

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
”Новосибирский национальный исследовательский государственный университет”
(Новосибирский государственный университет)
Структурное подразделение Новосибирского государственного университета –
Высший колледж информатики НГУ
КАФЕДРА ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Создания модуля для параллельного решения бигармонического уравнения методом Монте-Карло.

Дипломный проект
на квалификацию техник

Студент
гр. 903а2

Семенов С.А.
«___»_____2013

Научный руководитель
к.ф-м.н., н.с ИВМиМГ СО РАН

Лукинов В.Л.
«___»_____2013

Новосибирск 2013

Оглавление

Введение	3
1 Постановка задачи	5
1.1 Конкретизации требований и задачи	5
1.2 Формулировка задачи	5
1.3 Аналогии	6
1.4 блуждание по сферам	6
1.4.1 Оценки решения метагармонического уравнения $(\delta + c)^p u = g$	6
1.5 Численные результаты	7
1.6 Заключение	7
1.7 Руководство пользователя	7
1.7.1 Установка	7
1.7.2 Запуск приложения	7
Список используемой литературы	7
Приложение	9
A Исходные коды и диаграммы программ	9
A.1 Основной аналог - Biharmon2 измененная	9
B Справка	14
B.1 Исполняемая программа	14
B.2 Библиотека	14
B.3 Файл данных	14
C Выходные данные	15
C.1 tex,html	15
D Тезаурус	16

Введение

В данном дипломном проекте рассматриваются приложения распределенного вычисления бигармонического уравнения и анализ производительности алгоритма. Вычисление проводилось методом Монте-Карло, а выполнен он с использованием технологии MPI (Message Passing Interface). Одной из целей работ является сравнение эффективности приложений распределенного и последовательного вычисления, а также общая оценка эффективности алгоритма.

Официальной датой рождения метода Монте-Карло принято считать 1949 год, когда была опубликована статья С. Улама и Н. Метрополиса [1]. Сам термин был предложен еще во время Второй мировой войны выдающимися учеными XX века математиком Дж. фон Нейманом и физиком Энрико Ферми в Лос-Аламосе (США) в процессе работ по ядерной тематике. Хотя методы Монте-Карло были известны и до 40-х годов, интенсивное развитие статистическое моделирование получило несколько позже в связи с появлением компьютеров, что позволило проводить вычисления больших объемов. С другой стороны, более широкое распространение получает статистическое описание тех или иных сложных физических процессов в связи с чем методы Монте-Карло все более активно используются во многих научных областях (теория переноса, теория массового обслуживания, теория надежности, статистическая физика и др.).

Одна из схем решения краевых задач методом Монте-Карло заключается в решении исходной дифференциальной задачи на основе вероятностного представления. Для этого используется "Алгоритм блуждания по решетке" и "Алгоритм блуждания по сферам". Основной особенностью данных алгоритмов является большой объем независимых друг от друга случайных вычислений. Отсюда следует используемое здесь достоинство - почти идеально распараллеливаемый алгоритм. Который в свою очередь можно реализовать на MPI. Недостатком же является случайная длина траекторий. Изучение влияния этой случайной длины на масштабируемость алгоритма вот цель всей работы.

Message Passing Interface (MPI, интерфейс передачи сообщений) — программный интерфейс (API)¹ для передачи информации, который позволяет обмениваться сообщениями между процессами, выполняющими одну задачу. Разработан Уильямом Гроуппом, Эвином Ласком и другими.

MPI является наиболее распространённым стандартом интерфейса обмена данными в параллельном программировании. Существуют его реализации для большого числа компьютерных платформ. MPI используется при разработке программ для кластеров и суперкомпьютеров. Основным средством коммуникации между процессами в MPI является передача сообщений друг другу. Стандартизацией MPI занимается MPI Forum. В стандарте MPI описан интерфейс передачи сообщений, который должен поддерживаться как на платформе, так и в приложениях пользователя. В настоящее время существует большое количество бесплатных и коммерческих реализаций MPI. Существуют реализации для языков Фортран 77/90, Java, Си и Си++.

В первую очередь MPI ориентирован на системы с распределенной памятью, то есть когда затраты на передачу данных велики, в то время как OpenMP² ориентирован на системы с общей памятью (многоядерные с общим кэшем). Обе технологии могут использоваться

¹см. сокращение

²<http://openmp.org/wp/>

совместно, дабы оптимально использовать в кластере многоядерные системы. Более подробно об этом [3]

Глава 1

Постановка задачи

1.1. Конкретизации требований и задачи

Входными условиями вычисления (пользовательскими функциями) является определение:

- функции ϕ ;
- функций u, g ;
- границ области.

Функции ϕ, u, g соответствуют функциям в уравнении: $(\Delta + c)^{p+1}u = -g, (\Delta + c)^k u|_{\Gamma} = \phi_k$. Функция границ области возвращает единицу если точка с некоторой погрешностью находится на границе. Входными данными является:

- количество путей;
- начальная точка.

Для задания пользовательских функций мы можем использовать программный код, пресинг функций или скрип. Первый наиболее скор в разработки, но заставляет компилировать программу каждый раз когда мы меняем вычисляемое уравнение. Для борьбы с этим недостатком сделаем вычисление в классе, который вынесем в отдельный модуль. Получаемый модуль параллельного вычисления скомпилируем как статическую библиотеку. Определение пользовательских функций проходит как задания функций обратного вызова. Так-же сделаем шаблон программы для облегчения определения пользователем своих функций. В комплект необходимо вести реализацию под конкретные условия.

С учетом того, что конечный программный продукт будет запускается как с изменением предыдущих параметров так и для частного конкретного случая ввод данных следует сделать с помощью аргументов и(или) файлов данных.

Вывод осуществляется в tex, html файлы и на экран.

Конкретизируем задачу:

- а) Создание статической библиотеки класса с функциями обратного вызова .
- б) Создание приложение под конкретные условия.
- в) Создание файла данных под программу созданную по предыдущим условиям.
- г) Создание справки.

Интерфейс программы смотреть приложение "Справка".

1.2. Формулировка задачи

1.3. Аналоги

Главным аналогом на основе которого и разрабатывается приложение является программа Biharmon2, чей код приведен в приложении. Недостатком данной реализации алгоритмов является:

- необходимость изменять алгоритм и функции основной программы (малая степень защиты от дурака);
- последовательность вычислений;
- при изменении алгоритма вычисления меняется и часть программы.

1.4. блуждание по сферам

Рассмотрим задачу Дирихле для уравнения Гельмгольца

$$\Delta u + cu = g, u|_{\Gamma} = \phi$$

в области $D \subset R^n$ с границей Γ , причем $c < c^*$, где c^* первое собственное число оператора Лапласа для области D , $r = (x_1; \dots; x_n) \in D$. Предполагаются выполненными сформулированные условия регулярности функций g , ϕ и границы Γ , обеспечивающие существование и единственность решения задачи, а также его вероятностное представление и интегральное представление с помощью шаровой функции Грина.

Введем следующие обозначения:

- \bar{D} - замыкание области D ;
- $d(P)$ - расстояние от точки P до границы Γ ;
- $\epsilon > 0$ - числовой параметр;
- Γ_ϵ - ϵ - окрестность границы Γ , т. е. $\Gamma_\epsilon = \{P \in \bar{D} : d(P) < \epsilon\}$;
- $S(P)$ максимальная из сфер (точнее - из гиперсфер) с центром в точке P , целиком лежащих в \bar{D} , $S(P) = \{Q \in \bar{D} : |Q - P| = d(P)\}$.

В процессе блуждания по сферам очередная точка P_{k+1} выбирается равномерно по поверхности сферы $S(P_k)$; процесс обрывается, если точка попадает в Γ_ϵ . Дадим точное определение процесса блуждания по сферам. Зададим цепь Маркова $\{R_m\}_{m=1,2,\dots,N}$ следующими характеристиками:

- $\pi(r) = \delta(r - r_0)$ - плотность начального распределения (т.е. цепь выходит из точки r_0);
- $p(r, r') = \delta_r(r')$ плотность перехода из r в r' , представляющая собой обобщенную плотность равномерного распределения вероятностей на сфере $S(r)$;
- $p_0(r)$ вероятность обрыва цепи, определяемая выражением

$$p_0(r) = \begin{cases} 0, & r \notin \Gamma_\epsilon \\ 1, & r \in \Gamma_\epsilon \end{cases}$$

- N - номер последнего состояния.

Как уже указывалось, данная цепь называется процессом блуждания по сферам. Ее можно, очевидно, записать в виде $r_m = r_{m-1} + \omega_m d(r_{m-1})$; $m = 1; 2; \dots$; ω_m - последовательность независимых изотропных векторов единичной длины.

1.4.1. Оценки решения метагармонического уравнения $(\delta + c)^p u = g$

Для случая $L = \delta$, $\lambda = 0$, $c = \text{const} < c^*$ вероятностное представление задачи имеет вид

$$u(r_0) = E \int_0^\gamma e^{ct} g(\xi(t)) dt + E[e^{c\tau} \Phi(\xi(\tau))]$$

, где $\xi(t)$ начинающийся в точке r_0 соответствующий оператору Лапласа диффузионный процесс, τ момент первого выхода процесса из области D . На основе строго марковского свойства процесса отсюда имеем

$$u(r_0) = \sum_{i=0}^{\infty} E[e^{c\tau_i} \int_0^{\tau_{i+1}-\tau_i} e^{ct} g(\xi(t + \tau_i)) dt + E[\Phi(\xi(\tau)) \prod_{i=0}^{\infty} e^{c(\tau_{i+1}-\tau_i)}]$$

, где τ_i - момент первого выхода процесса $\xi(t)$ на поверхность i -й сферы соответствующего блуждания по сферам.

1.5. Численные результаты

Metot	N	t_{cp}	ΔN
Par1	100003	1 sec	+/- 200
Par1	1000030	10 sec	+/- 250
Par2	100003	1 sec	+/- 10
Par2	1000030	12 sec	+/- 10
Pos	100003	2 sec	—
Pos	1000030	25 sec	—

Таблица 1.1: Время выполнения и расхождения

1.6. Заключение

Сформируем основные результаты работы:

- а) Создана статическая библиотека класса с функциями обратного вызова .
- б) Создано приложение под конкретные условия.
- в) Оценено оптимизация для двух алгоритмов и двух методов решения

1.7. Руководство пользователя

1.7.1. Установка

Для сборки приложения под Windows необходимо MPICH2, набор утилит для компиляции: компилятор GNU GCC и GNU Make данные утилиты представлены в пакете MinGW. Для Linux GNU GCC не обязателен, компиляция происходит силами пакета MPICH2.

- а) Скачайте необходимую версию библиотеки с тестовым примером.
- б) Запустите консоль в папке проекта или перейдите в нее с помощью команды cd.
 - нажмите Пуск -> Выполнить -> cmd - Это откроет консоль Windows;
 - в консоли наберите имя диска на котором располагается проект с двоиточием на конце (C:);
 - там же напечатайте cd <путь к проекту > (cd C: project).
- в) Запустите make.

Результатом станет скомпилированный тестовый пример и статическая библиотека находящиеся в папке с проектом.

1.7.2. Запуск приложения

Запуск приложения описан в файле README и документации к MPICH2

Литература

1. S. Ulam and N. Metropolis. The Monte Carlo method, Journal of American Statistical Association, 44, 335, 1949.
2. Лукинов Виталий Леонидович *Скалярные Алгоритмы метода Монте-Карло для решения мета-гармонических уравнений* 2005
3. <http://www.mpich.org/>

Приложение А

Исходные коды и диаграммы программ

А.1. Основной аналог - Biharmon2 измененная

```
#include <iostream>
#include <stdlib.h>
#include <cmath>                                // for trigonometry functions

using namespace std;

const double epsilon=0.001e-00;
const double xfirst=0.5e-00;
const double yfirst=0.5e-00;
const double PI=3.141592e-00;
double x;
double y;

double u(double x, double y)
{
    return double(exp(x)*exp(y));
    // return double(sin(x)*sin(y)*sin(z));
}

double g(double x, double y)
{
    return double(-4.0*exp(x)*exp(y));
    // return double(-4.0*sin(x)*sin(y)*sin(z));
}

double phi_0(double x, double y)
{
    return double(exp(x)*exp(y));
    // return double(sin(x)*sin(y)*sin(z));
}

double phi_1(double x, double y)
{
    return double(2.0*exp(x)*exp(y));
    // return double(-2.0*sin(x)*sin(y)*sin(z));
}
```

```

int boundary(double x1, double y1) // является ли точка границей
{
    if (x1<epsilon) {x=0.0; return 0;};
    if (x1>(1-epsilon)) {x=1.0; return 0;};
    if (y1<epsilon) {y=0.0; return 0;};
    if (y1> (1-epsilon)) {y=1.0; return 0;};
    return 1;
}

double min(double a, double b)
{
    if ( b>=a) return a;
    else return b;
}

double diam(double x, double y) // диаметр матрицы ?
{
    if (x> fabs(1-x)) x= fabs(1-x); // fabs – абсолютное значение для
//аргумента сплавляющей точкой
    if (y>fabs(1-y)) y=fabs(1-y); // пишем глобальные переменные
    return min(x,y); // возвращаем минимальное R ?
}

double stat2(double a, double b, double c)
{
    if ( c>=b) if (b>=a) return b;
    else if (a>=c) return c;
    else return a;
    else if (c>=a) return c;
    else if (b>=a) return a;
    else return b;
}

int main()
{
    double N; // количество путей

    cout << "\nInput a number of ways\n";
    cin >> N;
    double U=0;
    double Disp=0;
    for (int k= 0; k<N; k++ )
    {

        x=xfirst;

```

```

y=yfirst;

int SN=0;
double S=0;
double S1=0;

while ( boundary(x,y)) // поканеграница
{

    double d=diam(x,y);
    double alpha= double (rand())/ double(RAND_MAX);

    double omega1=cos(2*PI*alpha);
    double omega2=sin(2*PI*alpha);
    alpha= double (rand())/ double(RAND_MAX);
    double om1=cos(2*PI*alpha);
    double om2=sin(2*PI*alpha);
    int indeks=1;
    double alpha1=0;
    double alpha2=0;
    while( indeks)
    {
        alpha1=double (rand())/ double(RAND_MAX);
        alpha2=double (rand())/ double(RAND_MAX);
        alpha2=4*alpha2/exp(1);
        if ( alpha2<(-4*alpha1*log(alpha1))) indeks++;
    }

    //cout<< "\n " <<alpha1 <<" " << alpha2 <<endl;

    double nu=alpha1*d;
    S=S+(S1-((d*d-nu*nu-nu*nu*log(d/nu))/log(d/nu)));
    SN=SN+1;
    S1=S1-d*d;
    x=x+omega1*d;
    y=y+omega2*d;
    //cout << "\n " <<x <<" " << y<<endl;

};
//cout << "\n boundary " <<x <<" " << y <<endl;
S=S+(S1/4)*phi_1(x,y)+phi_0(x,y);
//S=S+phi_0(x,y,z);
cout <<"\nUUUU" << SN;
U=U+S/N;
Disp=Disp+(S*S)/N;

};
Disp=Disp-U*U;
Disp=sqrt(fabs(Disp)/N);

cout << "\nPresise_u solutionUUUU" << u(xfirst,yfirst) ;

```

```

cout << "\nNumerical_solution" << U ;
cout << "\nDelta" << fabs(u(xfirst,yfirst)-U) << "\n" ;
cout << "\nDisp" << Disp << "\n" ;

    return 0;

}

```

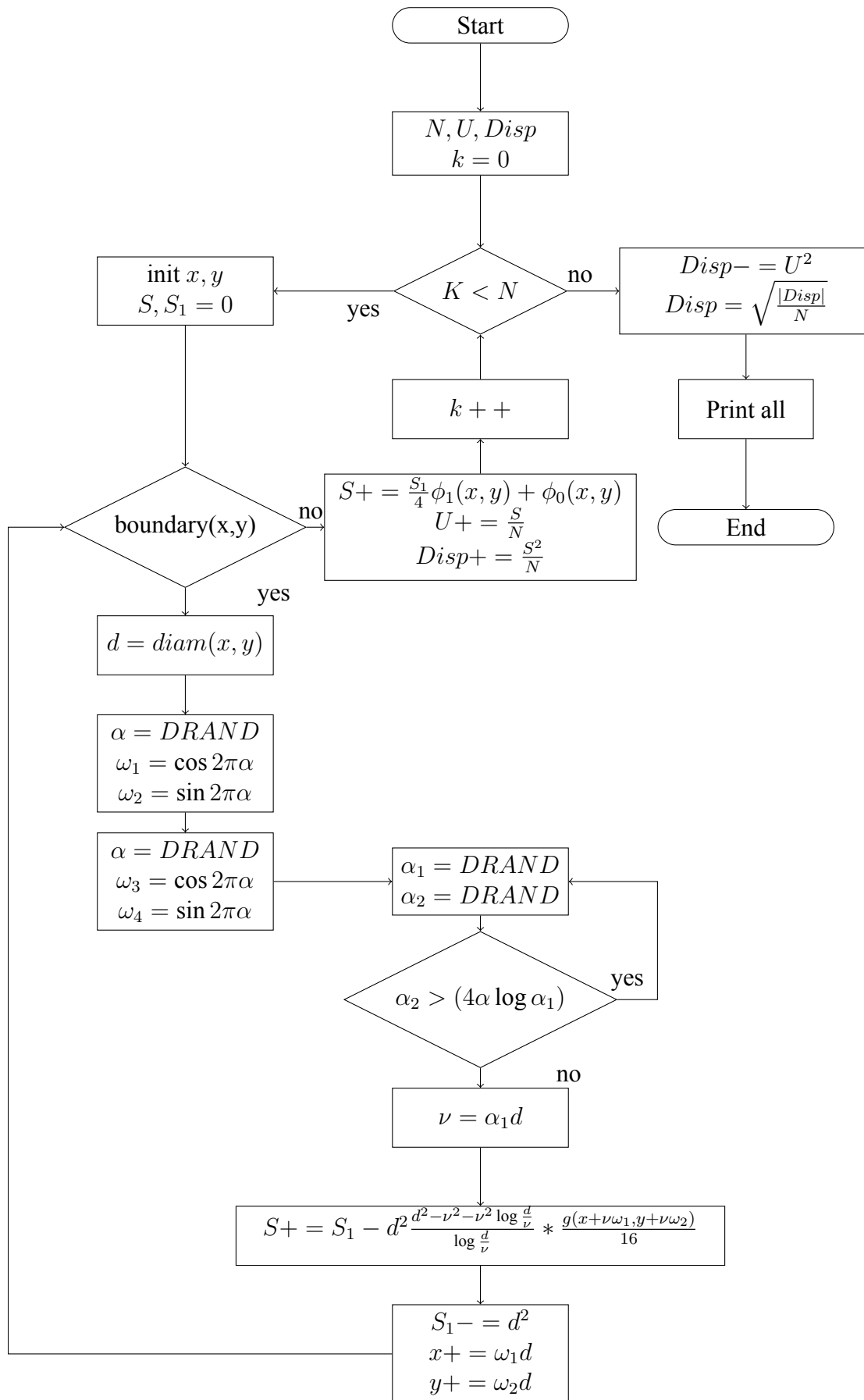


Рис. А.1: Принцип действия программы

Приложение В

Справка

В.1. Исполняемая программа

```
biharmon -l [[ -d ]] -h
biharmon -l [[ -d ]] -h [filename]
- l Latex-file - происходит создание файла report.tex
- d Display - вывод данных на дисплей
- h html-file - происходит создание файла report.html
Если файл существует к имени добавляется индекс.
```

```
filename - файл данных;
Приоритет -l, -h, -d
```

В.2. Библиотека

```
Открытые методы класса
init(int argc, char *args[])
setFunPhi();
```

В.3. Файл данных

```
Построчный.
X Y [SectionName]
```

Приложение С

Выходные данные

С.1. tex,html

Отчет

$N=10^4$

x, y	h	$u(r)$	$u(r)$	$ u(r) $
0.5, 0.5	0.1	0.22	0.22	0.0004

Приложение D

Тезаурус

API - Интерфейс программирования приложений (иногда интерфейс прикладного программирования) (англ. application programming interface) — набор готовых классов, процедур, функций, структур и констант, предоставляемых приложением (библиотекой, сервисом) для использования во внешних программных продуктах.

MPI - Message Passing Interface (интерфейс передачи сообщений) — API для передачи информации, который позволяет обмениваться сообщениями между процессами, выполняющими одну задачу.