_{M-1j}+w_{M-1j-1}\big) &= F_{M-1j}+\frac{1}{h_1^2}\varphi_{Mj},\\
j=1,2,\ldots,N-1,&\\
-\frac{2}{h_1^2}(w_{1j}-w_{0j})-\frac{1}{h_2^2}\big(w_{0j+1}-2w_{0j}+w_{0j-1}\big) &= F_{0j}-\frac{2}{h_1}\psi_{0j},\\
j=1,2,\ldots,N-1,&\\
\frac{2}{h_2^2}(w_{iN}-w_{iN-1})-\frac{1}{h_1^2}\big(w_{i+1N}-2w_{iN}+w_{i-1N}\big) &= F_{iN}-\frac{2}{h_2}\psi_{iN},\\
i=1,2,\ldots,M-2,&\\
-\frac{2}{h_2^2}(w_{i1}-w_{i0})-\frac{1}{h_1^2}\big(w_{i+1\,0}-2w_{i0}+w_{i-1\,0}\big) &= F_{i0}-\frac{2}{h_2}\psi_{i0},\\
i=1,2,\ldots,M-2,&
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{2}{h_2^2}(w_{M-1N}-w_{M-1N-1})-\frac{1}{h_1^2}\big(-2w_{M-1N}+w_{M-2N}\big) &= F_{M-1N}-\frac{2}{h_2}\psi_{M-1N}+\frac{1}{h_1^2}\varphi_{MN},\\
-\frac{2}{h_2^2}(w_{M-1\,1}-w_{M-1\,0})-\frac{1}{h_1^2}\big(-2w_{M-1\,0}+w_{M-2\,0}\big) &= F_{M-1\,0}-\frac{2}{h_2}\psi_{M-1\,0}+\frac{1}{h_1^2}\varphi_{M0}.
\end{aligned}
$$

Эти соотношения представляют собой систему линейных алгебраических уравнений с числом уравнений равным числу неизвестных и определяют единственным образом неизвестные значения w_{ij}, $i=0,1,2,\ldots,M-1$, $j=0,1,2,\ldots,N$. Систему можно представить в операторном виде (8), в котором оператор A определен левой частью линейных уравнений, функция B – правой частью.

4 Метод решения системы линейных алгебраических уравнений.

Приближенное решение системы уравнений (8) 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:

$$w_{ij}^{(k+1)}=w_{ij}^{(k)}-\tau_{k+1}r_{ij}^{(k)}, \tag{19}$$

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

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

В качестве условия остановки итерационного процесса можно взять неравенство

$$\|w^{(k+1)} - w^{(k)}\|_E < \varepsilon,$$

где ε – положительное число, определяющее точность итерационного метода. Оценку точности приближенного решения сеточных уравнений (8) можно проводить в других нормах пространства сеточных функций, например, в максимум норме

$$\|w\|_C = \max_{x \in \overline{\omega}_h} |w(x)|. \tag{20}$$

Константу ε для данной задачи можно взять равной 10^{-6}.
Замечание. Как отмечено ранее, разностная схема (8) в случае краевых условий Неймана либо не имеет решения вовсе, либо имеет бесконечно много решений. В этом случае интересуются нормальным псевдорешением схемы (см. [4]). Чтобы подавить влияние ошибок округления в процессе вычислений и гарантировать сходимость метода минимальных невязок к нормальному псевдорешению схемы, предлагается исключить из приближенного решения его ортогонгальную проекцию на ядро оператора A. Для этого достаточно на каждой итерации вычесть из $w^{(k+1)}(x)$, $x \in \overline{\omega}_h$ значение скалярного произведения $[w^{(k+1)}, 1]$, деленное на площадь прямоугольника Π, т.е. заменить равенство (19) равенствами

$$\tilde{w}_{ij}^{(k+1)} = w_{ij}^{(k)} - \tau_{k+1} r_{ij}^{(k)}, \quad w_{ij}^{(k+1)} = \tilde{w}_{ij}^{(k+1)} - \left[\tilde{w}^{(k+1)}, 1\right] \Big/ ((A_2 - A_1)(B_2 - B_1)).$$

5 Задание практикума.

Задача практикума заключается в восстановлении известной гладкой функции $u(x, y)$ по ее образу Лапласа $F(x, y) = -\Delta u$ и ее граничным значениям, соответствующим одному из шести описанных выше вариантов краевых условий. Конкретное задание определяется типом граничных условий для уравнения Пуассона, явным видом функции $u(x, y)$, которую следует численно получить, а также выбором сеточной нормы для контроля точности итерационного метода решения разностной схемы.

Предлагается восстанавить следующие гладкие функции:

1. $u_1(x, y) = \exp(1 - (x + y)^2)$, $\Pi = [-1, 2] \times [-2, 2]$,
2. $u_2(x, y) = \sqrt{4 + xy}$, $\Pi = [0, 4] \times [0, 3]$,
3. $u_3(x, y) = 2/(1 + x^2 + y^2)$, $\Pi = [0, 3] \times [0, 4]$,
4. $u_4(x, y) = 1 + \cos(\pi xy)$, $\Pi = [0, 2] \times [0, 1]$,
5. $u_5(x, y) = (x^2 - 9)^2 + (y^2 - 4)^2$, $\Pi = [-3, 3] \times [-2, 2]$,
6. $u_6(x, y) = (x(3 - x))^2 - (y(3 - y))^2$, $\Pi = [0, 3] \times [0, 3]$.

Для успешного выполнения задания требуется:

1. пользуясь явным видом функции $u(x, y)$, определить правую часть уравнения Пуассона $F(x, y)$ и граничные условия $\varphi(x, y)$, $\psi(x, y)$;
2. с помощью равенств (9)-(18) собрать разностную схему для уравнения Пуассона с граничными условиями, заданными условиями задания;

3. разработать последовательный код программы, вычисляющий приближенное решение разностной схемы методом наименьших невязок, проверить точность схемы, выполнив расчеты на сгущающихся сетках
$$(M,N) = (20,20),\ (40,40),\ (80,80),\ (160,160);$$
4. используя средства библиотеки MPI, разработать параллельный код программы, вычисляющий приближенное решение разностной схемы методом наименьших невязок, проверить качество работы алгоритма, выполнив расчеты на сетке $(M,N) = (160,160)$ на одном, четырех и шестнадцати процессах;
5. провести исследование параллельных характеристик MPI-программы, выполнив расчеты на вычислительных комплексах IBM BlueGene/P и IBM Polus, необходимые для заполнения таблицы 1 и таблицы 2;
6. разработать гибридный MPI / OpenMP код программы, провести исследование параллельных характеристик гибридной программы и сравнить полученные результаты с программой, не использующей директивы OpenMP;
7. предоставить отчет по проделанной работе.

Отчет о выполнении задания должен содержать

- математическую постановку задачи;
- численные метод ее решения;
- краткое описание проделанной работы по созданию MPI программы и гибридной реализации MPI/OpenMP;
- результаты расчетов для разных размеров задач и на разном числе процессов (см. таблицу 1 и таблицу 2).
- рисунок точного решения и приближенного решения, полученного на сетке с наибольшим количеством узлов.

6 Литература.

1. А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. Уравнения математической физики. М. Изд. "Наука". 1977.
2. А.Н. Самарский, А.В. Гулин. Численные методы математической физики. М. Изд. "Научный мир". 2003.
3. Г.И. Марчук. Методы вычислительной математики. М. Изд. "Наука". 1989.
4. В.А. Ильин, Г.Д. Ким. Линейная алгебра и аналитическая геометрия. Изд. Московского университета. 2002.
5. IBM BlueGene/P, IBM Polus — http://hpc.cmc.msu.ru

7 Приложение.

Таблица 1: Таблица с результатами расчетов на ПВС IBM Blue Gene/P

Число процессоров N_p	Число точек сетки N^3	Время решения T	Ускорение S
128	500×500		
256	500×500		
512	500×500		
128	1000×1000		
256	1000×1000		
512	1000×1000		

Заполняется два экземпляра таблицы 1: один – для MPI программы, другой – для гибридной MPI/OpenMP программы.

Таблица 2: Таблица с результатами расчетов на ПВС IBM Polus

Число процессоров N_p	Число точек сетки N^3	Время решения T	Ускорение S
32	500×500		
64	500×500		
128	500×500		
32	1000×1000		
64	1000×1000		
128	1000×1000		

Таблица 3: Варианты заданий

Вариант	Граничные условия	Функция $u(x, y)$	Норма
1	набор (1)	$u_1(x, y)$	евклидова норма
2	набор (1)	$u_2(x, y)$	максимум норма
3	набор (2)	$u_6(x, y)$	евклидова норма
4	набор (2)	$u_6(x, y)$	максимум норма
5	набор (3)	$u_2(x, y)$	евклидова норма
6	набор (3)	$u_3(x, y)$	максимум норма
7	набор (4)	$u_5(x, y)$	евклидова норма
8	набор (4)	$u_5(x, y)$	максимум норма
9	набор (5)	$u_4(x, y)$	евклидова норма
10	набор (5)	$u_4(x, y)$	максимум норма
11	набор (6)	$u_3(x, y)$	евклидова норма
12	набор (6)	$u_1(x, y)$	максимум норма