

Московский Государственный Университет имени
М.В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики

Отчёт по теоретическому заданию в рамках курса
«Суперкомпьютерное моделирование и технологии»
Численное решение краевой задачи для уравнения
Пуассона

Выполнил:
Ларочкин Петр Викторович
618/1 группа
Вариант 6

Москва 2022

Содержание

1	Математическая постановка задачи	2
2	Численный метод решения задачи	3
3	Краткое описание проделанной работы по созданию <i>MPI</i> программы и гибридной реализации <i>MPI/OpenMP</i>	6
4	Результаты расчетов для разных размеров задач и на разном числе процессов	6
5	Рисунок точного решения и приближенного решения	7

1 Математическая постановка задачи

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

$$\gamma_R = \{(A_2, y), B_1 \leq B_2\}, \gamma_L = \{(A_1, y), B_1 \leq B_2\}$$

$$\gamma_R = \{(x, B_2), A_1 \leq A_2\}, \gamma_L = \{(x, B_1), A_1 \leq A_2\}$$

рассматривается дифференциальное уравнение Пуассона с потенциалом

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

в котором оператор Лапласа

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

Для данной работы мне был предложен **вариант 6**, который соответствует следующим функциям: Аналитическое решение

$$u(x, y) = u_2(x, y) = \sqrt{(4 + xy)},$$

прямоугольник

$$\Pi = [0, 4] \times [0, 3],$$

функции

$$k(x, y) = k_1(x, y) = 1,$$

$$q(x, y) = q_2(x, y) = x + y.$$

Для выделения единственного решения уравнение дополняется граничными условиями. На каждом отрезке границы прямоугольника Π задается условие одним из трех способов. В **данном варианте** для всех границ прямоугольника применяется граничное условие третьего типа (n — нормаль):

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

Функции $F(x, y)$, $\phi(x, y)$, $\psi(x, y)$, коэффициент $k(x, y)$, потенциал $q(x, y)$ и параметр $\alpha = 1$ (предложено такое значение) считаются известными, функцию $u(x, y)$, удовлетворяющую уравнению и граничным условиям, определенным вариантом задания, требуется найти.

Подставим предложенные для этого варианта функции в уравнение Пуассона и граничные условия для нахождения функций $\psi(x, y)$ и $F(x, y)$. Получим:

$$F(x, y) = \frac{1}{4(4 + xy)^{\frac{3}{2}}}(x^2 + y^2) + (x + y)\sqrt{(4 + xy)},$$

$$\psi(x, y) = \begin{cases} \frac{y}{2\sqrt{(4+4y)}} + 2\sqrt{1+y} & \text{if } x = 4, y \in (0, 3) \\ -\frac{y}{4} + 2 & \text{if } x = 0, y \in (0, 3) \\ \frac{x}{2\sqrt{(4+3x)}} + \sqrt{4+3x} & \text{if } y = 3, x \in (0, 4) \\ -\frac{x}{4} + 2 & \text{if } y = 0, x \in (0, 4). \end{cases}$$

2 Численный метод решения задачи

Краевые задачи для уравнения Пуассона с потенциалом предлагается численно решать методом конечных разностей. В расчетной области Π определяется равномерная прямоугольная сетка $\omega_h = \bar{\omega}_1 \times \bar{\omega}_2$, где

$$\bar{\omega}_1 = \{x_i = A_1 + ih_1, i = \overline{0, M}\},$$

$$\bar{\omega}_2 = \{y_i = B_1 + ih_2, i = \overline{0, N}\}.$$

Здесь $h_1 = (A_2 - A_1)/M$, $h_2 = (B_2 - B_1)/N$. Через ω_h обозначим множество внутренних узлов сетки ω_h , т.е. множество узлов сетки прямоугольника, не лежащий на границе Γ . Рассмотрим линейное пространство H функций, зада

Рассмотрим линейное пространство H функций, заданных на сетке $\bar{\omega}_h$. Обозначим через ω_{ij} значение сеточной функции $\omega \in H$ в узле сетки $(x_i, y_j) \in \bar{\omega}_h$. Будем считать, что в пространстве H задано скалярное произведение и евклидова норма

$$[u, v] = \sum_{i=0}^M h_1 \sum_{j=0}^N h_2 \rho_{ij} u_{ij} v_{ij},$$

$$\|u\|_E = \sqrt{[u, u]}.$$

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

$$\rho^{(1)}(x_i) = \begin{cases} 1, & 1 \leq i \leq M-1 \\ \frac{1}{2}, & i = 0, i = M \end{cases}$$

$$\rho^{(2)}(y_j) = \begin{cases} 1, & 1 \leq j \leq N-1 \\ \frac{1}{2}, & j = 0, j = N \end{cases}$$

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

$$A\omega = B,$$

где $A : H \rightarrow H$ — оператор, действующий в пространстве сеточных функций, $B \in H$ — известная правая часть. Задача $A\omega = B$ 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

$$\Delta_h \omega_{ij} + q_{ij} \omega_{ij} = F_{ij}, i = \overline{1, M-1}, j = \overline{1, N-1},$$

в котором $F_{ij} = F(x_i, y_j)$, $q_{ij} = q(x_i, y_j)$, разностный оператор Лапласа, с учетом $k(x, y) = 1$

$$\Delta_h \omega_{ij} = \frac{1}{h_1} \left(\frac{\omega_{i+1j} - \omega_{ij}}{h_1} - \frac{\omega_{ij} - \omega_{i-1j}}{h_1} \right) + \frac{1}{h_2} \left(\frac{\omega_{ij+1} - \omega_{ij}}{h_2} - \frac{\omega_{ij} - \omega_{ij-1}}{h_2} \right)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{2}{h_1} \left(\frac{\omega_{Mj} - \omega_{M-1j}}{h_1} \right) + \left(q_{Mj} + \frac{2}{h_1} \right) \omega_{Mj} - \frac{1}{h_2} \left(\frac{\omega_{Mj+1} - \omega_{Mj}}{h_2} - \frac{\omega_{Mj} - \omega_{Mj-1}}{h_2} \right) &= F_{Mj} + \frac{2}{h_1} \psi_{Mj} \\ - \frac{2}{h_1} \left(\frac{\omega_{1j} - \omega_{0j}}{h_1} \right) + \left(q_{0j} + \frac{2}{h_1} \right) \omega_{0j} - \frac{1}{h_2} \left(\frac{\omega_{0j+1} - \omega_{0j}}{h_2} - \frac{\omega_{0j} - \omega_{0j-1}}{h_2} \right) &= F_{0j} + \frac{2}{h_1} \psi_{0j} \\ j &= \overline{1, N-1} \end{aligned}$$

На верхней и нижней сторонах соответственно имеем:

$$\begin{aligned} \frac{2}{h_2} \left(\frac{\omega_{iN} - \omega_{iN-1}}{h_2} \right) + \left(q_{iN} + \frac{2}{h_2} \right) \omega_{iN} - \frac{1}{h_1} \left(\frac{\omega_{i+1N} - \omega_{iN}}{h_1} - \frac{\omega_{iN} - \omega_{i-1N}}{h_1} \right) &= F_{iN} + \frac{2}{h_2} \psi_{iN} \\ - \frac{2}{h_2} \left(\frac{\omega_{i1} - \omega_{i0}}{h_2} \right) + \left(q_{i0} + \frac{2}{h_2} \right) \omega_{i0} - \frac{1}{h_1} \left(\frac{\omega_{i+10} - \omega_{i0}}{h_1} - \frac{\omega_{i0} - \omega_{i-10}}{h_1} \right) &= F_{i0} + \frac{2}{h_2} \psi_{i0} \\ i &= \overline{1, M-1} \end{aligned}$$

Построенный уравнений недостаточно, так как неизвестных больше. Требуются уравнения для угловых узлов:

$$\begin{aligned} - \frac{2}{h_1} \left(\frac{\omega_{10} - \omega_{00}}{h_1} \right) - \frac{2}{h_2} \left(\frac{\omega_{01} - \omega_{00}}{h_2} \right) + \left(q_{00} + \frac{2}{h_1} + \frac{2}{h_2} \right) \omega_{00} &= F_{00} + \left(\frac{2}{h_1} + \frac{2}{h_2} \right) \psi_{00} \\ \frac{2}{h_1} \left(\frac{\omega_{M0} - \omega_{M-10}}{h_1} \right) - \frac{2}{h_2} \left(\frac{\omega_{M1} - \omega_{M0}}{h_2} \right) + \left(q_{M0} + \frac{2}{h_1} + \frac{2}{h_2} \right) \omega_{M0} &= F_{M0} + \left(\frac{2}{h_1} + \frac{2}{h_2} \right) \psi_{M0} \\ \frac{2}{h_1} \left(\frac{\omega_{MN} - \omega_{M-1N}}{h_1} \right) - \frac{2}{h_2} \left(\frac{\omega_{MN} - \omega_{MN-1}}{h_2} \right) + \left(q_{MN} + \frac{2}{h_1} + \frac{2}{h_2} \right) \omega_{MN} &= F_{MN} + \left(\frac{2}{h_1} + \frac{2}{h_2} \right) \psi_{MN} \\ \frac{2}{h_1} \left(\frac{\omega_{1N} - \omega_{0N}}{h_1} \right) - \frac{2}{h_2} \left(\frac{\omega_{0N} - \omega_{0N-1}}{h_2} \right) + \left(q_{0N} + \frac{2}{h_1} + \frac{2}{h_2} \right) \omega_{0N} &= F_{0N} + \left(\frac{2}{h_1} + \frac{2}{h_2} \right) \psi_{0N} \end{aligned}$$

Здесь

$$\begin{aligned}\psi_{00} &= \frac{h_1\psi(A_1 + 0, B_1) + h_2\psi(A_1, B_1 + 0)}{h_1 + h_2} \\ \psi_{M0} &= \frac{h_1\psi(A_2 - 0, B_1) + h_2\psi(A_2, B_1 + 0)}{h_1 + h_2} \\ \psi_{MN} &= \frac{h_1\psi(A_2 - 0, B_2) + h_2\psi(A_2, B_2 - 0)}{h_1 + h_2} \\ \psi_{0N} &= \frac{h_1\psi(A_1 + 0, B_2) + h_2\psi(A_1, B_2 - 0)}{h_1 + h_2},\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}\psi(x_0 \pm 0, y) &= \lim_{x \rightarrow x_0 \pm 0} \psi(x, y) \\ \psi(x, y_0 \pm 0) &= \lim_{y \rightarrow y_0 \pm 0} \psi(x, y)\end{aligned}$$

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

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

Начальное приближение $\omega^{(0)}$ можно выбрать любым способом, например, равным нулю во всех точках расчетной сетки.

Метод является одношаговым. Итерация $\omega^{(k+1)}$ вычисляется по итерации $\omega^{(k)}$ согласно равенствам:

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

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

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

В качестве условия остановки итерационного процесса следует использовать неравенство

$$\|\omega^{(k+1)} - \omega^{(k)}\|_E < \epsilon,$$

где ϵ - положительное число, определяющее точность итерационного метода. Константу ϵ для данной задачи предлагается взять равной 10^{-6} .

3 Краткое описание проделанной работы по созданию *MPI* программы и гибридной реализации *MPI/OpenMP*

Построенная *MPI* программа на языке C решает поставленную задачу. При распараллеливании программы каждый процесс вычисляет свою область точки. Для того, чтобы грамотно распределить области между процессами применяются функции *MPI_Cart_create*, *MPI_Cart_coords*, *MPI_Cart_shift*, которые соответственно создают новый коммутатор, определяют координаты процесса в сетке процессов и определяют ранги «соседей». Особенностью данной задачи является то, что при обработке соответствующему каждому рангу области требуется информация о точках, принадлежащих соседнему рангу. Для этих целей в программу применяются *MPI_Send* и *MPI_Recv* функции для получения и отправки информации об этих точках. Также в процессе обработки необходимо вычислять скалярное произведение по всей области для этой цели используется *MPI_Allreduce*. Также данная функция используется для получения максимальной среди всех процессов ошибки для условия остановки.

Построение гибридной программы *MPI/openMP* строилось следующим образом: использовалась предыдущая *MPI* программа, которая была улучшена за счет распараллеливания используемых циклов. Для распараллеливания циклов *for* использовалась директива

```
#pragma omp parallel for default(shared) private(i, j) schedule(dynamic)
для циклов двойной вложенности,
#pragma omp parallel for default(shared) private(i или j) schedule(dynamic)
для обычных циклов,
#pragma omp parallel for default(shared) private(i, j)
reduction(+:local_sum) schedule(dynamic) для того, чтобы
собрать вместе в главном потоке результаты вычислений частичных сумм.
```

4 Результаты расчетов для разных размеров задач и на разном числе процессов

Выполнение последовательной программы решающей данное задание при $M = 500$, $N = 500$ заняло 316.84 секунды. А для $M=500$, $N=1000$ время и разница составили 1323.47 секунд. Максимум модуля разности между искомой функцией и численного решения на самой большой сетке $M=500$, $N = 1000$ составил 0.035. Значение ϵ решено было взять равным 10^{-6} . Ускорение считалось как отношение времени выполнения последовательной программы к времени выполнения параллельной программы на той же сетке $Boost = \frac{time(sequential)}{time(parallel)}$.

Число процессов <i>MPI</i>	Число точек сетки $M \times N$	Время решения (с)	Ускорение
4	500×500	108.57	2.91
8	500×500	106.15	2.97
16	500×500	30.22	10.46
32	500×500	132.86	2.37
4	500×1000	1028.24	1.28
8	500×1000	554.36	2.39
16	500×1000	195.22	6.78
32	500×1000	92.67	14.27

Таблица 1: Таблица с результатами расчетов на ПВС IBM Polus (MPI код).

Число процессов <i>MPI</i>	Количество ОМР- нитей в процессе	Число точек сетки $M \times N$	Время решения (с)	Ускорение
1	4	500×500	260.78	1.21
2	4	500×500	125.25	2.52
4	4	500×500	70.31	4.49
8	4	500×500	49.01	6.44
1	4	500×1000	984.41	1.34
2	4	500×1000	490.62	2.70
4	4	500×1000	306.07	4.32
8	4	500×1000	166.96	7.92

Таблица 2: Таблица с результатами расчетов на ПВС IBM Polus (MPI+OpenMP код).

5 Рисунок точного решения и приближенного решения

Графики аналитической и построенный численной функций неотличимы начиная с сеток $M=250$, $N=250$. Ниже приведены рисунки аналитического решения $u(x_i, y_j)$ (Рисунок 1), численного решения (Рисунок 2) $\omega(x_i, y_j)$ и рисунки их абсолютной разности $|\omega(x_i, y_j) - u(x_i, y_j)|$ (Рисунок 3 и Рисунок 4).

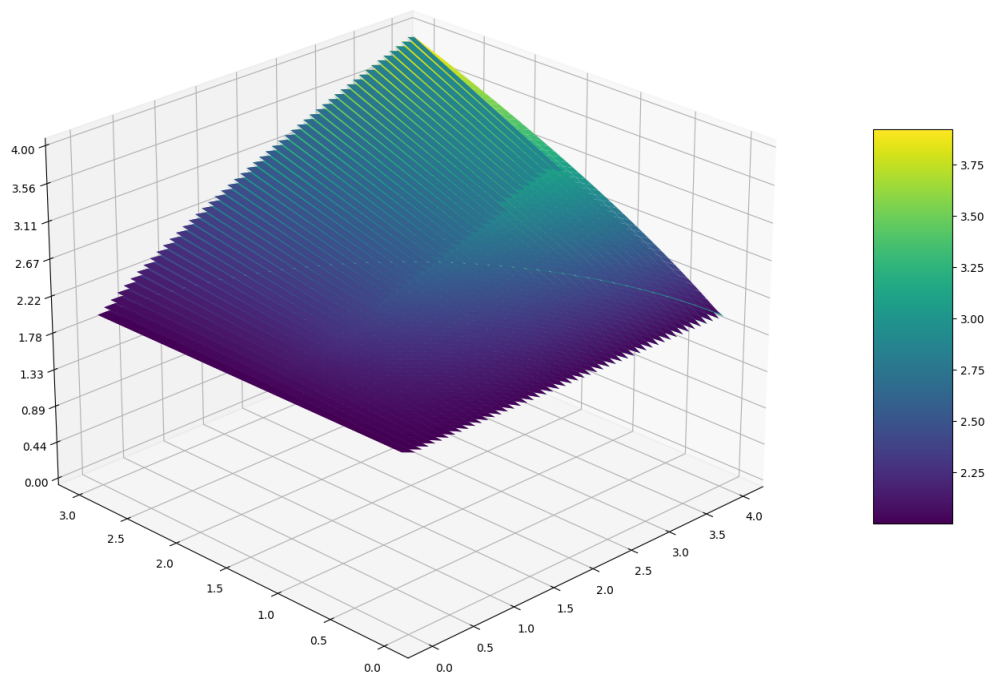


Рисунок 1. Аналитическое решение

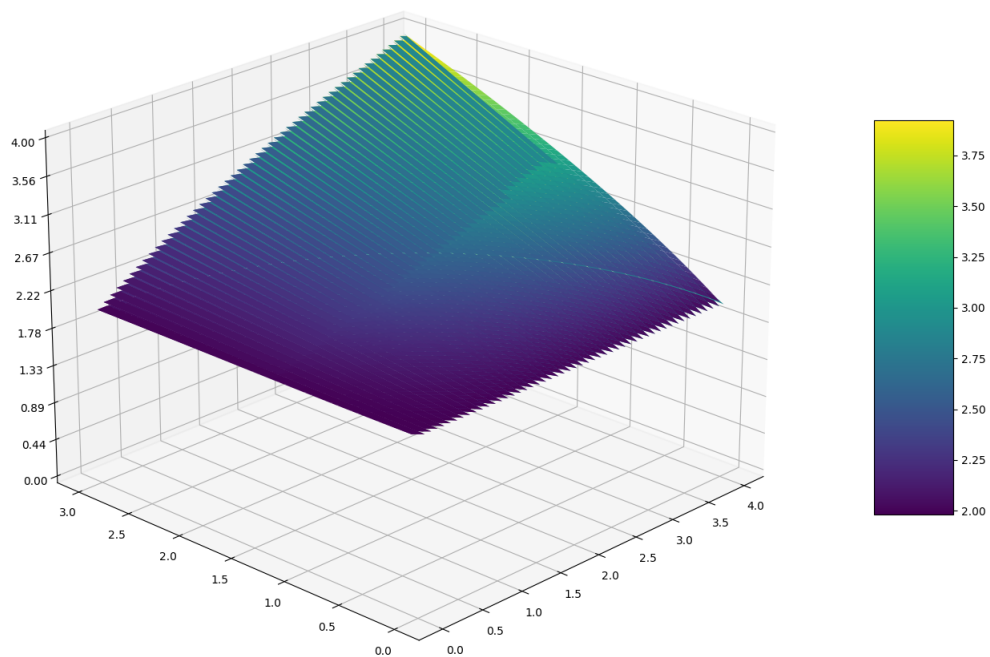


Рисунок 2. Численное решение

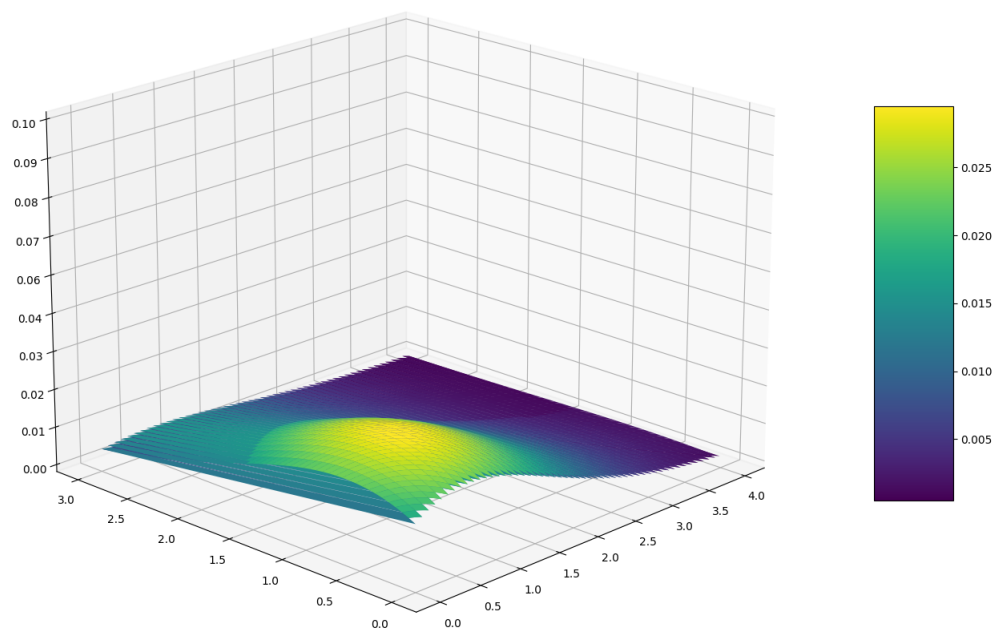


Рисунок 3. Модуль разницы между аналитическим и численным решениями

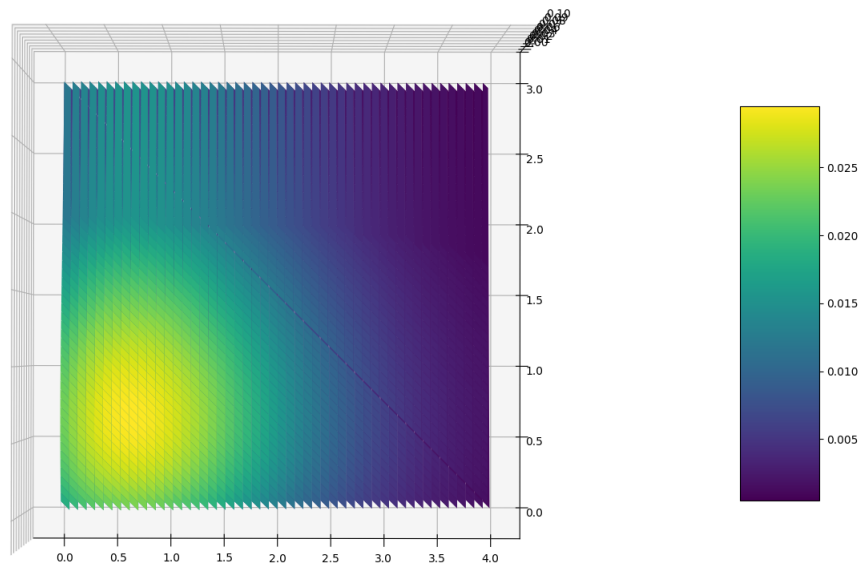


Рисунок 4. Модуль разницы между аналитическим и численным решениями (вид сверху)