Научно-технологический университет Сириус Математическое моделирование в биомедицине и нефтегазовом инжиниринге

# Решение трехмерного уравнения диффузии методом конечных разностей с использованием MPI

Выполнили: А.Медведев, К.Попова, А.Рамазанов Руководители: И.Н.Коньшин А.А.Легкий

> Сириус 2022

# Формулировка задачи диффузии

#### Уравнение

$$\delta U/\delta t - \operatorname{div}(\mathbb{D} \cdot \operatorname{grad} U) = f(x,y,z,t), (x,y,z) \in \Omega = [0;1]^3, t \in [0,1]$$

Начальное и граничное условия:

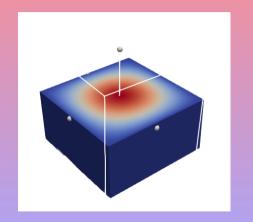
$$\begin{cases} U(x,y,z,t) = 0, & (\text{x,y,z}) \in \delta\Omega \\ U(x,y,z,t) = 0, & \text{t = 0} \end{cases}$$

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} 0.25 & 0 & 0 \\ 0 & 0.15 & 0 \\ 0 & 0 & 0.1 \end{pmatrix}$$

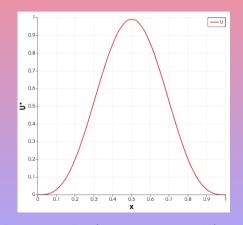
$$f(x,y,z,t) = (d_x + d_y + d_z)\sin(\pi x)\sin(\pi y)\sin(\pi z)$$

## Аналитическое решение

$$U^* = \sin(\pi x)\sin(\pi y)\sin(\pi z) * (1 - e^{-(d_x + d_y + d_z) \cdot \pi^2 \cdot t})$$

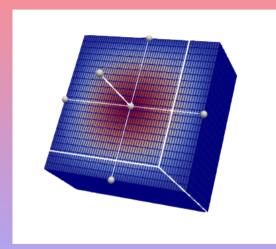


**Рисунок 1:** Визуализация аналитического решения в разрезе.Пакет Paraview



**Рисунок 2:** График зависимости U\* от x

## Визуализация полученного решения



**Рисунок 3:** Визуализация численного решения в разрезе

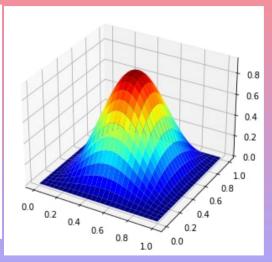


Рисунок 4: График зависимости U от x и y

#### Оптимальный порядок циклов

```
for (int l = 1; l * dt ≤ 1; l++) {
    for (unsigned k = 1; k < kk-1; ++k) {
        for (unsigned j = 1; j < m-1; ++j) {
            for (unsigned i = 1; i < n-1; ++i) {
```

#### Функции записи и считывания элемента массива

```
inline double get_u(double *const &u, int i, int j, int k) {
   return *(u + k * n * m + j * n + i);
}
```

```
inline void set_u(double *const &u, int i, int j, int k,
  double const &value) {
  *(u + k * n * m + j * n + i) = value;
}
```

Функция SWAP - обмен значений двух переменных, содержащих одинаковые типы данных

```
inline void swap(double *\double *
```

## Результаты работы последовательного кода

### Количество внутренних расчетных точек

$$N_{\rm x}=120, N_{\rm y}=60, N_{\rm z}=20$$

	Время	Ошибка	Шаг по времени
ПК	43.7819	0.000454328	0.000105572
Кластер, без оптимизации	104.854	0.000454328	0.000105572
Кластер, с оптимизацией	20.8667	0.000454328	0.000105572

## Результаты после использования MPI :min t = 0.24851, p = 80

