

Задание по курсу «Суперкомпьютерное моделирование и технологии»

Октябрь 2021

Содержание

Содержание	1
1 Введение	1
2 Математическая постановка задачи	1
3 Разностная схема решения задачи.	2
4 Метод решения системы линейных алгебраических уравнений.	5
5 Задание практикума.	5
6 Литература.	7
7 Приложение.	8

1 Введение

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

- IBM Blue Gene/P,
- IBM Polus.

2 Математическая постановка задачи

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

$$\begin{aligned}\gamma_R &= \{(A_2, y), B_1 \leq y \leq B_2\}, & \gamma_L &= \{(A_1, y), B_1 \leq y \leq B_2\}, \\ \gamma_T &= \{(x, B_2), A_1 \leq x \leq A_2\}, & \gamma_B &= \{(x, B_1), A_1 \leq x \leq A_2\},\end{aligned}$$

рассматривается дифференциальное уравнение Пуассона с потенциалом

$$-\Delta u + q(x, y)u = F(x, y), \quad (1)$$

в котором оператор Лапласа

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

Для выделения единственного решения уравнение дополняется граничными условиями. На каждом отрезке границы прямоугольника Π задается условие одним из двух способов:

1. условия первого типа (условия Дирихле):

$$u(x, y) = \varphi(x, y); \quad (2)$$

2. условия третьего типа:

$$\left(k \frac{\partial u}{\partial n} \right)(x, y) + \alpha u(x, y) = \psi(x, y), \quad (3)$$

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 $\alpha \geq 0$ 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 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 Π определяется равномерная прямоугольная сетка $\bar{\omega}_h = \bar{\omega}_1 \times \bar{\omega}_2$, где

$$\bar{\omega}_1 = \{x_i = A_1 + ih_1, i = \overline{0, M}\}, \quad \bar{\omega}_2 = \{y_j = B_1 + jh_2, j = \overline{0, N}\}.$$

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 Γ .

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

$$[u, v] = \sum_{i=0}^M h_1 \sum_{j=0}^N h_2 \rho_{ij} u_{ij} v_{ij}, \quad \|u\|_E = \sqrt{[u, u]}. \quad (4)$$

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

$$\rho^{(1)}(x_i) = \begin{cases} 1, & 1 \leq i \leq M-1 \\ 1/2, & i = 0, i = M \end{cases} \quad \rho^{(2)}(y_j) = \begin{cases} 1, & 1 \leq j \leq N-1 \\ 1/2, & j = 0, j = N \end{cases}$$

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

$$Aw = B, \quad (5)$$

где $A : H \rightarrow H$ – оператор, действующий в пространстве сеточных функций, $B \in H$ – известная правая часть. Задача (5) называется разностной схемой. Решение этой задачи считается численным решением исходной дифференциальной задачи.

При построении разностной схемы следует аппроксимировать (приблизительно 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

$$-\Delta_h w_{ij} + q_{ij} w_{ij} = F_{ij}, \quad i = \overline{1, M-1}, \quad j = \overline{1, N-1}, \quad (6)$$

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

$$\begin{aligned} \Delta_h w_{ij} = & \frac{1}{h_1} \left(k(x_i + 0.5h_1, y_j) \frac{w_{i+1j} - w_{ij}}{h_1} - k(x_i - 0.5h_1, y_j) \frac{w_{ij} - w_{i-1j}}{h_1} \right) + \\ & + \frac{1}{h_2} \left(k(x_i, y_j + 0.5h_2) \frac{w_{ij+1} - w_{ij}}{h_2} - k(x_i, y_j - 0.5h_2) \frac{w_{ij} - w_{ij-1}}{h_2} \right). \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} w_{x,ij} &= \frac{w_{i+1j} - w_{ij}}{h_1}, & w_{\bar{x},ij} &= w_{x,i-1j} = \frac{w_{ij} - w_{i-1j}}{h_1}, \\ w_{y,ij} &= \frac{w_{ij+1} - w_{ij}}{h_2}, & w_{\bar{y},ij} &= w_{y,ij-1} = \frac{w_{ij} - w_{ij-1}}{h_2}, \end{aligned}$$

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

$$\Delta_h w_{ij} = (aw_{\bar{x}})_{x,ij} + (bw_{\bar{y}})_{y,ij}.$$

Краевые условия первого типа аппроксимируются точно равенством

$$w_{ij} = \varphi(x_i, y_j). \quad (7)$$

Переменные w_{ij} , заданные равенством (7), исключаются из разностной схемы, а соответствующие узлы $P_{ij}(x_i, y_j)$ – из расчетной сетки $\bar{\omega}_h$. В скалярном произведении (4) слагаемые, отвечающие данным граничным узлам, считаются равными нулю.

Аппроксимация граничных условий третьего типа на правой и левой сторонах прямоугольника имеет вид:

$$\begin{aligned} (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{Mj} + (q_{Mj} + 2\alpha_R/h_1)w_{Mj} - (bw_{\bar{y}})_{y,Mj} &= F_{Mj} + (2/h_1)\psi_{Mj}, \\ -(2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{1j} + (q_{0j} + 2\alpha_L/h_1)w_{0j} - (bw_{\bar{y}})_{y,0j} &= F_{0j} + (2/h_1)\psi_{0j}, \quad j = \overline{1, N-1}. \end{aligned} \quad (8)$$

На верхней и нижней сторонах соответственно имеем:

$$\begin{aligned} (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{iN} + (q_{iN} + 2\alpha_T/h_2)w_{iN} - (aw_{\bar{x}})_{x,iN} &= F_{iN} + (2/h_2)\psi_{iN}, \\ -(2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{i1} + (q_{i0} + 2\alpha_B/h_2)w_{i0} - (aw_{\bar{x}})_{x,i0} &= F_{i0} + (2/h_2)\psi_{i0}, \quad i = \overline{1, M-1}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь $\alpha_R, \alpha_L, \alpha_T, \alpha_B$ – параметры в граничных условиях третьего типа, которые мы будем считать неизменными вдоль отрезков $\gamma_R, \gamma_L, \gamma_T, \gamma_B$ соответственно.

Сеточных уравнений (6)-(9) недостаточно, чтобы определить разностную схему для задачи с граничными условиями (3). Требуются сеточные уравнения для угловых точек прямоугольника П. Они имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} -(2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{10} - (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{01} + (q_{00} + 2\alpha_L/h_1 + 2\alpha_B/h_2)w_{00} = \\ = F_{00} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{00} \end{aligned} \quad (10)$$

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

$$\begin{aligned} (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{M0} - (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{M1} + (q_{M0} + 2\alpha_R/h_1 + 2\alpha_B/h_2)w_{M0} = \\ = F_{M0} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{M0} \end{aligned} \quad (11)$$

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

$$\begin{aligned} (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{MN} + (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{MN} + (q_{MN} + 2\alpha_R/h_1 + 2\alpha_T/h_2)w_{MN} = \\ = F_{MN} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{MN} \end{aligned} \quad (12)$$

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

$$\begin{aligned} -(2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{1N} + (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{0N} + (q_{0N} + 2\alpha_L/h_1 + 2\alpha_T/h_2)w_{0N} = \\ = F_{0N} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{0N} \end{aligned} \quad (13)$$

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

Замечание. Разностные схемы (5), аппроксимирующие все описанные выше краевые задачи для уравнения Пуассона с положительным потенциалом, обладают самосопряженным и положительно определенным оператором A и имеют единственное решение при любой правой части.

Пример аппроксимации краевой задачи. Пользуясь равенствами (6)-(13), соберем разностную схему для уравнения Пуассона с граничными условиями смешанного типа. Предположим, что на участках границы γ_R и γ_L заданы краевые условия третьего типа, на участке γ_B – условие Дирихле, на участке γ_T – условия Неймана. Во всех внутренних узлах сетки численное решение удовлетворяет равенству (6). На правой и левой сторонах прямоугольника используем условия (8), на верхней стороне имеем первое из равенств (9) при $\alpha_T = 0$. Эти уравнения справедливы во всех граничных точках, за исключением угловых. К полученной системе уравнений следует добавить равенства (12) и (13) – условия, которым удовлетворяет численное решение в вершинах (A_1, B_2) и (A_2, B_2) прямоугольника. Всюду на нижней границе решение определено равенством (7). Переменные w_{i0} , $i = 0, 1, 2, \dots, M$ исключаются из полученных ранее уравнений и система принимает вид:

$$\begin{aligned} -\Delta_h w_{ij} + q_{ij} w_{ij} &= F_{ij}, \quad i = \overline{1, M-1}, \quad j = \overline{2, N-1}, \\ -(aw_{\bar{x}})_{x,i1} - (1/h_2)((bw_{\bar{y}})_{i2} - (1/h_2)b_{i1}w_{i1}) + q_{i1}w_{i1} &= F_{i1} + (1/h_2^2)b_{i1}\varphi_{i0}, \quad i = \overline{1, M-1}, \\ (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{Mj} + (q_{Mj} + 2\alpha_R/h_1)w_{Mj} - (bw_{\bar{y}})_{y,Mj} &= F_{Mj} + (2/h_1)\psi_{Mj}, \quad j = \overline{2, N-1}, \\ -(2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{1j} + (q_{0j} + 2\alpha_L/h_1)w_{0j} - (bw_{\bar{y}})_{y,0j} &= F_{0j} + (2/h_1)\psi_{0j}, \quad j = \overline{2, N-1}, \\ (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{iN} + q_{iN}w_{iN} - (aw_{\bar{x}})_{x,iN} &= F_{iN} + (2/h_2)\psi_{iN}, \quad i = \overline{1, M-1}, \\ (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{MN} + (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{MN} + (q_{MN} + 2\alpha_R/h_1)w_{MN} &= F_{MN} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{MN}, \\ -(2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{1N} + (2/h_2)(bw_{\bar{y}})_{0N} + (q_{0N} + 2\alpha_L/h_1)w_{0N} &= F_{0N} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{0N}, \\ (2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{M1} + (q_{M1} + 2\alpha_R/h_1)w_{M1} - (1/h_2)((bw_{\bar{y}})_{M2} - (1/h_2)b_{M1}w_{M1}) &= \\ &= F_{M1} + (2/h_1)\psi_{M1} + (1/h_2^2)b_{M1}\varphi_{M0}, \\ -(2/h_1)(aw_{\bar{x}})_{11} + (q_{01} + 2\alpha_L/h_1)w_{01} - (1/h_2)((bw_{\bar{y}})_{02} - (1/h_2)b_{01}w_{01}) &= \\ &= F_{01} + (2/h_1)\psi_{01} + (1/h_2^2)b_{01}\varphi_{00}. \end{aligned}$$

Эти соотношения представляют собой систему линейных алгебраических уравнений с числом уравнений равным числу неизвестных и определяют единственным образом неизвестные значения w_{ij} , $i = 0, 1, 2, \dots, M$, $j = 1, 2, \dots, N$. Систему можно представить в операторном виде (5), в котором оператор A определен левой частью линейных уравнений, функция B – правой частью.

4 Метод решения системы линейных алгебраических уравнений.

Приближенное решение системы уравнений (5) для сформулированных выше краевых задач может быть получено итерационным методом наименьших невязок. Этот метод позволяет получить последовательность сеточных функций $w^{(k)} \in H$, $k = 1, 2, \dots$, сходящуюся по норме пространства H к решению разностной схемы, т.е.

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

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:

$$w_{ij}^{(k+1)} = w_{ij}^{(k)} - \tau_{k+1} r_{ij}^{(k)}, \quad (14)$$

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

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

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 (5) можно проводить в других нормах пространства сеточных функций, например, в максимум норме

$$\|w\|_C = \max_{x \in \bar{\omega}_h} |w(x)|. \quad (15)$$

Константу ε для данной задачи предлагается взять равной 10^{-6} .

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 восстановить 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. $u_3(x, y) = 2/(1 + x^2 + y^2)$, $\Pi = [-2, 3] \times [-1, 4]$,

4. $u_4(x, y) = 1 + \cos(\pi xy)$, $\Pi = [0, 2] \times [0, 1]$,

Коэффициент $k(x, y)$ можно выбрать из набора функций:

$$k_1(x, y) = 1, k_2(x, y) = 4 + x, k_3(x, y) = 4 + x + y, k_4(x, y) = 1 + (x + y)^2.$$

В качестве потенциала следует взять одну из функций:

$$q_0(x, y) = 0, q_1(x, y) = 1, q_2(x, y) = (x + y)_+, q_3(x, y) = (x + y)^2,$$

где

$$(g(t))_+ = \begin{cases} g(t), & \text{если } g(t) \geq 0, \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Для успешного выполнения задания требуется:

1. пользуясь явным видом функций $u(x, y)$, $k(x, y)$, $q(x, y)$ определить правую часть уравнения Пуассона $F(x, y)$ и граничные условия $\varphi(x, y)$, $\psi(x, y)$;
2. с помощью равенств (6)-(13) 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. разработать и реализовать алгоритм разбиения расчетной области Π на домены (под-области) Π_{ij} так, чтобы
 - отношение количества узлов по переменным x и y в каждом домене принадлежало диапазону $[1/2, 2]$,
 - количество узлов по переменным x и y любых двух доменов отличалось не более, чем на единицу.
5. 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, провести сравнение с последовательным вариантом алгоритма.
6. 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;
7. разработать гибридный MPI / OpenMP код программы, провести исследование параллельных характеристик гибридной программы и сравнить полученные результаты с программой, не использующей директивы OpenMP;
8. 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 $M \times N$	Время решения T	Ускорение S
128	500×1000		
256	500×1000		
512	500×1000		
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 $M \times N$	Время решения T	Ускорение S
4	500×500		
8	500×500		
16	500×500		
32	500×500		
4	500×1000		
8	500×1000		
16	500×1000		
32	500×1000		

Таблица 2 заполняется только для MPI реализации программы. Гибридный код на системе IBM Polus запускать не требуется.

Таблица 3: Варианты заданий

Вариант задания	Граничные условия				Решение $u(x,y)$	Коэфф. $k(x,y)$	Потенциал $q(x,y)$
	γ_R	γ_L	γ_T	γ_B			
1	1 тип	1 тип	1 тип	1 тип	$u_1(x,y)$	$k_2(x,y)$	$q_3(x,y)$
2	1 тип	1 тип	1 тип	3 тип	$u_2(x,y)$	$k_3(x,y)$	$q_2(x,y)$
3	1 тип	1 тип	3 тип	3 тип	$u_3(x,y)$	$k_4(x,y)$	$q_1(x,y)$
4	3 тип	1 тип	3 тип	1 тип	$u_4(x,y)$	$k_3(x,y)$	$q_0(x,y)$
5	3 тип	3 тип	3 тип	1 тип	$u_3(x,y)$	$k_2(x,y)$	$q_1(x,y)$
6	3 тип	3 тип	3 тип	3 тип	$u_2(x,y)$	$k_1(x,y)$	$q_2(x,y)$
7	2 тип	2 тип	2 тип	1 тип	$u_1(x,y)$	$k_2(x,y)$	$q_3(x,y)$
8	3 тип	3 тип	2 тип	2 тип	$u_2(x,y)$	$k_3(x,y)$	$q_2(x,y)$
9	2 тип	2 тип	2 тип	2 тип	$u_3(x,y)$	$k_4(x,y)$	$q_1(x,y)$
10	3 тип	2 тип	3 тип	2 тип	$u_4(x,y)$	$k_3(x,y)$	$q_0(x,y)$

Замечание. В краевых условиях третьего типа числа α_R , α_L , α_T , α_B всюду считать равными единице. Краевым условиям второго типа соответствуют нулевые значения параметров.