Базовое задание 2.2 по курсу «Суперкомпьютерное моделирование и технологии»

Содержание

1 Введение

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

1. IBM Blue Gene/P,
2. «Ломоносов»

2 Математическая постановка дифференциальной задачи

В прямоугольной области

$$\Pi = [A_1, A_2] \times [B_1, B_2]$$

требуется найти дважды гладкую функцию $u = u(x, y)$, удовлетворяющую дифференциальному уравнению

$$-\Delta u = F(x, y), \quad A_1 < x < A_2,\ B_1 < y < B_2 \tag{1}$$

и дополнительному условию

$$u(x,y) = \varphi(x,y) \tag{2}$$

во всех граничных точках (x,y) прямоугольника. Оператор Лапласа Δ определен равенством:

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

Функции $F(x,y)$, $\varphi(x,y)$ считаются известными и определяются вариантом задания.

3 Разностная схема решения задачи.

В расчетной области Π определяется прямоугольная сетка

$$\bar{\omega}_h = \{(x_i, y_j),\ i = 0,1,2,\dots,N_1,\ j = 0,1,2,\dots,N_2\},$$

где $A_1 = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{N_1} = A_2$ – разбиение отрезка $[A_1, A_2]$ оси (ox),

$B_1 = y_0 < y_1 < y_2 < \ldots < y_{N_2} = B_2$– разбиение отрезка $[B_1, B_2]$ оси (oy).

Через ω_h обозначим множество внутренних, а через γ_h — множество граничных узлов сетки $\bar{\omega}_h$. Пусть $h_i^{(1)} = x_{i+1} - x_i$, $i = 0,1,2,\dots,N_1-1$, $h_j^{(2)} = y_{j+1} - y_j$, $j = 0,1,2,\dots,N_2-1$ – переменный шаг сетки по оси абсцисс и ординат соответственно. Средние шаги сетки определяются равенствами:

$$\hbar_i^{(1)} = 0.5\big(h_i^{(1)} + h_{i-1}^{(1)}\big),\ \hbar_j^{(2)} = 0.5\big(h_j^{(2)} + h_{j-1}^{(2)}\big).$$

Рассмотрим линейное пространство H функций, заданных на сетке ω_h. Будем считать, что в пространстве H задано скалярное произведение и евклидова норма

$$\big(u, v\big) = \sum_{i=1}^{N_1-1} \sum_{j=1}^{N_2-1} \hbar_i^{(1)} \hbar_j^{(2)} u_{i\,j} v_{i\,j}, \quad \|u\| = \sqrt{(u,u)}, \tag{3}$$

где $u_{i\,j} = u(x_i, y_j)$, $v_{i\,j} = v(x_i, y_j)$ – любые функции из пространства H.

Для аппроксимации уравнения Пуасона (1) воспользуемся пятиточечным разностным оператором Лапласа, который во внутренних узлах сетки определяется равенством:

$$-\Delta_h p_{i\,j} = \frac{1}{\hbar_i^{(1)}} \left(\frac{p_{i\,j} - p_{i-1\,j}}{h_{i-1}^{(1)}} - \frac{p_{i+1\,j} - p_{i\,j}}{h_i^{(1)}} \right) + \frac{1}{\hbar_j^{(2)}} \left(\frac{p_{i\,j} - p_{i\,j-1}}{h_{j-1}^{(2)}} - \frac{p_{i\,j+1} - p_{i\,j}}{h_j^{(2)}} \right).$$

Здесь предполагается, что функция $p = p(x_i, y_j)$ определена во всех узлах сетки $\bar{\omega}_h$.

Приближенным решением задачи (1), (2) называется функция $p = p(x_i, y_j)$, удовлетворяющая уравнениям

$$\begin{aligned} -\Delta_h p_{i\,j} &= F(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \omega_h, \\ p_{i\,j} &= \varphi(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \gamma_h. \end{aligned} \tag{4}$$

Эти соотношения представляют собой систему линейных алгебраических уравнений с числом уравнений равным числу неизвестных и определяют единственным образом неизвестные значения $p_{i\,j}$. Совокупность уравнений (4) называется разностной схемой для задачи (1), (2).

4 Метод решения системы линейных алгебраических уравнений.

Приближенное решение системы уравнений (4) может быть получено итерационным методом скорейшего спуска. В этом методе начальное приближение

$$p_{i\,j}^{(0)} = \varphi(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \gamma_h,$$

во внутренних узлах сетки $p_{i\,j}^{(0)}$ – любые числа. Метод является одношаговым. Итерация $p^{(k+1)}$ вычисляется по итерации $p^{(k)}$ согласно равенствам:

$$p_{i\,j}^{(k+1)} = p_{i\,j}^{(k)} - \tau_{k+1} r_{i\,j}^{(k)},$$

где невязка

$$\begin{aligned} &r_{i\,j}^{(k)} = -\Delta_h p_{i\,j}^{(k)} - F_(x_i, y_j), \quad (x_i, y_j) \in \omega_h, \\ &r_{i\,j}^{(k)} = 0, \quad (x_i, y_j) \in \gamma_h. \end{aligned} \tag{5}$$

Итерационный параметр

$$\tau_{k+1} = \frac{\big(r^{(k)}, r^{(k)}\big)}{\big(-\Delta_h r^{(k)}, r^{(k)}\big)}.$$

Известно, что с увеличением номера итерации k последовательность сеточных функций $p^{(k)}$ сходится к точному решению p задачи (4) по норме пространства H, то есть

$$\|p - p^k\| \to +\infty, \quad k \to +\infty.$$

Существенно большей скоростью сходимости обладает метод сопряженных градиентов. Начальное приближение $p^{(0)}$ и первая итерация $p^{(1)}$ вычисляются так же, как и в методе скорейшего спуска. Последующие итерации осуществляются по формулам:

$$p_{i\,j}^{(k+1)} = p_{i\,j}^{(k)} - \tau_{k+1} g_{i\,j}^{(k)}, \quad k = 1, 2, \ldots$$

Здесь

$$\tau_{k+1} = \frac{\big(r^{(k)}, g^{(k)}\big)}{\big(-\Delta_h g^{(k)}, g^{(k)}\big)},$$

вектор

$$\begin{aligned} &g_{i\,j}^{(k)} = r_{i\,j}^{(k)} - \alpha_k g_{i\,j}^{(k-1)}, \quad k = 1, 2, \ldots, \\ &g_{i\,j}^{(0)} = r_{i\,j}^{(0)}, \end{aligned}$$

коэффициент

$$\alpha_k = \frac{\big(-\Delta_h r^{(k)}, g^{(k-1)}\big)}{\big(-\Delta_h g^{(k-1)}, g^{(k-1)}\big)}.$$

Вектор невязки $r^{(k)}$ вычисляется согласно равенствам (5). Итерационный процесс останавливается, как только

$$\|p^{(n)} - p^{(n-1)}\| < \varepsilon, \tag{6}$$

где ε – заранее выбранное положительное число. Заметим, что в последнем неравенстве вместо евклидовой сеточной нормы можно использовать любую другую норму пространства H, например, максимум-норму:

$$\|p\| = \max_{\substack{0<i<N_1 \\ 0<j<N_2}} \big|p(x_i, y_j)\big|. \tag{7}$$

5 Задание.

Предлагается следующий набор правых частей и граничных условий для дифференциальной задачи (1), (2):

1. Правая часть и граничное условие
$$F(x,y) = \frac{x^2+y^2}{(1+xy)^2}, \quad \varphi(x,y) = \ln(1+xy),$$
соответственно, прямоугольник $\Pi = [0,3] \times [0,3]$.

2. Правая часть и граничное условие
$$F(x,y) = (x^2+y^2)\sin(xy), \quad \varphi(x,y) = 1+\sin(xy),$$
соответственно, прямоугольник $\Pi = [0,2] \times [0,2]$.

3. Правая часть и граничное условие
$$F(x,y) = (x^2+y^2)\sin(xy), \quad \varphi(x,y) = 1+\sin(xy),$$
соответственно, прямоугольник $\Pi = [-2,2] \times [-2,2]$.

4. Правая часть и граничное условие
$$F(x,y) = 4(1-2(x+y)^2)\exp(1-(x+y)^2), \quad \varphi(x,y) = \exp(1-(x+y)^2),$$
соответственно, прямоугольник $\Pi = [0,2] \times [0,2]$.

5. Правая часть и граничное условие
$$F(x,y) = 4(1-2(x+y)^2)\exp(1-(x+y)^2), \quad \varphi(x,y) = \exp(1-(x+y)^2),$$
соответственно, прямоугольник $\Pi = [-2,2] \times [-2,2]$.

6. Правая часть и граничное условие
$$F(x,y) = 4(2-3x^2-3y^2), \quad \varphi(x,y) = (1-x^2)^2+(1-y^2)^2,$$
соответственно, прямоугольник $\Pi = [0,1] \times [0,1]$.

7. Правая часть и граничное условие
$$F(x,y) = 4(2-3x^2-3y^2), \quad \varphi(x,y) = (1-x^2)^2+(1-y^2)^2,$$
соответственно, прямоугольник $\Pi = [-1,1] \times [-1,1]$.

8. Правая часть и граничное условие
$$F(x,y) = 2(x^2+y^2)(1-2x^2y^2)\exp(1-x^2y^2), \quad \varphi(x,y) = \exp(1-x^2y^2),$$
соответственно, прямоугольник $\Pi = [0,2] \times [0,2]$.

9. Правая часть и граничное условие
$$F(x,y) = 2(x^2+y^2)(1-2x^2y^2)\exp(1-x^2y^2), \quad \varphi(x,y) = \exp(1-x^2y^2),$$
соответственно, прямоугольник $\Pi = [-2,2] \times [-2,2]$.

10. Правая часть и граничное условие

$$F(x,y) = \frac{x^2+y^2}{4(4+xy)^{3/2}}, \quad \varphi(x,y) = \sqrt{4+xy},$$

соответственно, прямоугольник $\Pi = [0,4] \times [0,4]$.

11. Правая часть и граничное условие

$$F(x,y) = \frac{8(1-x^2-y^2)}{(1+x^2+y^2)^3}, \quad \varphi(x,y) = \frac{2}{1+x^2+y^2},$$

соответственно, прямоугольник $\Pi = [0,2] \times [0,2]$.

12. Правая часть и граничное условие

$$F(x,y) = \frac{8(1-x^2-y^2)}{(1+x^2+y^2)^3}, \quad \varphi(x,y) = \frac{2}{1+x^2+y^2},$$

соответственно, прямоугольник $\Pi = [-2,2] \times [-2,2]$.

Для аппроксимации дифференциальной задачи предлагается использовать равномерную прямоугольную сетку:

$$h_i^{(1)} = h_1,\ i = 0,1,2,\ldots,N_1-1, \quad h_j^{(2)} = h_2,\ j = 0,1,2,\ldots,N_2-1, \tag{8}$$

либо неравномерную сетку, определенную равенствами:

$$h_i^{(1)} = q h_{i-1}^{(1)}\ i = 1,2,\ldots,N_1-1, \quad h_j^{(2)} = q h_{j-1}^{(2)},\ j = 1,2,\ldots,N_2-1, \tag{9}$$

где $q > 0$ – фиксированное число. Конкретный вид сетки определяется вариантом задания.

Приближенное решение разностной схемы (4) следует вычислять методом сопряженных градиентов. Для остановки итерационного процесса предлагается использовать условие (6), положив $\varepsilon = 10^{-4}$. Векторная норма может быть определена равенствами (3) либо соотношением (7) в зависимости от варианта задания.

Для каждого из перечисленных выше наборов функций $F(x,y)$, $\varphi(x,y)$ требуется
– подобрать точное решение задачи Дирихле,
– методом сопряженных градиентов построить приближенное решение на сетке с числом узлов $N_1 = N_2 = 1000$, определить погрешность решения

$$\psi = \|u(x_i, y_j) - p_{ij}\|,$$

– методом сопряженных градиентов построить приближенное решение на сетке с числом узлов $N_1 = N_2 = 2000$ и вновь определить погрешность решения.

Вычисления необходимо проводить на многопроцессорных вычислительных комплексах IBM Blue Gene/P и «Ломоносов», используя различное количество узлов сетки, указанное в требованиях к отчету. Для каждого расчета определить его продолжительность и ускорение по сравнению с аналогичным расчетом на одном вычислительном узле.

6 Требования к отчету

Для того, чтобы успешно сдать задание, необходимо
- уверенно ориентироваться в программном коде;
- понимать семантику всех используемых в коде функций MPI и директив OpenMP;

Таблица 1: Варианты заданий

Вариант	$F(x,y)$, $\varphi(x,y)$	Сетка	Норма
1	набор 1	равномерная	евклидова
2	набор 1	равномерная	максимум-норма
3	набор 1	неравномерная ($q = 3/2$)	евклидова
4	набор 1	неравномерная ($q = 3/2$)	максимум-норма
5	набор 2	равномерная	евклидова
6	набор 2	равномерная	максимум-норма
7	набор 2	неравномерная ($q = 2/3$)	евклидова
8	набор 2	неравномерная ($q = 2/3$)	максимум-норма
9	набор 3	равномерная	евклидова
10	набор 3	равномерная	максимум-норма
11	набор 4	равномерная	евклидова
12	набор 4	равномерная	максимум-норма
13	набор 4	неравномерная ($q = 3/2$)	евклидова
14	набор 4	неравномерная ($q = 3/2$)	максимум-норма
15	набор 5	равномерная	евклидова
16	набор 5	равномерная	максимум-норма
17	набор 6	равномерная	евклидова
18	набор 6	равномерная	максимум-норма
19	набор 6	неравномерная ($q = 3/2$)	евклидова
20	набор 6	неравномерная ($q = 3/2$)	максимум-норма
21	набор 7	равномерная	евклидова
22	набор 7	равномерная	максимум-норма
23	набор 8	равномерная	евклидова
24	набор 8	равномерная	максимум-норма
25	набор 8	неравномерная ($q = 3/2$)	евклидова
26	набор 8	неравномерная ($q = 3/2$)	максимум-норма
27	набор 9	равномерная	евклидова
28	набор 9	равномерная	максимум-норма
29	набор 10	равномерная	евклидова
30	набор 10	равномерная	максимум-норма
31	набор 10	неравномерная ($q = 3/2$)	евклидова
32	набор 10	неравномерная ($q = 3/2$)	максимум-норма
33	набор 11	равномерная	евклидова
34	набор 11	равномерная	максимум-норма
35	набор 11	неравномерная ($q = 3/2$)	евклидова
36	набор 11	неравномерная ($q = 3/2$)	максимум-норма
37	набор 12	равномерная	евклидова
38	набор 12	равномерная	максимум-норма

- предоставить отчет с результатами исследования параллельных характеристик программы;
- предоставить программный код.

Исследование параллельных характеристик MPI-программы необходимо провести на всех ПВС. На ПВС Blue Gene/P также необходимо провести исследование параллельных характеристик гибридной программы MPI/OpenMP и сравнить полученные результаты с программой, не используещей директивы OpenMP.

Отчет о выполнении задания должен содержать

- математическую постановку задачи;
- численные метод ее решения;
- краткое описание проделанной работы по созданию гибридной реализации MPI/OpenMP;
- результаты расчетов для разных размеров задач и на разном числе процессоров (заносятся в таблицу – см. ниже).
- рисунок точного решения, а также приближенного решения, построенного на сетке 2000×2000 узлов.

6.1 IBM Blue Gene/P

Расчеты должны быть проведены для следующего числа процессоров: 128, 256 и 512. Количество узлов: 1000×1000 и 2000×2000 по осям абсцисс и ординат соответственно. MPI-версию следует запускать в режиме SMP, гибридную версию MPI/OpenMP — в режиме SMP, но использовать при этом не четыре, а только три процессорных ядра.

Таблица 2: 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	1000×1000		
256	1000×1000		
512	1000×1000		
128	2000×2000		
256	2000×2000		
512	2000×2000		

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

6.2 «Ломоносов»

Расчеты должны быть проведены для следующего числа процессоров: 8, 16, 32, 64 и 128 на сетках с числом узлов 1000×1000 и 2000×2000.

Таблица 3: Таблица с результатами расчетов на ПВС «Ломоносов»

Число процессоров N_p	Число точек сетки N^3	Время решения T	Ускорение S
8	1000×1000		
16	1000×1000		
32	1000×1000		
128	1000×1000		
8	2000×2000		
16	2000×2000		
32	2000×2000		
128	2000×2000		

7 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.