Суперкомпьютерное моделирование и технологии

Отчет

Численное интегрирование многомерных функций методом Монте-Карло

Лазарев Владимир Александрович

8 вариант

07.11.2021

Оглавление

Математическая постановка задачи

Функция $f(x, y, z)$ – непрерывна в ограниченной замкнутой области $G \subset R^3$. Требуется вычислить определенный интеграл:

$$I = \iiint_G f(x,y,z)dxdydz$$

В полученном варианте используется следующая функция и область: $f(x, y, z) = x^2y^2z^2$, где область $G = \{(x, y, z) : |x| + |y| \leq 1, -2 \leq z \leq 2\}$.

Численный метод решения задачи

Пусть область G ограничена параллелепипедом П:

$$П = \begin{cases} Xmin \leq X \leq Xmax \\ Ymin \leq Y \leq Ymax \\ Zmin \leq Z \leq Zmax \end{cases}$$

Рассмотрим функцию $\mathrm{F(x,y,z)} = \begin{cases} f(x,y,z), (x,y,z) \in G \\ 0, else\ case \end{cases}$

и перепишем интеграл:

$$I = \iiint_G f(x,y,z)dxdydz = \iiint_П F(x,y,z)dxdydz$$

Пусть $p_1(x_1, y_1, z_1)$, $p_2(x_2, y_2, z_2)$, … – случайные точки, равномерно распределенные в $П$. Возьмем n таких точек. В качестве приближенного значения интеграла предлагается использовать выражение:

$$I \approx |П| * \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} F(Pi)$$

Где |П| – объем параллелепипеда П, рассчитанного по формуле:

$$|\Pi| = (Xmax - Xmin) * (Ymax - Ymin) * (Zmax - Zmin)$$

Нахождение точного значения интеграла аналитически

Проанализировав ограниченную область, можно установить границы параллелепипеда: $-1 \le x \le 1, -1 \le y \le 1, -2 \le z \le 2$ и область для функции:

$$\begin{cases} 0 \le x \le 1, x - 1 \le y \le 1 - x, -2 \le z \le 2 \\ -1 \le x \le 0, -x - 1 \le y \le x + 1, -2 \le z \le 2 \end{cases}$$

Посчитаем аналитически тройной интеграл:

$$I = \int_G f(x, y, z) dxdydz = \int_0^1 \int_{x-1}^{1-x} \int_{-2}^{2} x^2 y^2 z^2\, dxdydz + \int_{-1}^{0} \int_{-x-1}^{x+1} \int_{-2}^{2} x^2 y^2 z^2\, dxdydz$$

$$\int\limits_0^1 \int\limits_{x-1}^{1-x} \int\limits_{-2}^{2} x^2 y^2 z^2\, dxdydz + \int\limits_{-1}^{0} \int\limits_{-x-1}^{x+1} \int\limits_{-2}^{2} x^2 y^2 z^2\, dxdydz$$

$$= \frac{16}{3} \int\limits_0^1 \int_{x-1}^{1-x} x^2 y^2\, dxdy + \frac{16}{3} \int\limits_{-1}^{0} \int_{-x-1}^{x+1} x^2 y^2\, dxdy$$

$$= \frac{16}{9} \int_0^1 x^2 (1 - x)^3 - x^2 (x - 1)^3\, dx$$

$$+ \frac{16}{9} \int_0^1 x^2 (x + 1)^3 - x^2 (-x - 1)^3\, dx = \frac{8}{135} + \frac{8}{135}$$

$$= \frac{16}{135}$$

Программная реализация

Реализована параллельная MPI-программа, принимающая аргумент *-eps=<value>* – необходимая точность решения (если не передавать аргумент, то по умолчанию точность установится в 10^{-4}).

При запуске программы идет проверка введенного аргумента точности, и в случае некорректного ввода, программа выведет сообщение, никаких вычислений произведено не будет).

В качестве параллельной реализации используется классическая парадигма, т.е. независимая генерация точек MPI-процессами. Все процессы высчитывают свою часть суммы, затем вычисляется общая сумма при помощи MPI_Reduce и итоговый интеграл.

Полученное значение интеграла сравнивается с ранее аналитически рассчитанным эталоном. В случае достижения требуемой точности процессам передается флаг об окончании выполнения вычислений. Иначе, наступает следующая итерация цикла.

Результаты запусков программ на различных кластерах

Таблица 1. Результаты расчетов на Blue Gene/P

Точность ε	Число MPI-процессов	Время работы программы (с)	Ускорение	Ошибка
$1.0 * 10^{-4}$	1	0.0285908	1	4.19977e-05
	4	0.033704	0.848291	4.90635e-05
	16	0.0105698	2.70495184	6.99499e-05
	64	0.0054323	5.26311139	4.65182e-05
$2.0 * 10^{-5}$	1	2.51958	1	1.44311e-05
	4	0.0436065	57.7799181	1.10327e-05
	16	0.0366541	68.739377	1.26013e-05
	64	0.0197201	127.767101	1.50121e-05
$0.8 * 10^{-5}$	1	3.07022	1	6.68338e-06
	4	3.46266	0.88666516	5.30369e-06
	16	0.196495	15.6249268	5.8681e-06
	64	0.0467732	65.6405805	3.81295e-06

Таблица 2. Результаты расчетов на Polus

Точность ε	**Число MPI-процессов**	**Время работы программы (с)**	**Ускорение**	**Ошибка**
$3.0 * 10^{-5}$	1	0.004416	1	1.63389e-05
	4	0.004561	0.96820873	1.30654e-05
	16	0.004793	0.92134363	1.78315e-05
	64	-	-	-
$5.0 * 10^{-6}$	1	1.42757	1	4.40235e-06
	4	1.3841	1.03140669	4.1574e-06
	16	0.0352944	40.4474931	3.5356e-06
	64	-	-	-
$1.5 * 10^{-6}$	1	1.69038	1	1.22898e-06
	4	1.9209	0.87999375	1.38187e-06
	16	0.0549338	30.7712192	9.04449e-07
	64	-	-	-

Запуски производились при N = 5000 (кол-во генерируемых точек каждым из процессов). Время работы и ошибка были усреднены по 50-ти запускам.

Время запусков на различных кластерах

График 1. Время работы на Blue Gene/P от количества процессов.

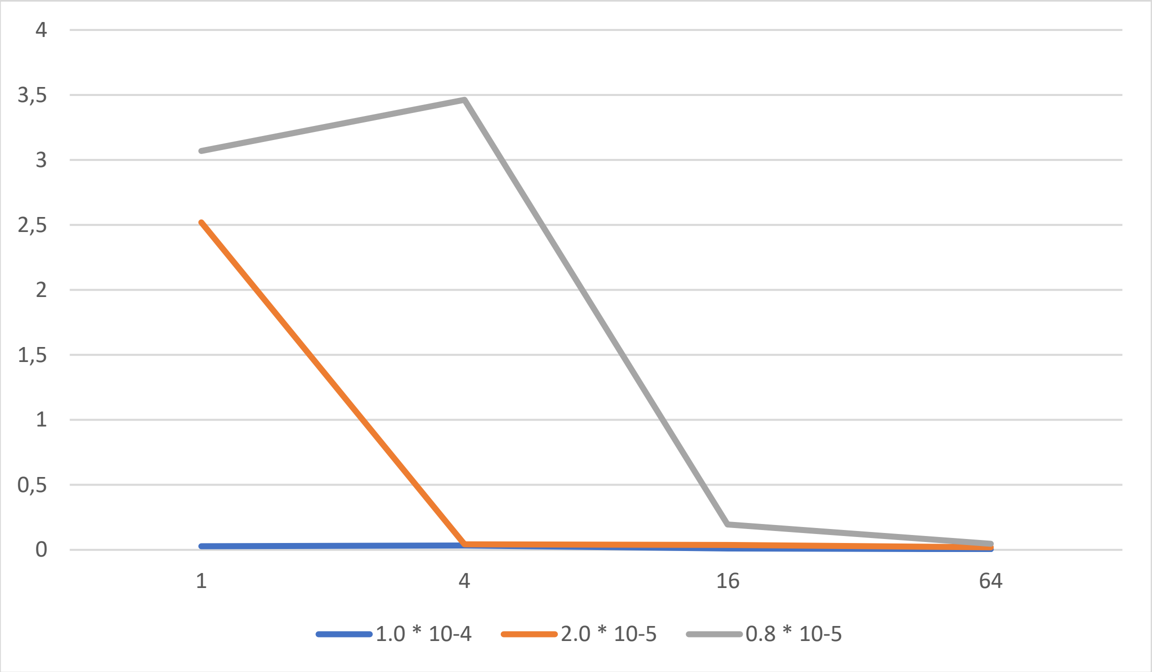
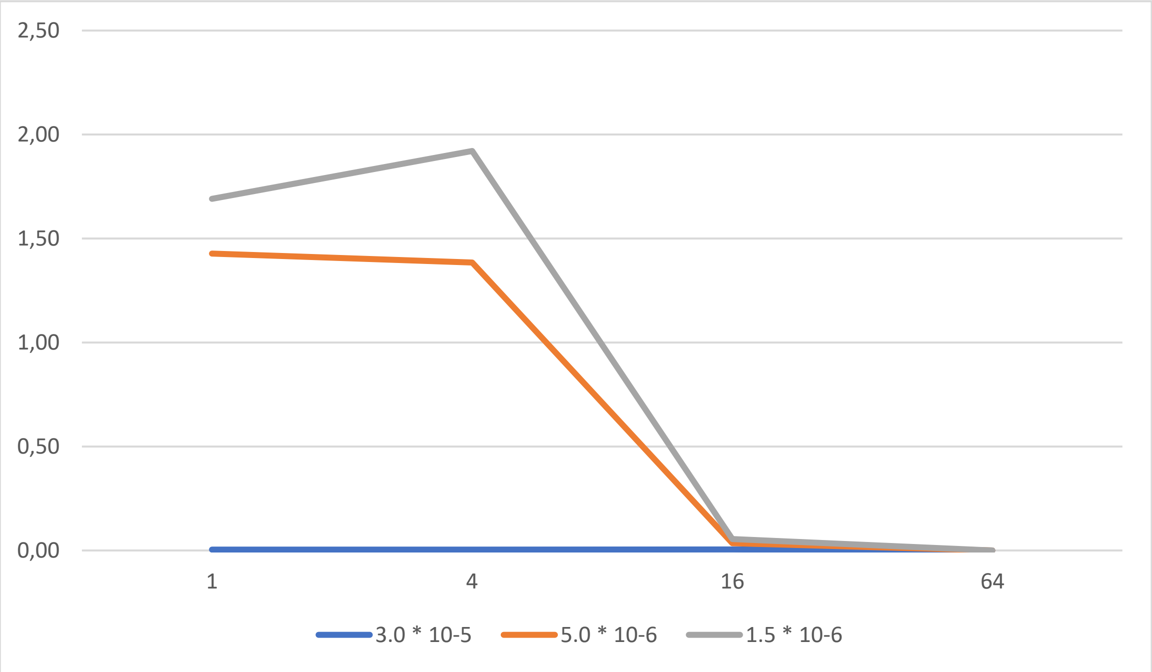


График 2. Время работы на Polus от количества процессов.



Ускорение на различных кластерах

График 3. Ускорение на Blue Gene/P от количества процессов.

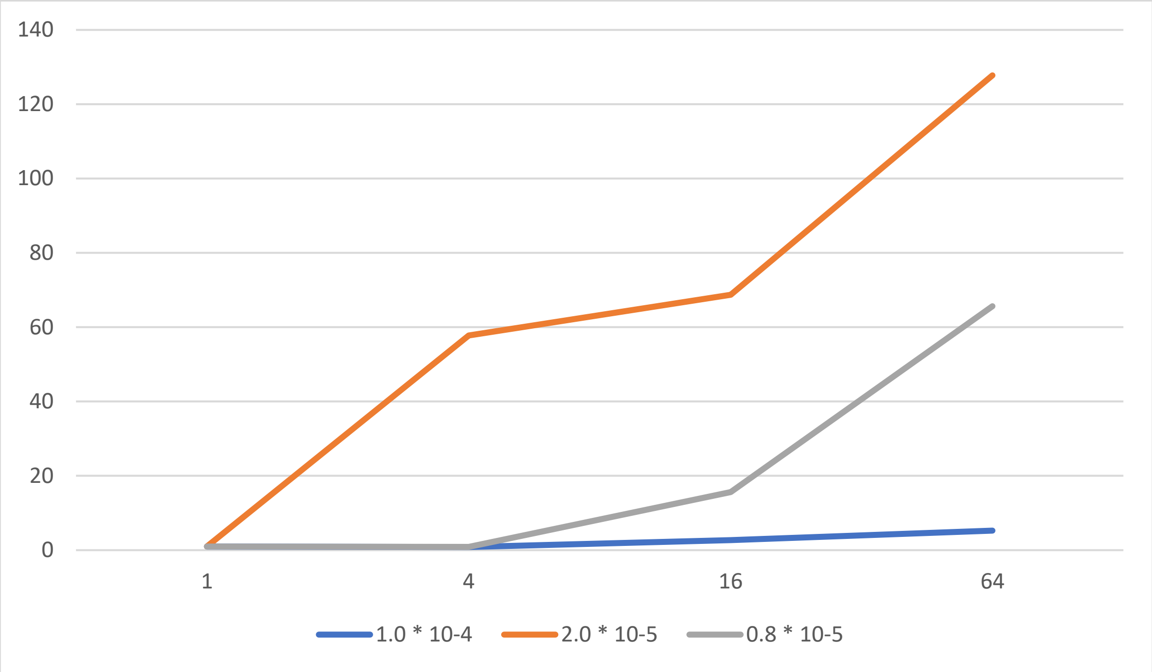
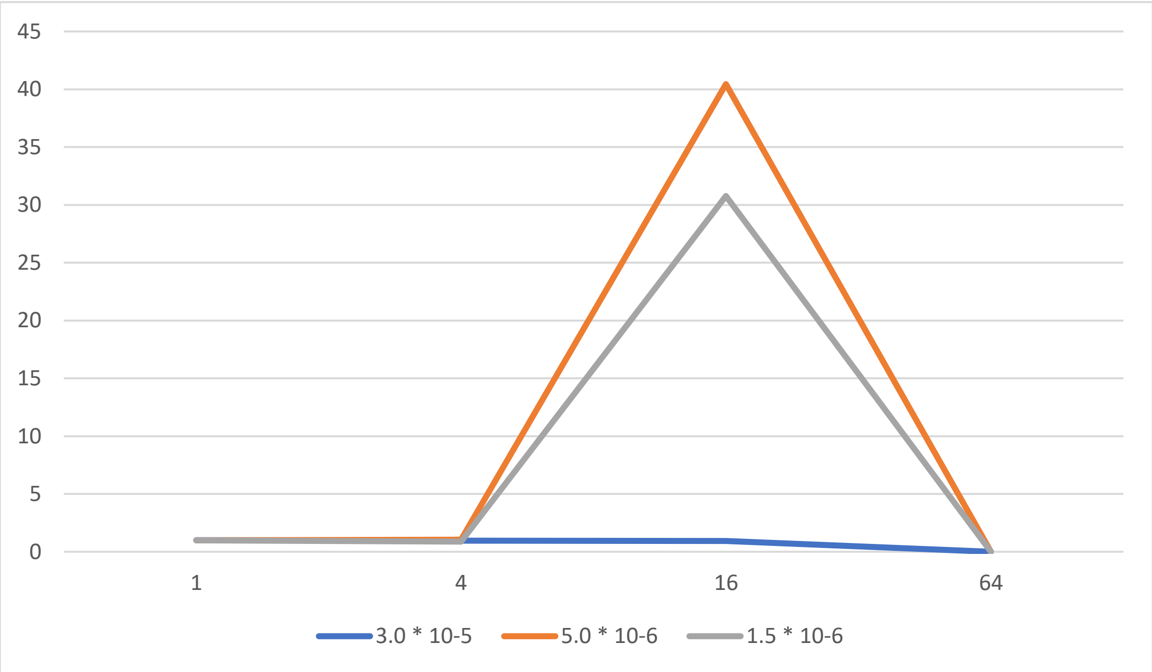


График 4. Ускорение на Polus от количества процессов.



Выводы

Как следует из приведенных выше таблица, парадигма с независимой генерацией точек отлично подходит для решения задачи численного программирования. Однако, при небольшой требуемой точности эффект от ускорения получился не таким явным. Также в среднем при увеличении количество MPI-процессов уменьшается ошибка в расчетах. При замерах на Polus использование 64 процессов было невозможно в силу технических проблем на кластере.