

отчет по первому заданию курса
“Суперкомпьютерное
моделирование и технологии”

для студентов первого и второго потоков

сентябрь 2024

Никольский Владимир, 608 группа

1 вариант

Математическая постановка

В области $D \subset \mathbb{R}^2$, ограниченной контуром γ , рассматривается дифференциальное уравнение Пуассона

$$-\Delta u = f(x, y), \quad (1)$$

в котором оператор Лапласа

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

функция $f(x, y)$ считается известной. Для выделения единственного решения уравнение дополняется граничным условием Дирихле (см. [1]):

$$u(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \gamma. \quad (2)$$

Требуется найти функцию $u(x, y)$, удовлетворяющую уравнению (1) в области D и краевому условию (2) на ее границе.

Численные методы решения

Для приближенного решения задачи (1),(2) предлагается воспользоваться методом фиктивных областей [2].

Пусть область D принадлежит прямоугольнику $\Pi = \{(x, y) : A_1 < x < B_1, A_2 < y < B_2\}$. Обозначим через \overline{D} , $\overline{\Pi}$ замыкание области D и прямоугольника Π соответственно, через Γ – границу прямоугольника. Разность множеств

$$\hat{D} = \Pi \setminus \overline{D}$$

называется фиктивной областью. Выберем и зафиксируем малое $\varepsilon > 0$.

В прямоугольнике Π рассматривается задача Дирихле

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial x} \left(k(x, y) \frac{\partial v}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(k(x, y) \frac{\partial v}{\partial y} \right) &= F(x, y), \\ v(x, y) &= 0, \quad (x, y) \in \Gamma \end{aligned} \quad (3)$$

с кусочно-постоянным коэффициентом

$$k(x, y) = \begin{cases} 1, & (x, y) \in D, \\ 1/\varepsilon, & (x, y) \in \hat{D} \end{cases} \quad (4)$$

и правой частью

$$F(x, y) = \begin{cases} f(x, y), & (x, y) \in D, \\ 0, & (x, y) \in \hat{D}. \end{cases} \quad (5)$$

Требуется найти непрерывную в $\overline{\Pi}$ функцию $v(x, y)$, удовлетворяющую дифференциальному уравнению задачи (3) всюду в $\Pi \setminus \gamma$, равную нулю на границе Γ прямоугольника, и такую, чтобы вектор потока

$$W(x, y) = -k(x, y) \left(\frac{\partial v}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial y} \right)$$

имел непрерывную нормальную компоненту на общей части криволинейной границы области D и прямоугольника Π . Последнее означает, что в каждой точке $(x_0, y_0) \in \gamma \cap \Pi$ должно выполняться равенство

$$\lim_{\substack{(x, y) \rightarrow (x_0, y_0), \\ (x, y) \in D}} (W(x, y), n(x_0, y_0)) = \lim_{\substack{(x, y) \rightarrow (x_0, y_0), \\ (x, y) \in \hat{D}}} (W(x, y), n(x_0, y_0)), \quad (6)$$

где $n(x, y)$ – вектор единичной нормали к границе γ в точке (x, y) , определенный всюду или почти всюду на кривой.

Известно [2], что функция $v(x, y)$ равномерно приближает решение $u(x, y)$ задачи (1),(2) в области D , а именно,

$$\max_{P \in \overline{D}} |v(x, y) - u(x, y)| < C\varepsilon, \quad C > 0. \quad (7)$$

В частности, $|v(x, y)| < C\varepsilon$ во всех точках кривой γ . Этот результат позволяет получить искомую функцию $u(x, y)$ с любой наперед заданной точностью $\varepsilon > 0$, решая задачу (3),(6) вместо задачи (1),(2). Тем самым, задача Дирихле в криволинейной области приближенно заменяется задачей Дирихле в прямоугольнике с кусочно-постоянным коэффициентом $k(x, y)$.

Краевые задачу (3),(6) предлагается решать численно методом конечных разностей [3]. В замыкании прямоугольника $\bar{\Pi}$ определяется равномерная прямоугольная сетка $\bar{\omega}_h = \bar{\omega}_1 \times \bar{\omega}_2$, где

$$\bar{\omega}_1 = \{x_i = A_1 + ih_1, i = \overline{0, M}\}, \bar{\omega}_2 = \{y_j = A_2 + jh_2, j = \overline{0, N}\}.$$

Здесь $h_1 = (B_1 - A_1)/M$, $h_2 = (B_2 - A_2)/N$. 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 ω_h . Обозначим через w_{ij} значение сеточной функции $w \in H$ в узле сетки $(x_i, y_j) \in \omega_h$. Будем считать, что в пространстве H задано скалярное произведение и евклидова норма

$$(u, v) = \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=1}^{N-1} h_1 h_2 u_{ij} v_{ij}, \quad \|u\|_E = \sqrt{(u, u)}. \quad (8)$$

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

$$Aw = B, \quad (9)$$

где $A : H \rightarrow H$ – оператор, действующий в пространстве сеточных функций, $B \in H$ – известная правая часть. Задача (9) 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.

Дифференциальное уравнение задачи (3) во всех внутренних точках сетки аппроксимируется разностным уравнением

$$-\frac{1}{h_1} \left(a_{i+1j} \frac{w_{i+1j} - w_{ij}}{h_1} - a_{ij} \frac{w_{ij} - w_{i-1j}}{h_1} \right) - \frac{1}{h_2} \left(b_{ij+1} \frac{w_{ij+1} - w_{ij}}{h_2} - b_{ij} \frac{w_{ij} - w_{ij-1}}{h_2} \right) = F_{ij},$$

$$i = \overline{1, M-1}, j = \overline{1, N-1}, \quad (10)$$

в котором коэффициенты

$$a_{ij} = \frac{1}{h_2} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} k(x_{i-1/2}, t) dt, \quad b_{ij} = \frac{1}{h_1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} k(t, y_{j-1/2}) dt \quad (11)$$

при всех $i = \overline{1, M}$, $j = \overline{1, N}$. Здесь полуцелые узлы

Правая часть разностного уравнения

$$F_{ij} = \frac{1}{h_1 h_2} \iint_{\Pi_{ij}} F(x, y) dx dy, \quad \Pi_{ij} = \{(x, y) : x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}, y_{j-1/2} \leq y \leq y_{j+1/2}\} \quad (12)$$

при всех $i = \overline{1, M-1}$, $j = \overline{1, N-1}$.

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

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

С учетом принятых обозначений разностное уравнение (10) можно представить в более компактном и удобном виде:

$$-(aw_{\bar{x}})_{x,ij} - (bw_{\bar{y}})_{y,ij} = F_{ij}, \quad i = \overline{1, M-1}, j = \overline{1, N-1} \quad (13)$$

Краевые условия Дирихле задачи (3),(6) аппроксимируются точно равенством

$$w_{ij} = w(x_i, y_j) = 0, \quad (x_i, y_j) \in \Gamma. \quad (14)$$

Переменные w_{ij} , заданные равенством (14), исключаются из системы уравнений (13). В результате остаются неизвестными значения w_{ij} при $i = \overline{1, M-1}$, $j = \overline{1, N-1}$ и их количество совпадает с числом уравнений. Система является линейной относительно неизвестных величин и может быть представлена в виде (9) с самосопряженным и положительно определенным оператором

$$Aw = -(aw_{\bar{x}})_x - (bw_{\bar{y}})_y$$

и правой частью F , определенной равенством (12). Таким образом, построенная разностная схема (13),(14) линейна и имеет единственное решение при любой правой части (см. [5]).

Замечание. Интегралы (11) от кусочно-постоянной функции $k(x, y)$ следует вычислять аналитически. Нетрудно видеть, что если отрезок, соединяющий точки $P_{ij} = (x_{i-1/2}, y_{j-1/2})$ и $P_{ij+1} = (x_{i-1/2}, y_{j+1/2})$, целиком расположен в области D , то $a_{ij} = 1$. Если же указанный отрезок находится в фиктивной области \hat{D} , то $a_{ij} = 1/\varepsilon$. В противном случае

$$a_{ij} = h_2^{-1} l_{ij} + (1 - h_2^{-1} l_{ij})/\varepsilon,$$

где l_{ij} – длина той части отрезка $[P_{ij}, P_{ij+1}]$, которая принадлежит области D . Аналогичным образом вычисляются коэффициенты b_{ij} .

Очевидно, правая часть схемы F_{ij} равна нулю при всех $(i, j) : \Pi_{ij} \subset \hat{D}$. Если $\Pi_{ij} \subset D$, то правую часть предлагается приближенно заменить значением $f(x_i, y_j)$. В противном случае, когда прямоугольник Π_{ij} содержит точки оригинальной области D и фиктивной области \hat{D} , величина F_{ij} может быть вычислена приближенно как произведение

$$(h_1 h_2)^{-1} S_{ij} f(x_i^*, y_j^*),$$

где (x_i^*, y_j^*) – любая точка пересечения $\Pi_{ij} \cap D$, $S_{ij} = \text{mes}(\Pi_{ij} \cap D)$ – площадь пересечения областей, при вычислении которой криволинейную часть границы можно заменить отрезком прямой.

Приближенное решение разностной схемы (10),(14) может быть получено итерационным методом скорейшего спуска [4]. 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:

$$w_{ij}^{(k+1)} = w_{ij}^{(k)} - \tau_{k+1} r_{ij}^{(k)}, \quad (15)$$

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

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

В качестве условия остановки итерационного процесса следует использовать неравенство

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

где δ – положительное число, определяющее точность итерационного метода. Оценку точности приближенного решения можно проводить в других нормах пространства сеточных функций, например, в максимум норме

$$\|w\|_C = \max_{x \in \bar{\omega}_h} |w(x)|. \quad (16)$$

Константу δ для данной задачи предлагается выбрать так, чтобы итерационный процесс укладывался в отведенное для него время.

Описание проделанной работы

В рамках задания были выполнены следующие этапы:

1. Реализована параллельная программа на языке C++11, приближенно решающая двумерную задачу Дирихле для уравнения Пуассона в криволинейной области
синхронный код был ускорен средствами OpenMP, MPI, MPI + OpenMP
2. Проверено качество работы алгоритма для сеток разных размеров с разным количеством процессов / потоков на ПВС IBM Polus
3. Визуализированы результаты

Приложение

Таблица 1. Ускорение программы средствами OpenMP

Кол-во OpenMP-нитей	Число точек сетки ($M \times N$)	Число итераций	Время решения	Ускорение
sync	80 x 90	52188	230,351s	-
2	80 x 90	46881	106,644s	2,16
4	80 x 90	50261	71,458s	3,22
8	80 x 90	52327	40,197s	5,73
16	80 x 90	38643	26,185s	8,89
sync	160 x 180	76061	1811,33s	-
4	160 x 180	75599	414,673s	4,37
8	160 x 180	82017	249,739s	7,26
16	160 x 180	91339	227,387s	7,97
32	160 x 180	65199	132,614s	13,66

Таблица 2. Ускорение программы средствами MPI

Кол-во процессов MPI	Число точек сетки ($M \times N$)	Число итераций	Время решения	Ускорение
2	80 x 90	37054	103,289s	2,2
4	80 x 90	46924	58,813s	3,91
8	80 x 90	39321	44,951s	5,12
16	80 x 90	45103	32,482s	7,09
4	160 x 180	67923	313,415s	5,78
8	160 x 180	74193	124,129s	14,59
16	160 x 180	84234	89,241s	20,29
32	160 x 180	79134	81,524s	22,21

Графики ускорений OpenMP и MPI

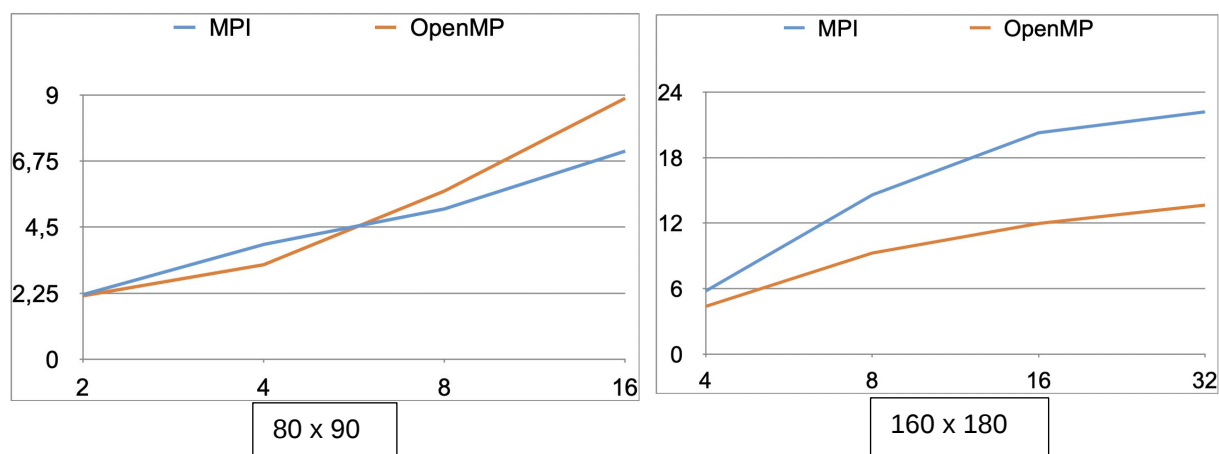
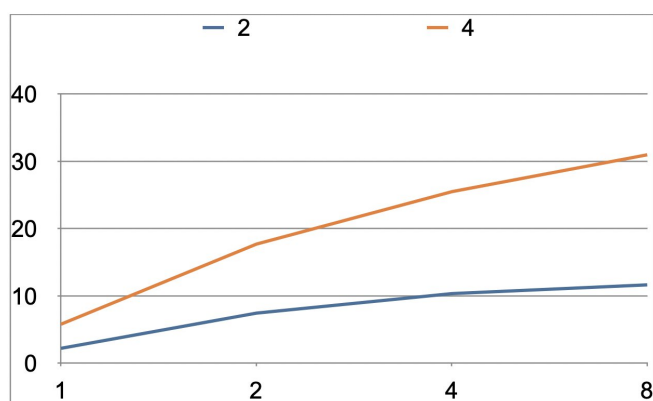


Таблица 3. Ускорение программы средствами MPI + OpenMP

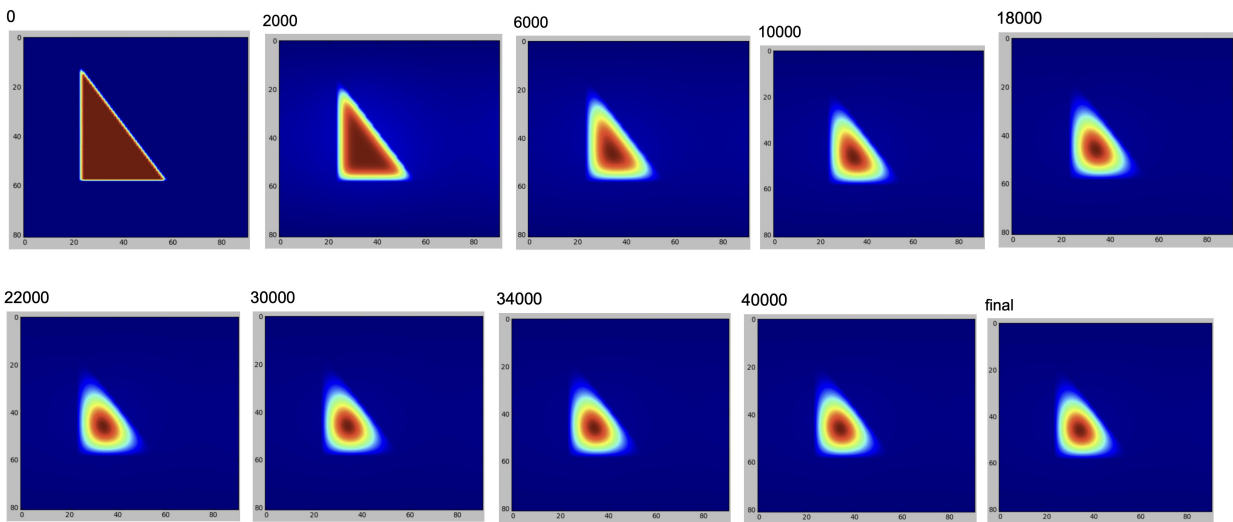
<i>Кол-во процессов MPI</i>	<i>Количество OpenMP-нитей в процессе</i>	<i>Число точек сетки (M x N)</i>	<i>Число итераций</i>	<i>Время решения</i>	<i>Ускорение</i>
2	1	80 x 90	37054	103,289s	2,2
2	2	80 x 90	39118	67,192s	3,43
2	4	80 x 90	42975	36,429s	6,33
2	8	80 x 90	37961	23,931s	9,63
4	1	160 x 180	67923	313,415s	5,78
4	2	160 x 180	81743	102,429s	17,68
4	4	160 x 180	78983	71,121s	25,47
4	8	160 x 180	82311	58,529s	30,95

Графики ускорения на 2 и 4 процессах MPI в зависимости от количества OpenMP потоков



Итерации ошибок

Сетка 80x90



Сетка 160x180

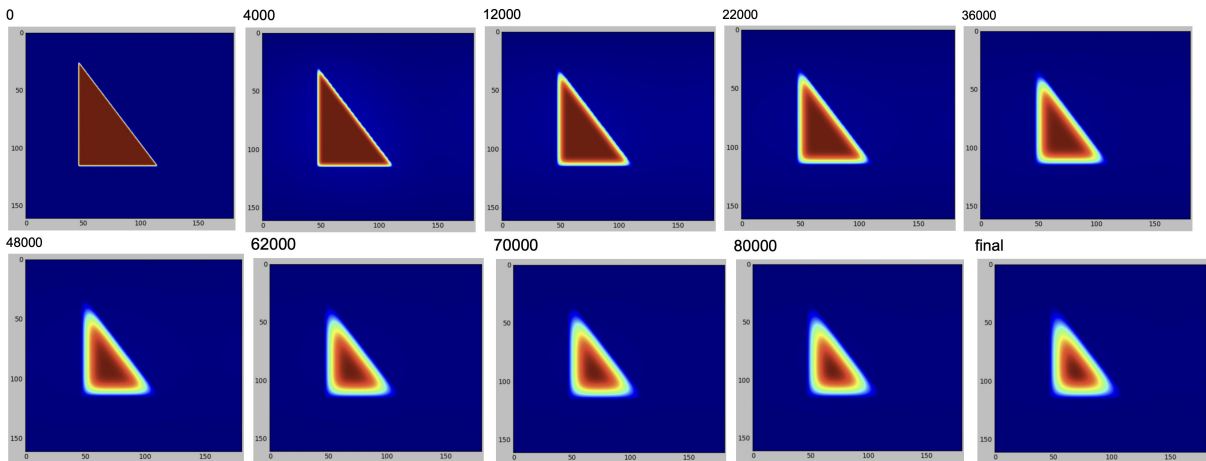


График ошибок

