



Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Факультет вычислительной математики и кибернетики

Отчёт по третьему заданию в рамках курса «Суперкомпьютерное моделирование и технологии»

Вариант 6

Студентка 611 группы

М. А. Кулакова

Москва, 2022

1 Постановка задачи

Требуется методом конечных разностей приближенно решить краевую задачу для уравнения Пуассона с потенциалом в прямоугольной области. Задан прямоугольник $\Pi = [0, 4] \times [0, 3]$, граница Γ которого состоит из отрезков

$$\gamma_R = \{(4, y), 0 \leq y \leq 3\}, \gamma_L = \{(0, y), 0 \leq y \leq 3\}$$

$$\gamma_T = \{(x, 3), 0 \leq x \leq 4\}, \gamma_B = \{(x, 0), 0 \leq x \leq 4\}$$

рассматривается дифференциальное уравнение Пуассона с потенциалом

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

в котором оператор Лапласа

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

Для выделения единственного решения уравнение (1) дополняется граничными условиями.

В моем варианте на каждом отрезке границы прямоугольника Π задаются условия 3 типа в виде:

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

В задании принимаем, что для всех границ α постоянна и равна 1.

Функции $F(x, y), \psi(x, y), q(x, y), k(x, y)$ — известные. Необходимо найти функцию $u(x, y)$, удовлетворяющую уравнению (1) и введённым граничным условиям. При этом нормаль n не определена в угловых точках прямоугольника, поэтому краевое условие рассматривается только в тех точках, в которых нормаль существует.

2 Определение функций

Пользуясь явным видом функций $u(x, y), k(x, y), q(x, y)$ необходимо определить правую часть уравнения Пуассона $F(x, y)$ и граничные условия $\psi(x, y)$. В моем варианте они имеют следующий вид:

$$u(x, y) = \sqrt{4 + xy}, k(x, y) = 1, q(x, y) = x + y$$
$$F(x, y) = \frac{1}{4} \frac{x^2 + y^2}{\sqrt{(4 + xy)^3}} + (x + y) \sqrt{4 + xy}$$
$$\psi(x, y) = \begin{cases} \frac{\tilde{y}}{4\sqrt{1 + \tilde{y}}} + 2\sqrt{1 + \tilde{y}}, & x = 4, \tilde{y} \in (0, 3) \\ \frac{\tilde{x}}{2\sqrt{4 + 3\tilde{x}}} + \sqrt{4 + 3\tilde{x}}, & y = 3, \tilde{x} \in (0, 4) \\ -\frac{\tilde{y}}{4} + 2 & x = 0, \tilde{y} \in (0, 3) \\ -\frac{\tilde{x}}{4} + 2 & y = 0, \tilde{x} \in (0, 4) \end{cases}$$

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

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

Здесь $h_1 = (4 - 0)/M = 4/M$, $h_2 = (3 - 0)/N = 3/N$. 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

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

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

$$Aw = B,$$

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

При построении разностной схемы следует аппроксимировать 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

$$-\Delta_h w_{ij} + q_{ij} w_{ij} = F_{ij}, \quad i = \overline{1, M-1}, \quad j = \overline{1, N-1}, \quad (2)$$

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

$$a_{ij} = k(x_i - 0.5h_1, y_j), \quad b_{ij} = k(x_i, y_j - 0.5h_2).$$

В моей задаче $a_{ij} = b_{ij} = 1$

С учетом принятых обозначений разностный оператор Лапласа можно представить в более компактном и удобном виде

$$\Delta_h w_{ij} = \frac{1}{h_1}(w_{\bar{x},i+1j} - w_{\bar{x},ij}) + \frac{1}{h_2}(w_{\bar{y},ij+1} - w_{\bar{y},ij}) = (w_{\bar{x}})_{x,ij} + (w_{\bar{y}})_{y,ij}.$$

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

$$\begin{aligned} (2/h_1)(w_{\bar{x}})_{Mj} + (q_{Mj} + 2/h_1)w_{Mj} - (w_{\bar{y}})_{y,Mj} &= F_{Mj} + (2/h_1)\psi_{Mj}, \\ -(2/h_1)(w_{\bar{x}})_{1j} + (q_{0j} + 2/h_1)w_{0j} - (w_{\bar{y}})_{y,0j} &= F_{0j} + (2/h_1)\psi_{0j}, \quad j = \overline{1, N-1}. \end{aligned} \quad (3)$$

На верхней и нижней сторонах соответственно имеем:

$$\begin{aligned} (2/h_2)(w_{\bar{y}})_{iN} + (q_{iN} + 2/h_2)w_{iN} - (w_{\bar{x}})_{x,iN} &= F_{iN} + (2/h_2)\psi_{iN}, \\ -(2/h_2)(w_{\bar{y}})_{i1} + (q_{i0} + 2/h_2)w_{i0} - (w_{\bar{x}})_{x,i0} &= F_{i0} + (2/h_2)\psi_{i0}, \quad i = \overline{1, M-1}. \end{aligned} \quad (4)$$

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

$$-(2/h_1)(w_{\bar{x}})_{10} - (2/h_2)(w_{\bar{y}})_{01} + (q_{00} + 2/h_1 + 2/h_2)w_{00} = F_{00} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{00} \quad (5)$$

– в точке $(0, 0)$,

$$(2/h_1)(w_{\bar{x}})_{M0} - (2/h_2)(w_{\bar{y}})_{M1} + (q_{M0} + 2/h_1 + 2/h_2)w_{M0} = F_{M0} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{M0} \quad (6)$$

– в точке $(4, 0)$,

$$(2/h_1)(w_{\bar{x}})_{MN} + (2/h_2)(w_{\bar{y}})_{MN} + (q_{MN} + 2/h_1 + 2/h_2)w_{MN} = F_{MN} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{MN} \quad (7)$$

– в точке $(4, 3)$,

$$-(2/h_1)(w_{\bar{x}})_{1N} + (2/h_2)(w_{\bar{y}})_{0N} + (q_{0N} + 2h_1 + 2/h_2)w_{0N} = F_{0N} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{0N} \quad (8)$$

– в точке $(0, 3)$,

Замечание. Разностные схемы $Aw = B$, 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.

Итого система примет следующий вид:

$$\begin{aligned}
& -\Delta_h w_{ij} + q_{ij} w_{ij} = F_{ij}, \quad i = \overline{1, M-1}, \quad j = \overline{1, N-1}, \\
& (2/h_1)(w_{\bar{x}})_{Mj} + (q_{Mj} + 2/h_1)w_{Mj} - (w_{\bar{y}})_{y,Mj} = F_{Mj} + (2/h_1)\psi_{Mj}, \quad j = \overline{1, N-1}, \\
& -(2/h_1)(w_{\bar{x}})_{1j} + (q_{0j} + 2/h_1)w_{0j} - (w_{\bar{y}})_{y,0j} = F_{0j} + (2/h_1)\psi_{0j}, \quad j = \overline{1, N-1}, \\
& (2/h_2)(w_{\bar{y}})_{iN} + (q_{iN} + 2/h_2)w_{iN} - (w_{\bar{x}})_{x,iN} = F_{iN} + (2/h_2)\psi_{iN}, \quad i = \overline{1, M-1}, \\
& -(2/h_2)(w_{\bar{y}})_{i1} + (q_{i0} + 2/h_2)w_{i0} - (w_{\bar{x}})_{x,i0} = F_{i0} + (2/h_2)\psi_{i0}, \quad i = \overline{1, M-1}, \\
& -(2/h_1)(w_{\bar{x}})_{10} - (2/h_2)(w_{\bar{y}})_{01} + (q_{00} + 2/h_1 + 2/h_2)w_{00} = F_{00} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{00}, \\
& (2/h_1)(w_{\bar{x}})_{M0} - (2/h_2)(w_{\bar{y}})_{M1} + (q_{M0} + 2/h_1 + 2/h_2)w_{M0} = F_{M0} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{M0}, \\
& (2/h_1)(w_{\bar{x}})_{MN} + (2/h_2)(w_{\bar{y}})_{MN} + (q_{MN} + 2/h_1 + 2/h_2)w_{MN} = F_{MN} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{MN}, \\
& -(2/h_1)(w_{\bar{x}})_{1N} + (2/h_2)(w_{\bar{y}})_{0N} + (q_{0N} + 2/h_1 + 2/h_2)w_{0N} = F_{0N} + (2/h_1 + 2/h_2)\psi_{0N},
\end{aligned} \tag{9}$$

4 Метод решения СЛАУ

Приближенное решение системы уравнений $Aw = B$ 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:

$$w_{ij}^{(k+1)} = w_{ij}^{(k)} - \tau_{k+1} r_{ij}^{(k)}, \tag{10}$$

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 можно взять неравенство

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

где ε – положительное число, определяющее точность итерационного метода. Оценку точности приближенного решения сеточных уравнений можно проводить в максимум норме

$$\|w\|_C = \max_{x \in \bar{\omega}_h} |w(x)|. \tag{11}$$

Константа ε для данной задачи была взята $5 * 10^{-6}$.

5 Описание программной реализации

5.1 Последовательный код

Для решения задачи без распараллеливания использовались следующие идеи решения:

1. Реализованы функции F, u, q (функция k в моем варианте была $= 1$).
2. Были реализованы функции, отвечающие граничным условиям ψ
3. Были реализованы функции для вычисления скалярного произведения, нормы по скалярному произведению, разности векторов.
4. Были реализованы функции, заполняющие левую часть СЛАУ (матрицу Aw (и Ar), вытянутую в вектор и функция заполняющая правую часть СЛАУ (вектор B).
5. Далее в основной части программы, динамически выделялась память под все участвующие в решении векторы. Вычислялся вектор B .
6. Решение СЛАУ было реализовано в цикле, пока не будет достигнута необходимая точность между вычисленной функцией и функцией, вычисленной на предыдущей итерации.
7. После решения системы происходит вывод времени, количества итераций, ошибки. Вычисленная функция записывается в файл, для последующего графического анализа.
8. Освобождается динамически выделенная память.

5.2 Программа, использующая MPI и OPENMP

Для решения задачи с распараллеливанием использовались следующие идеи решения:

1. Основные функции и идеи с решением СЛАУ были взяты из последовательного решения.
2. Вся область разделяется с помощью двумерного разбиения. Количество строк и столбцов, на которое разбивается область определяется с помощью функции `get_domains`, т.к. количество процессов является степенью 2, функция делит область пополам по направлению, имеющего наибольшее количество узлов, до тех пор, пока количество доменов не будет равно количеству процессоров.

3. По полученному массиву, определяющему количество узлов в каждой размерности, мы можем узнать координаты в декартовой решетке для каждого процесса.
4. Зная координаты каждого процесса, настроим направления, в которых будут отправляться буферные границы для каждого домена. Если процессу нечего отправлять по какому-либо из направлений (вверх, вниз, вправо, влево), то устанавливается *MPI_PROC_NULL*. После этого каждый процесс сможет использовать функцию *MPI_Sendrecv*.
5. Аналогично последовательному решению динамически выделяется память для всех участвующих в решении векторов. Дополнительно выделяется память буферов для отправки и для приема данных с границ.
6. В цикле, который выполняется пока не будет достигнута необходимая точность, сначала происходит отправка и прием граничных буферов, далее как и в последовательном коде на каждом домене происходит решение СЛАУ, далее с помощью функции *MPI_Allreduce* по операции *MPI_MAX* каждому процессу отправляется вычисленная точность.
7. После цикла вызывается функция *MPI_Barrier*, чтобы дождаться окончания работы всех процессов, происходит вывод времени работы программы и количества итераций. Очищается выделенная память.

Были получены следующие результаты (N_p количество процессов)

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

N_p	Число точек сетки $M \times N$	Время решения $T(s)$	Ускорение S	Количество итераций
4	500×500	1009.2	1	36636
8	500×500	199.709	5.05	16468
16	500×500	137.746	7.3	12162
32	500×500	176.77	5.7	4886
4	500×1000	3075.72	1	121400
8	500×1000	917.849	3.3	53684
16	500×1000	187.714	16.4	18694
32	500×1000	372.073	5.5	10836

Можно заметить, что ускорение падает в случае 8 и 32 процессов. Это может быть связано с тем, что они имеют нечетную степень двойки, то есть размерность одного из направлений будет больше другого, из-за этого не получается разделить сетку на домены, приближенные к квадратам. Также скачки во времени могут быть вызваны высокой загруженностью системы Polus. При этом можно заметить также, что количество итераций стабильно уменьшается приблизительно в 2 раза, следовательно можно сделать вывод, что определенное время тратится на пересылку границ, которое увеличивается при увеличении количества процессов.

Число нитей для всех запусков равно 4.

Таблица 2: Таблица с результатами расчетов на ПВС IBM Polus (Гибридный MPI + OPENMP)

N_p	Число точек сетки $M \times N$	Время решения T	Ускорение S	Количество итераций
1	500×500	2054.84	1	41392
2	500×500	1266.37	1.6	27051
4	500×500	696.773	2.9	25660
8	500×500	918.76	2.2	13370
1	500×1000	5371.89	1	123643
2	500×1000	2042.3	2.6	69540
4	500×1000	899.34	5.96	56892
8	500×1000	1278.47	4.2	34370

График исходной функции и посчитанной приближенно представлены ниже.

Полученная точность, посчитанная как максимум норма, составляет 0.04

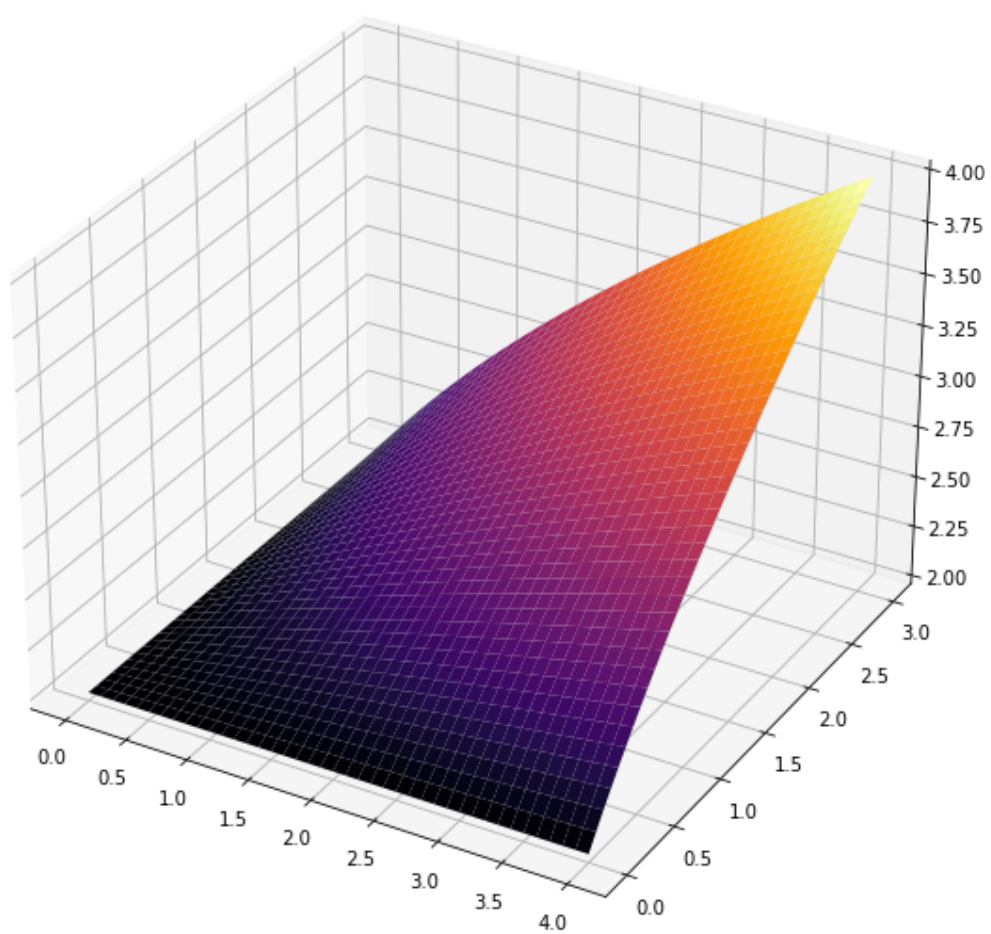


Рис. 1: Исходная функция

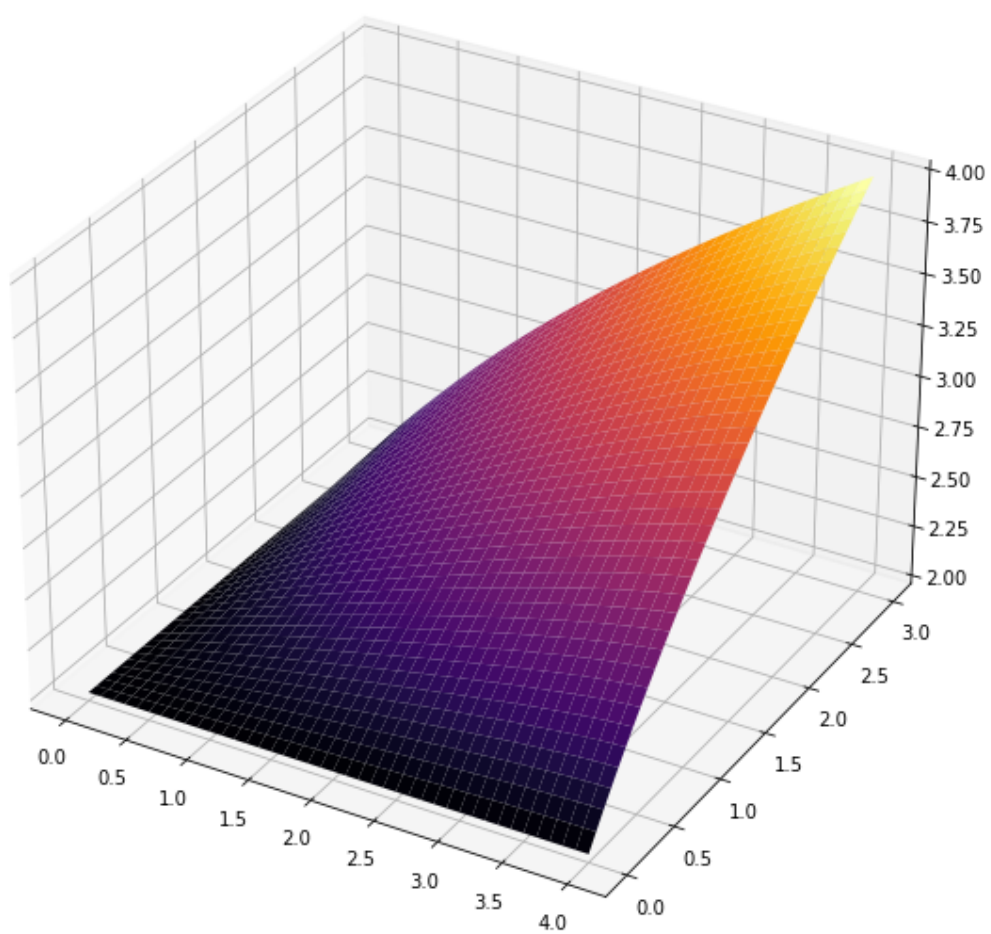


Рис. 2: Приближенная на сетке функция

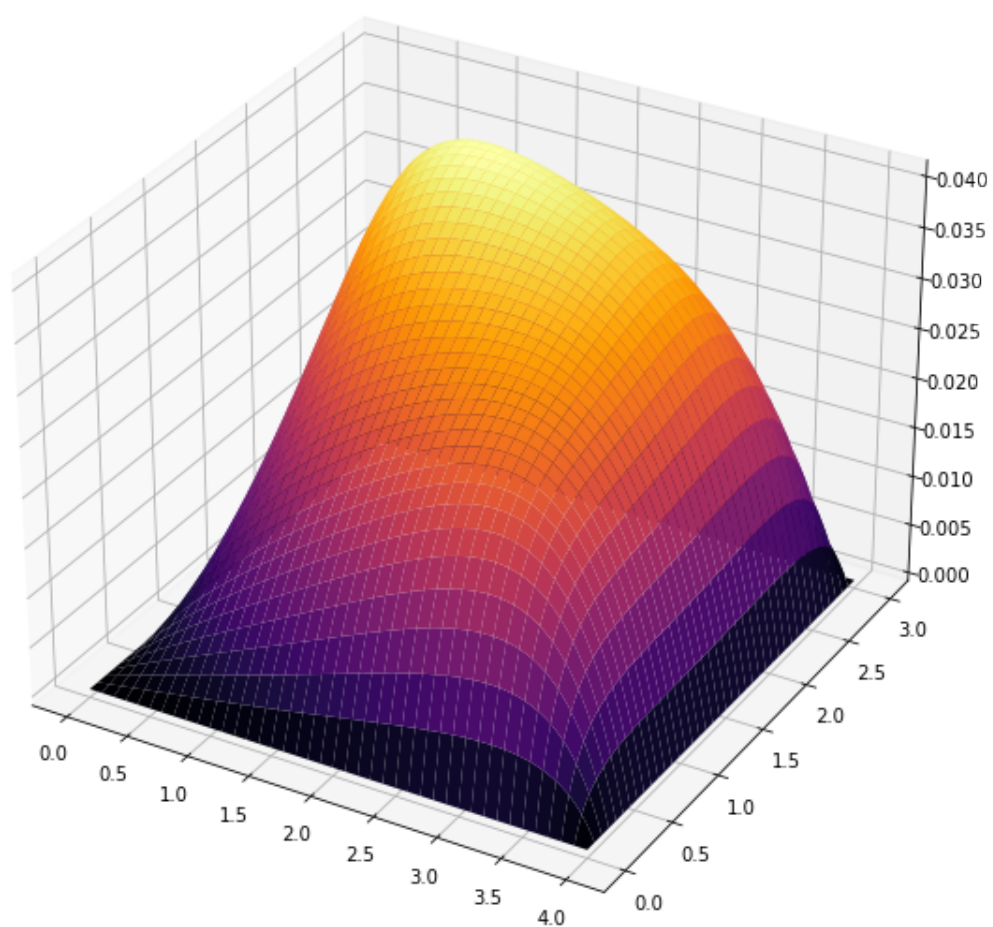


Рис. 3: Разность