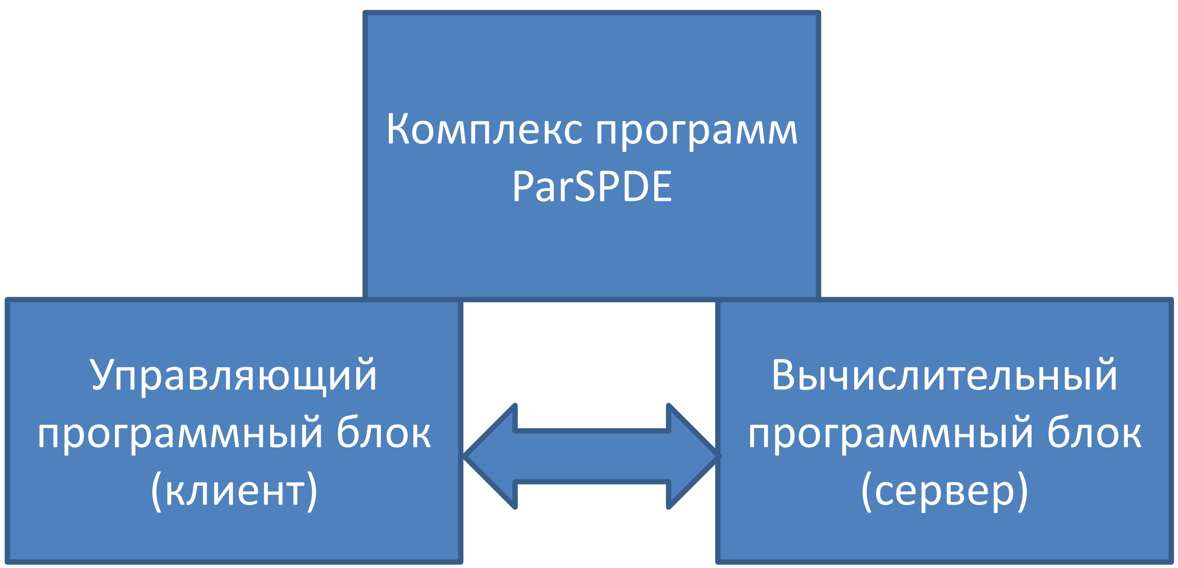
Russian Supercomputing Days

Комплекс программ ParSPDE для численного решения стохастических дифференциальных уравнений с частными производными методом статистического моделирования на суперкомпьютере

Д.Д. Смирнов
ИВМиМГ СО РАН

Описание комплекса программ ParSPDE

Комплекс программ ParSPDE соответствует модели «клиент-сервер», который состоит из управляющего программного блока («клиент») и вычислительного программного блока («сервер»).



Russian Supercomputing Days

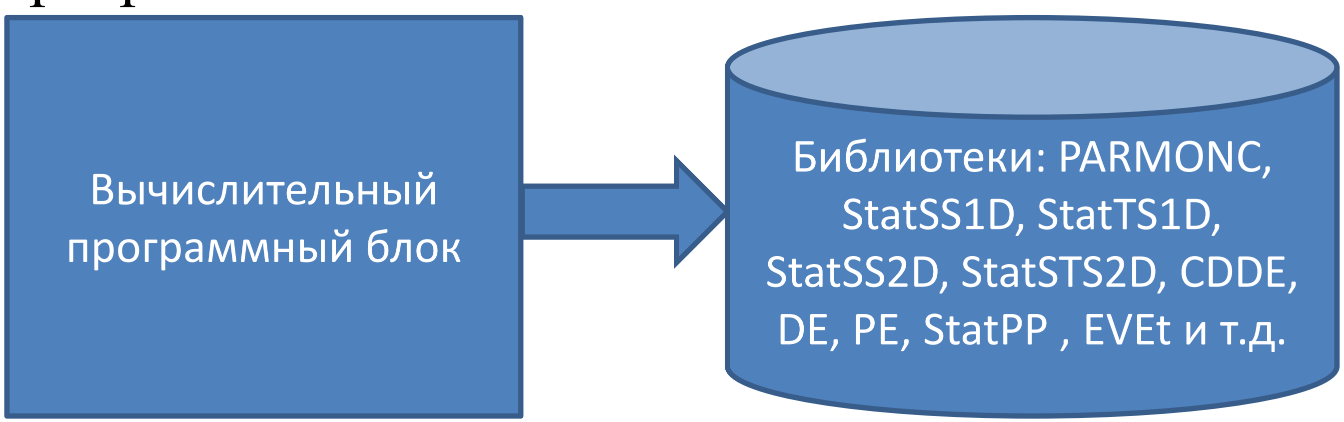
Управляющий программный блок

Управляющий программный блок устанавливается на персональном компьютере и состоит из двух объектов: объект «Задача» и объект «Расчёт».

Russian Supercomputing Days

Вычислительный программный блок

Вычислительный программный блок устанавливается на персональный компьютер или на суперкомпьютер (содержит различные библиотеки, например, библиотеку PARMONC) и производит расчёт задачи, подготовленной в управляющем программном блоке.



Russian Supercomputing Days

Описание библиотек

Библиотека PARMONC

Библиотека PARMONC предназначена для распараллеливания широкого круга трудоемких приложений метода Монте-Карло. Ядром библиотеки является быстрый и надежный длиннопериодный генератор псевдослучайных чисел. Для получения одного случайного числа, равномерно распределенного в интервале от 0 до 1 используется функция **rnd128**.

128-битный конгруэнтный генератор псевдослучайных чисел
$u_0 = 1, u_n \equiv u_{n-1} A \pmod{2^{128}}$, $\alpha_n = u_n 2^{-128}$, $n = 1,2,...$, где
$A \equiv 5^{100109} \pmod{2^{128}}$. Последовательность чисел $\{\alpha_n\}$ является периодической с длиной периоды $L = 2^{126} \approx 10^{38}$.

Параллельная реализация

Выбирается значение прыжка μ генератора из соображений, чтобы μ псевдослучайных чисел хватало для моделирования на каждом процессоре. Последовательность $\{u_n\}$ разбивается на подпоследовательности длины μ, начинающиеся с чисел $u_{m\mu}$, $m = 0,1,...$, где m – номер процессора. Разные подпоследовательности используются на разных процессорах, таким образом значение $u_{m\mu}$ находится по формуле $u_{(m+1)\mu} = u_{m\mu}A_\mu \pmod{2^{128}}$, где $A_\mu = A^\mu \pmod{2^{128}}$, тогда для моделирование на m-ом процессоре используется формула $\alpha_{m\mu} = u_{m\mu}2^{-128}$.

Russian Supercomputing Days

Библиотеки StatSS2D, StatSTS2D, PE, EVEt

Библиотеки StatSS2D, StatSTS2D, PE, EVEt используются при решении двумерных СДУЧП, где требуется вычислять значения функции $U(x, y, t)$ в узлах сетки.

Библиотеки StatSS2D и StatSTS2D используются для вычисления Статистического пространственного сечения и Статистического пространственно-временного сечения соответственно.

Библиотека PE используется для оценки вероятности того, что значение функции $U(x, y, t)$ лежит в определённом интервале.

Библиотека EVEt используется для оценки среднего значения $U(x, y, t)$ в фиксированный момент времени.

Формальное определение введённых характеристик

Статистическое пространственное сечение

На области $\mathbb{T} \times \mathbb{U} = \{T_0 \le T \le T_{end};\ U_0 \le U \le U_{end}\}$ введём

сетку $\omega_{h_T h_U} = \left\{T_i = T_0 + ih_T, i = \overline{0, N_T}; U_j = U_0 + jh_U, j = \overline{0, N_U}\right\}$ с шагом $h_T = \frac{T_{end} - T_0}{N_T}$ и

с шагом $h_U = \frac{U_{end} - U_0}{N_U}$. Границы области $T_0, T_{end}, U_0, U_{end}$ и количество узлов сетки

$N_T + 1, N_U + 1$ вводятся произвольно. СПС строится следующим образом:

выбирается пространственная координата x_* и y_* и вычисляется количество пар $\left(t^k, U\left(x_*, y_*, t^k\right)\right)$,

попавших в $\left(T_i, U_j\right)$ площадку сетки $\omega_{h_T h_U}$ для всех моментов времени $t^k, k = \overline{0, K}$

и для всех смоделированных траекторий $m = \overline{1, M}$.

$W = \left\{W_{ij} | W_{ij} - \text{количество пар } \left(t^k, U\left(x_*, y_*, t^k\right)\right) \in \left(T_i, U_j\right), k = \overline{0, K}, m = \overline{1, M}\right\}$, где

индексы i и j площадки $\left(T_i, U_j\right)$ сетки $\omega_{h_T h_U}$ определяются следующим образом:

$i = \left[\frac{t^k - T_0}{h_T}\right], j = \left[\frac{U\left(x_*, y_*, t^k\right) - U_0}{h_U}\right]$, где [ ] – целая часть числа.

Формальное определение введённых характеристик

Статистическое пространственно-временное сечение (для x)

На области $\mathbb{X} \times \mathbb{U} = \{X_0 \le X \le X_{end};\ U_0 \le U \le U_{end}\}$ введём

сетку $\omega_{h_X h_U} = \left\{X_i = X_0 + ih_X, i = \overline{0, N_X}; U_j = U_0 + jh_U, j = \overline{0, N_U}\right\}$ с шагом $h_X = \frac{X_{end} - X_0}{N_X}$ и

с шагом $h_U = \frac{U_{end} - U_0}{N_U}$. Границы области $X_0, X_{end}, U_0, U_{end}$ и количество узлов сетки

$N_X + 1$, $N_U + 1$ вводятся произвольно. СПВС строится следующим образом:

выбирается пространственная координата y_* и выбирается момент времени t^*

и вычисляется количество пар $(x_i, U(x_i, y_*, t^*))$,

попавших в $\left(X_i, U_j\right)$ площадку сетки $\omega_{h_X h_U}$ для всех пространственных координат

x_i, $i = \overline{0, N}$ и для всех смоделированных траекторий $m = \overline{1, M}$.

$W = \left\{W_{ij} | W_{ij} - \text{количество пар } (x_i, U(x_i, y_*, t^*)) \in \left(X_i, U_j\right), i = \overline{0, N}, m = \overline{1, M}\right\}$, где

индексы i и j площадки $\left(X_i, U_j\right)$ сетки $\omega_{h_X h_U}$ определяются следующим образом:

$i = \left[\frac{x_i - X_0}{h_X}\right]$, $j = \left[\frac{U(x_i, y_*, t^*) - U_0}{h_U}\right]$, где [ ] – целая часть числа.

Формальное определение введённых характеристик

Статистическое пространственно-временное сечение (для y)

На области $\mathbb{Y} \times \mathbb{U} = \{Y_0 \le Y \le Y_{end};\ U_0 \le U \le U_{end}\}$ введём

сетку $\omega_{h_Y h_U} = \left\{Y_i = Y_0 + ih_Y, i = \overline{0, N_Y}; U_j = U_0 + jh_U, j = \overline{0, N_U}\right\}$ с шагом $h_Y = \frac{Y_{end}-Y_0}{N_Y}$ и

с шагом $h_U = \frac{U_{end}-U_0}{N_U}$. Границы области $Y_0, Y_{end}, U_0, U_{end}$ и количество узлов сетки

$N_Y + 1$, $N_U + 1$ вводятся произвольно. СПВС строится следующим образом:

выбирается пространственная координата x_* и выбирается момент времени t^*

и вычисляется количество пар $(y_i, U(x_*, y_i, t^*))$,

попавших в $\left(Y_i, U_j\right)$ площадку сетки $\omega_{h_Y h_U}$ для всех пространственных координат

y_i, $i = \overline{0, L}$ и для всех смоделированных траекторий $m = \overline{1, M}$.

$W = \left\{W_{ij} | W_{ij} - \text{количество пар } (y_i, U(x_*, y_i, t^*)) \in \left(Y_i, U_j\right), i = \overline{0, L}, m = \overline{1, M}\right\}$, где

индексы i и j площадки $\left(Y_i, U_j\right)$ сетки $\omega_{h_Y h_U}$ определяются следующим образом:

$i = \left[\frac{y_i - Y_0}{h_Y}\right]$, $j = \left[\frac{U(x_*, y_i, t^*) - U_0}{h_U}\right]$, где [ ] – целая часть числа.

Оценка среднего значения

Выбирается момент времени t^* и вычисляется

$$\langle U(x_i, y_j, t^*) \rangle = \frac{\sum_{m=1}^{M} \left(U(x_i, y_j, t^*) \right)_m}{M},\ i = \overline{0, N},\ k = \overline{0, K},$$ где $m = \overline{1, M}$ – количество смоделированных траекторий.

Постановка задачи

Двумерное уравнение теплопроводности имеет вид

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \nu\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}\right) + F(x,y,t),\ 0 < x < L_1,\ 0 < y < L_2,\ 0 < t \le T.$$

с начальными условиями

$$U(x,y,0) = \psi(x,y),\ 0 \le x \le L_1,\ 0 \le y \le L_2,\ t = 0$$

и граничными условиями

$$U(x,0,t) = \varphi_1(x,t),\ 0 \le x \le L_1,\ y = 0,\ 0 < t \le T,$$

$$U(x,L_2,t) = \varphi_2(x,t),\ 0 \le x \le L_1,\ y = L_2,\ 0 < t \le T,$$

$$U(0,y,t) = \varphi_3(y,t),\ x = 0,\ 0 \le y \le L_2,\ 0 < t \le T,$$

$$U(L_1,y,t) = \varphi_4(y,t),\ x = L_1,\ 0 \le y \le L_2,\ 0 < t \le T.$$

В данной работе источником $F(x,y,t)$ будет являться производная винеровского процесса $W(t)$, зависящего только от переменной t, с заданной интенсивностью σ.

Дискретная схема

На пространственно-временной области $\mathbb{X} \times \mathbb{Y} \times \mathbb{T} = \{0 \le x \le L_1;\ 0 \le y \le L_2;\ 0 \le t \le T\}$ введём сетку $\omega_{h_x h_y \tau} = \left\{x_i = ih_x, i = \overline{0, I}; y_j = jh_y, j = \overline{0, J}; t^k = k\tau, k = \overline{0, K}\right\}$ с пространственными шагами $h_x = \frac{L_1}{I}$ и $h_y = \frac{L_2}{J}$ и с временным шагом $\tau = \frac{T}{K}$.

Для решения задачи используется метод переменных направлений

$$\frac{U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} - U_{ij}^{k}}{\frac{\tau}{2}} = \nu\left(\frac{U_{i+1j}^{k+\frac{1}{2}} - 2U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} + U_{i-1j}^{k+\frac{1}{2}}}{h_x^2} + \frac{U_{ij+1}^{k} - 2U_{ij}^{k} + U_{ij-1}^{k}}{h_y^2}\right) + F_{ij}^{k+\frac{1}{2}};$$

$$\frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^{k+\frac{1}{2}}}{\frac{\tau}{2}} = \nu\left(\frac{U_{i+1j}^{k+\frac{1}{2}} - 2U_{ij}^{k+\frac{1}{2}} + U_{i-1j}^{k+\frac{1}{2}}}{h_x^2} + \frac{U_{ij+1}^{k+1} - 2U_{ij}^{k+1} + U_{ij-1}^{k+1}}{h_y^2}\right) + F_{ij}^{k+\frac{1}{2}};$$

$i = \overline{1, I-1}$, $j = \overline{1, J-1}$, $k = \overline{0, K-1}$,

$U_{ij}^{0} = \psi(x_i, y_j)$, $i = \overline{0, I}$, $j = \overline{0, J}$,

$U_{i0}^{k} = \varphi_1(x_i, t^k)$, $i = \overline{0, I}$, $k = \overline{1, K}$,

$U_{iJ}^{k} = \varphi_2(x_i, t^k)$, $i = \overline{0, I}$, $k = \overline{1, K}$,

$U_{0j}^{k} = \varphi_3(y_j, t^k)$, $j = \overline{1, J-1}$, $k = \overline{1, K}$,

$U_{Ij}^{k} = \varphi_4(y_j, t^k)$, $j = \overline{1, J-1}$, $k = \overline{1, K}$.

Решаемая задача

Решалась задача

$$dU = 0.125\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}\right)dt + \sigma\big(U(x,y,t)\big)dW(t),$$

$0 < x < 1,\ 0 < y < 1,\ 0 < t \le 1.$

с начальными условиями

$U(x,y,0) = 0,\ 0 \le x \le 1,\ 0 \le y \le 1,\ t = 0$

и граничными условиями

$U(x,0,t) = 0.2\sin\pi x,\ 0 \le x \le 1,\ y = 0,\ 0 < t \le 1,$

$U(x,1,t) = 0.2\sin\pi x,\ 0 \le x \le 1,\ y = 1,\ 0 < t \le 1,$

$U(0,y,t) = 0.2\sin\pi y,\ x = 0,\ 0 \le y \le 1,\ 0 < t \le 1,$

$U(1,y,t) = 0.2\sin\pi y,\ x = 1,\ 0 \le y \le 1,\ 0 < t \le 1.$

И рассматривались два варианта: $\sigma\big(U(x,y,t)\big) = 0.05$ и $\sigma\big(U(x,y,t)\big) = 10\cdot U(x,y,t)$.

Дискретизация решаемой задачи

Задавались следующие значения пространственных и временных шагов: $h_x = 10^{-4}$, $h_y = 10^{-4}$, $\tau = 10^{-6}$ и моделировалось $M = 10^7$ реализаций.

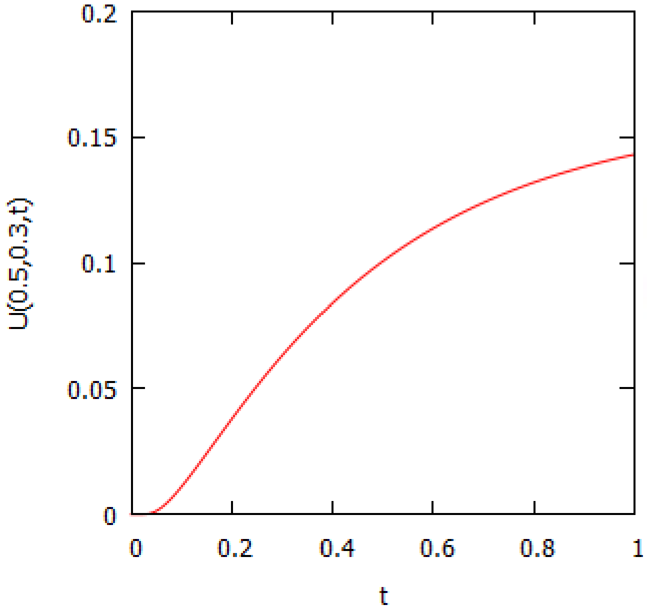
$$\frac{U_{ij}^{k+\frac{1}{2}}-U_{ij}^{k}}{\frac{\tau}{2}} = 0.125\left(\frac{U_{i+1j}^{k+\frac{1}{2}}-2U_{ij}^{k+\frac{1}{2}}+U_{i-1j}^{k+\frac{1}{2}}}{h_x^2}+\frac{U_{ij+1}^{k}-2U_{ij}^{k}+U_{ij-1}^{k}}{h_y^2}\right)+F_{ij}^{k+\frac{1}{2}};$$

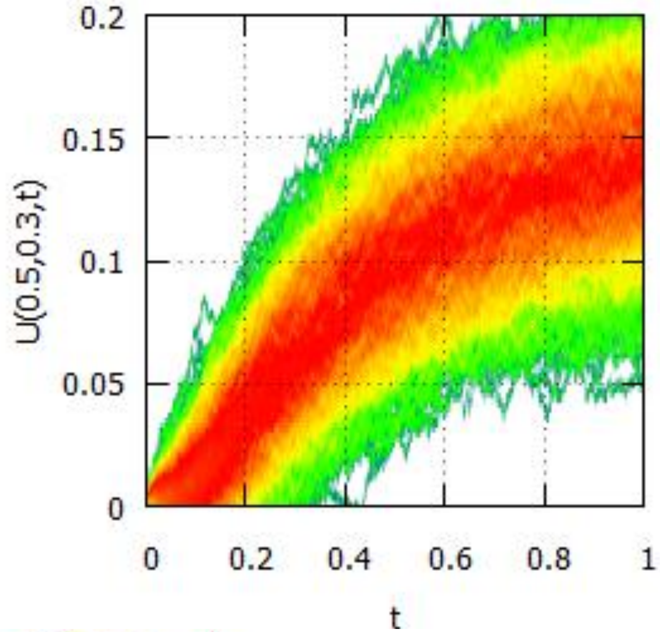
$$\frac{U_{ij}^{k+1}-U_{ij}^{k+\frac{1}{2}}}{\frac{\tau}{2}} = 0.125\left(\frac{U_{i+1j}^{k+\frac{1}{2}}-2U_{ij}^{k+\frac{1}{2}}+U_{i-1j}^{k+\frac{1}{2}}}{h_x^2}+\frac{U_{ij+1}^{k+1}-2U_{ij}^{k+1}+U_{ij-1}^{k+1}}{h_y^2}\right)+F_{ij}^{k+\frac{1}{2}};$$

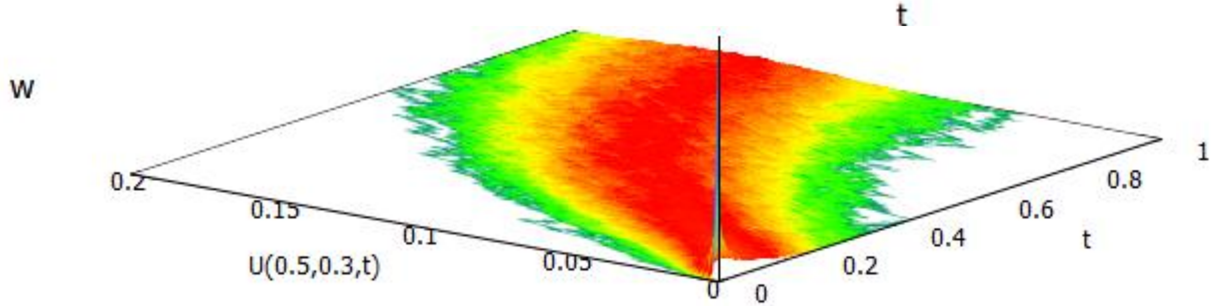
$F_{ij}^{k+\frac{1}{2}}=\begin{cases} 0.05\sqrt{\tau}\xi^{k+\frac{1}{2}} \\ 10U_{ij}^{k+\frac{1}{2}}\sqrt{\tau}\xi^{k+\frac{1}{2}} \end{cases}$, где $\xi^{k+\frac{1}{2}}$ последовательность независимых стандартных нормальных случайных величин, которые моделируются по формулам $\sqrt{-2\ln\alpha_1}\sin 2\pi\alpha_2$ и $\sqrt{-2\ln\alpha_1}\cos 2\pi\alpha_2$, где α_1,α_2 – независимые случайные величины, равномерно распределённые в интервале (0,1) и генерируемые с помощью датчика псевдослучайных чисел **rnd128**.

$i = \overline{1, 10^4 - 1}$, $j = \overline{1, 10^4 - 1}$, $k = \overline{0, 10^6 - 1}$,
$U_{ij}^0 = 0$, $i = \overline{0, 10^4}$, $j = \overline{0, 10^4}$,
$U_{i0}^k = 0.2\sin\pi x_i$, $i = \overline{0, 10^4}$, $k = \overline{1, 10^6}$,
$U_{iJ}^k = 0.2\sin\pi x_i$, $i = \overline{0, 10^4}$, $k = \overline{1, 10^6}$,
$U_{0j}^k = 0.2\sin\pi y_j$, $j = \overline{1, 10^4 - 1}$, $k = \overline{1, 10^6}$,
$U_{Ij}^k = 0.2\sin\pi y_j$, $j = \overline{1, 10^4 - 1}$, $k = \overline{1, 10^6}$.

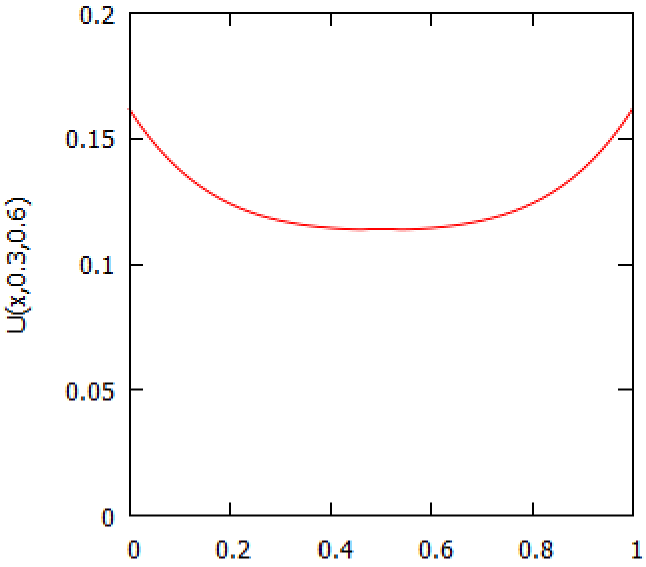
Пространственное сечение и Статистическое пространственное сечение при $x_* = 0.5$ и $y_* = 0.3$

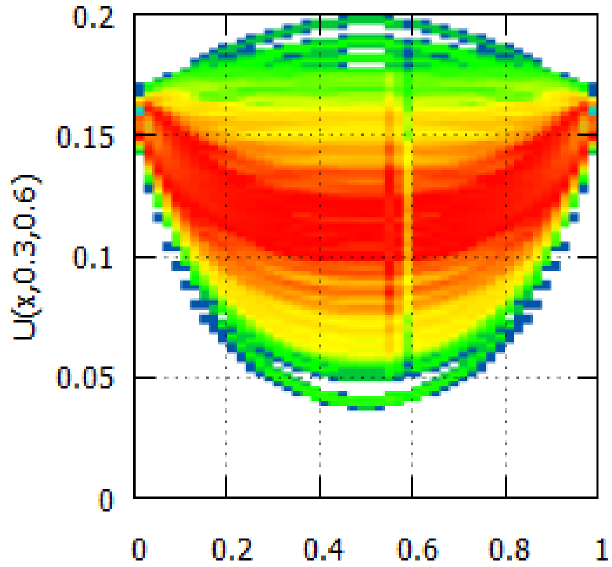


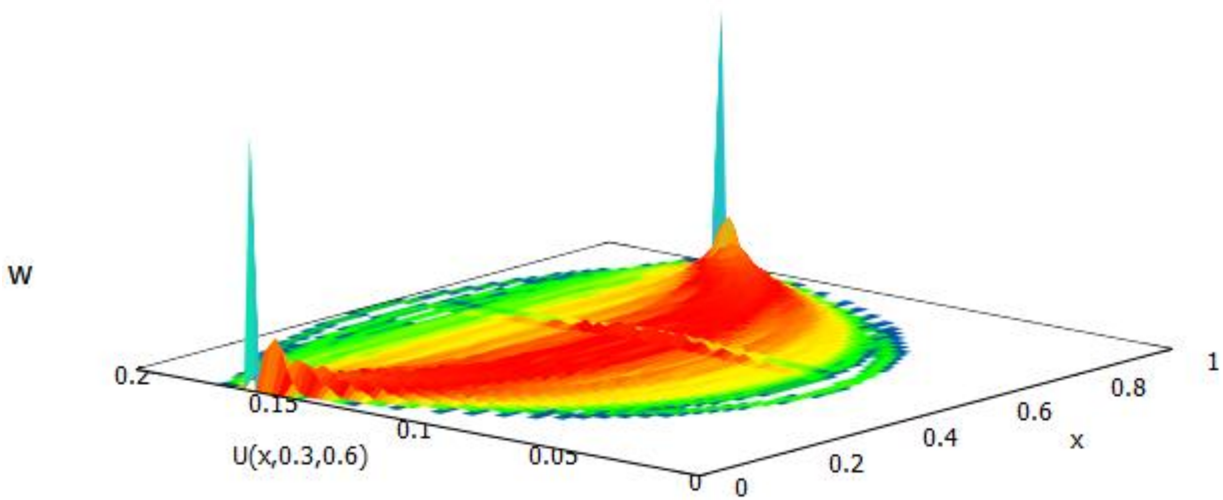




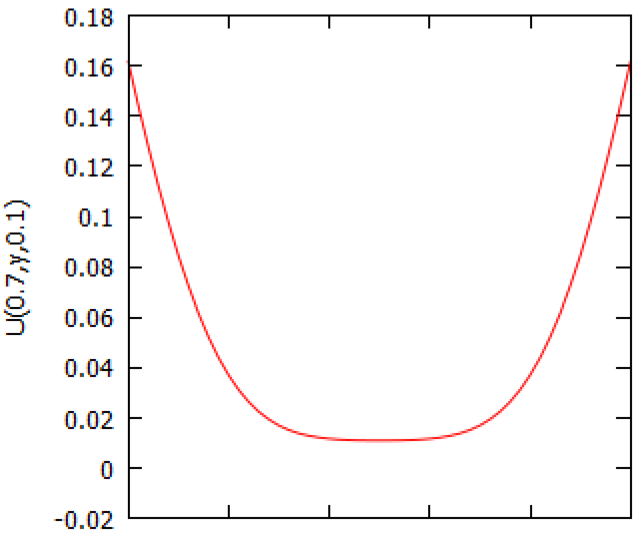
Пространственно-временное сечение и Статистическое пространственно-временное сечение при $\gamma_* = 0.3$ и $t^* = 0.6$ (ось x)

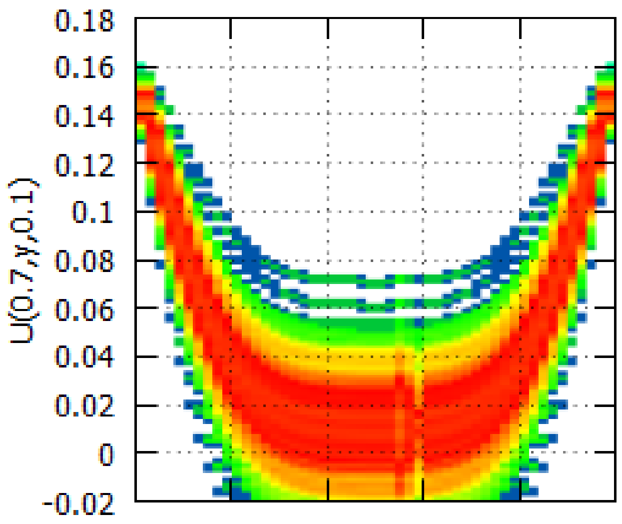


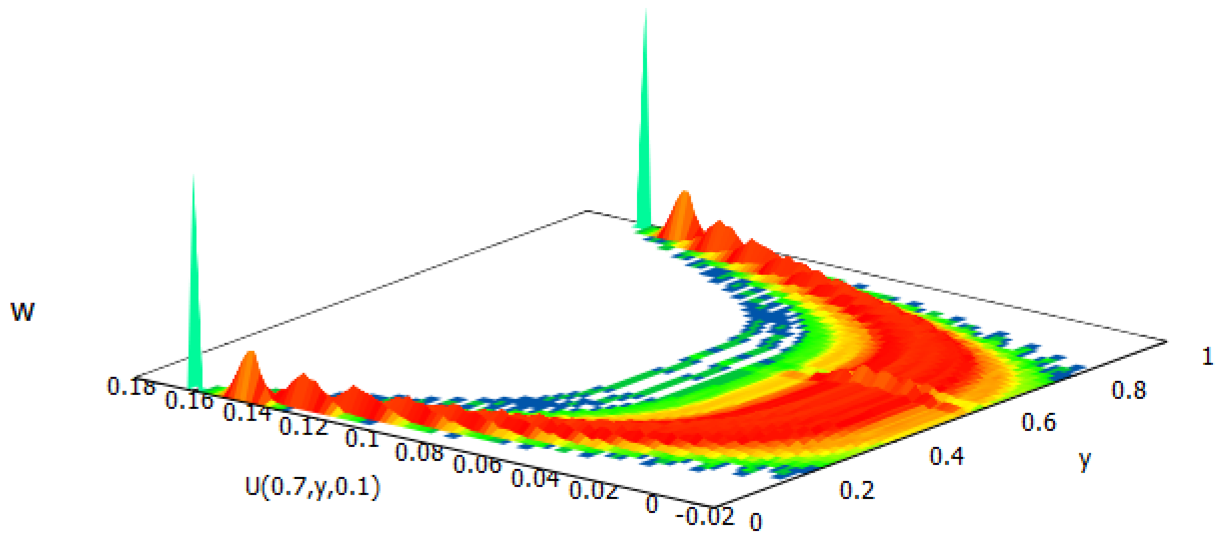




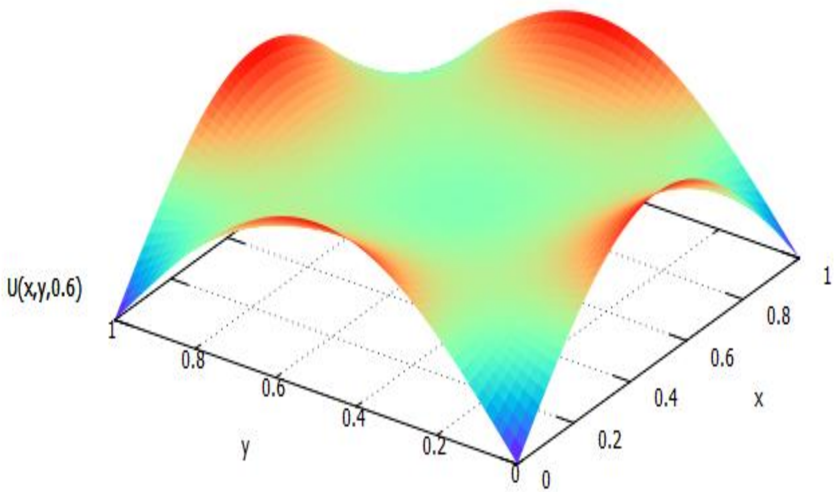
Пространственно-временное сечение и Статистическое пространственно-временное сечение при $x_* = 0.7$ и $t^* = 0.1$ (ось y)

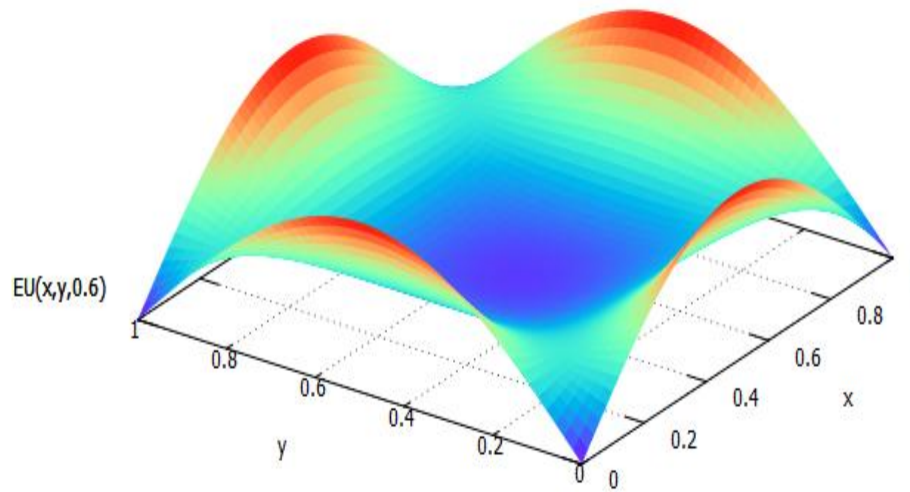


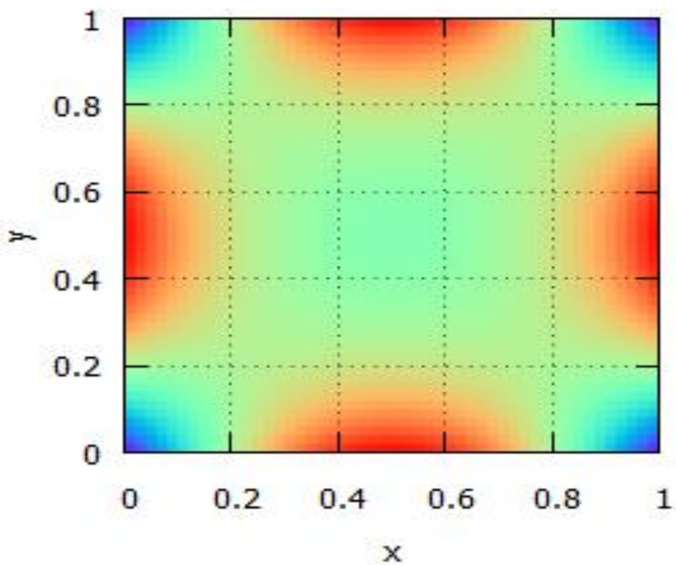


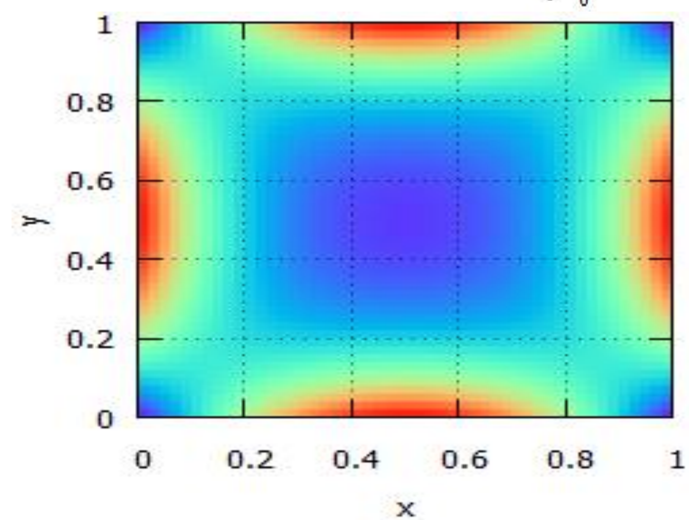


Поле температур и Оценка среднего значения поля температур при $t^* = 0.6$









Russian Supercomputing Days

Спасибо за внимание!