Второе задание курса 'Суперкомпьютерное моделирование и технологии программирования'

Чаплыгин Андрей Викторович ВМК МГУ, группа 603.

2018 Ноябрь

1 Описание задачи

Вариант 10.

В прямоугольнике $\Omega = [0,2] \times [0,1]$ с границами:

$$\gamma_R = \{(2, y), 0 \le y \le 1\}$$

$$\gamma_L = \{(0, y), 0 \le y \le 1\}$$

$$\gamma_T = \{(x, 1), 0 \le x \le 2\}$$

$$\gamma_R = \{(x, 0), 0 \le x \le 2\}$$

рассматривается уравнение Пуассона:

$$-\Delta u = -\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) = F(x, y)$$

с граничными условиями:

$$\gamma_R : u(2, y) = \phi(2, y) = 1 + \cos(2\pi y)$$

$$\gamma_L : \frac{\partial u}{\partial x_{x=0}} = \psi(0, y) = 0$$

$$\gamma_T : u(x, 1) = \phi(x, 1) = 1 + \cos(\pi x)$$

$$\gamma_B : \frac{\partial u}{\partial y_{y=0}} = \psi(x, 0) = 0$$

И правой частью $F(x,y) = \cos(\pi xy)((\pi y)^2 + (\pi x)^2)$. Аналитическое решение этой задачи известно:

$$u(x,y) = 1 + \cos(\pi xy)$$

2 Численное решение

Определим равномерную прямоугольную сетку с шагами по пространству h_x, h_y . Количество узлов сетки M, N. Тогда разностная схема решения выглядит следующим образом:

$$\begin{split} -\frac{1}{h_x^2}(u_{i+1,j}-2u_{i,j}+u_{i-1,j}) - \frac{1}{h_y^2}(u_{i,j+1}-2u_{i,j}+u_{i,j-1}) &= F_{i,j}, i = \overline{1,M-1}, j = \overline{1,N-1} \\ -\frac{1}{h_x^2}(u_{i+1,0}-2u_{i,0}+u_{i-1,0}) - \frac{2}{h_y^2}(u_{i,1}-u_{i,0}) &= F_{i,0} - \frac{2}{h_y}\psi_{i,0}, i = \overline{1,M-1}, j = 0 \\ -\frac{2}{h_x^2}(u_{1,j}-u_{0,j}) - \frac{1}{h_y^2}(u_{0,j+1}-2u_{0,j}+u_{0,j-1}) &= F_{0,j} - \frac{2}{h_x}\psi_{0,j}, i = 0, j = \overline{1,N-1} \\ -\frac{2}{h_x^2}(u_{1,0}-u_{0,0}) - \frac{1}{h_y^2}(u_{0,1}-u_{0,0}) &= F_{0,0} - (\frac{2}{h_x}+\frac{2}{h_y})\psi_{0,0} \\ u_{M,j} &= \phi_{M,j}, j = \overline{0,N} \end{split}$$

Полученную систему линейных уравнений предлагается решать методом наименьших невязок.

3 Программная реализация

3.1 Описание последовательной версии

Представим нашу разностную схему в матричном виде:

$$Lu = G$$

Заметим, что размерность $L \in R^{MN \times MN}$, т.к. на границах γ_R, γ_T задаются условия Дирихле и узлы на этой границе можно исключить из системы.

Т.к. в методе наименьших невязок только требуется вычислять Lv для вообще говоря произвольного v - то в программе реализован безматричный вариант метода (matrix-free). Вместо построения матрицы оператора L задается функция, вычисляющая Lv по заданному вектору v (matvec).

В качестве критерия остановки итерационного процесса использовался критерий:

$$||r_k|| = ||Lu_k - G|| < \epsilon$$

Последовательная версия лежит в git репозитории: https://github.com/Andrcraft9/laplace2D-solver, ветка master

3.2 Описание параллельной версии (MPI и OpenMP)

При параллельной реализации использовался метод декомпозиции области. Область делилась в двух направлениях: по х и по у. Для каждой подобласти добавлялась внерасчетная граница (halo points), с помощью которой происходила синхронизация между процессорами. В качестве функций перессылок использовались MPI блокирующие вызовы MPI Sendrecv, MPI Send, MPI Recv.

С помощью директив OpenMP были распараллелены главные циклы программы.

MPI версия программы лежит в git репозитории: https://github.com/Andrcraft9/laplace2D-solver, ветка pure mpi

Гибридная MPI/OpenMP версия программы лежит git репозитории: https://github.com/Andrcraft9/laplace2D-solver, ветка parallel_mpi

4 Тестирование последовательной программы и параллельной программы

4.1 Тестирование на персональном компьютере

Тестирование проводилось на персональном компьютере с процессором Intel(R) Core(TM) i7-7700HQ CPU @ $2.80 \mathrm{GHz}$, $\epsilon = 10^{-6}$.

Приведем сначала результаты последовательной программы.

1 Mesh	Time (sec)	Iterations	Error (L2)	Error (C)
20 x 20	0.005695	570	0.040182	0.005018
40×40	0.147708	4949	0.019857	0.001262
80×80	1.393880	33370	0.009860	0.000316
160×160	23.535339	153615	0.004905	0.000079

Из таблицы четко видно, что при увеличении сетки в два раза ошибка в норме L2 падает в 2 раза, а в норме C в 4 раза. Приведем рисунки как ведет себя численное решение на итерациях для двух сеток.

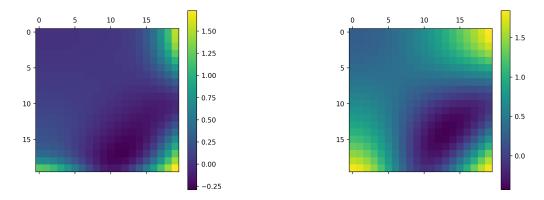


Рис. 1: Решение для сетки 20 на 20: слева на 10 итерации; справа на 100 итерации

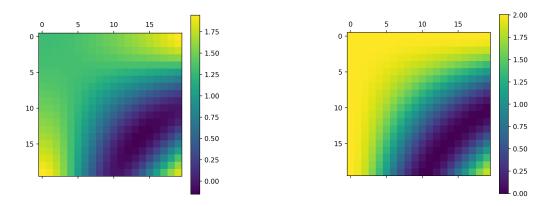


Рис. 2: Решение для сетки 20 на 20: слева на 300 итерации; справа финальное (570 итерация)

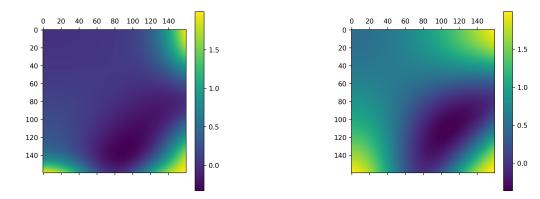


Рис. 3: Решение для сетки 160 на 160: слева на 1000 итерации; справа на 10000 итерации

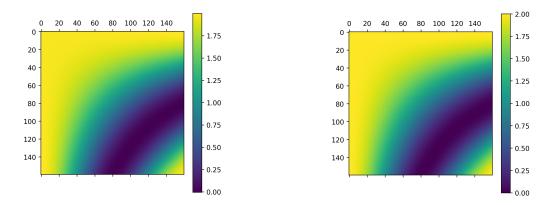


Рис. 4: Решение для сетки 160 на 160: слева на 50000 итерации; справа финальное (153615 итерация)

Cores	Threads	Mesh	Time (sec)	Iterations	Error $(L2)$	Error (C)
4	1	20×20	0.017169	518	0.040182	0.005018
4	1	40×40	0.188739	5007	0.019857	0.001262
4	1	80×80	0.816082	33397	0.009860	0.000316
4	1	160×160	7.892072	153611	0.004905	0.000079

Параллельная программа была протестирована на таких же сетках и было проведено сравнение с последовательной версией. В таблице представлены результаты для параллельной версии. Видно что ошибки получаются такие же, как для последовательной версии.

4.2 Тестирование на Blue Gene

Приведем результаты тестирования на суперкомпьютере Blue Gene (??).

В первой таблице показаны результаты тестирования MPI версии программы в режиме VN (режим виртуальных вычислительных узлов). Программа компилировалась компилятором IBM XL: mpixlcxx -O3 -qarch=450 -qtune=450.

Cores	Threads	Mesh	Time (sec)	Iterations	Error (L2)	Error (C)	$\operatorname{SpeedUp}$
128	1	512 x 512	736.060111	1676500	0.001499	0.000008	1.00
256	1	512 ± 512	464.799801	1676433	0.001499	0.000008	1.58
512	1	512 ± 512	340.541092	1675964	0.001499	0.000008	2.16
128	1	1024 x 1024	1419.707980	1000001	192.841024	0.375063	1.00
256	1	1024×1024	770.141615	1000001	192.841055	0.375063	1.84
512	1	1024×1024	437.776311	1000001	192.841038	0.375063	3.24

Во второй таблице показаны результаты тестирования гибридной MPI/OpenMP версии программы в режима SMP (режим симметричного мультипроцессора). Программа компилировалась компилятором IBM XL: mpixlcx_r -O3 -qsmp=omp -qarch=450 -qtune=450.

Cores	Threads	Mesh	Time (sec)	Iterations	Error $(L2)$	Error (C)	SpeedUp
128	4	512 x 512	685.643375	1675906	0.001499	0.000008	1.00
256	4	512 ± 512	613.482150	1676433	0.001499	0.000008	1.11
512	4	512 ± 512	593.274514	1675964	0.001499	0.000008	1.15
128	4	1024 x 1024	669.6818	1000001	192.841024	0.375063	1.00
256	4	1024×1024	498.4438	1000001	192.841024	0.375063	1.34
512	4	1024×1024	410.2103	1000001	192.841024	0.375063	1.63

Для задачи 1024 на 1024 пришлось поставить ограничение на 10000000 итераций, иначе задача не успевала посчитаться за лимит по времени (15 минут), за 10000000 итераций норма невязки успела упасть до 0.82. Для задачи 512 на 512 невязка упала до $\epsilon=10^{-6}$. Ускорение считалось относительно времени на 128 ядрах.

Видно, что для версии MPI - ускорение получается близкое к линейному для задачи 1024 на 1024 узлов. Для гибридной версии ускорение получается похуже - возможно это связано с особенностями реализации OpenMP для C++.

4.3 Тестирование на Polus

Приведем результаты тестирования на кластере Polus (??).

Из-за лимита тестирования по времени на кластере Polus использовалось ограничение по итерациям: 1000000 для задачи 512 на 512 и 100000 для задачи 1024 на 1024.

Приведем результаты тестирования MPI версии программы. Компилирование проводилось с использованием компилятора IBM (mpixlC) и флагами: -O3 -qstrict -qarch=pwr8 -qtune=pwr8. Тестирование проводилось вплоть до максимального лимита по количеству возможных ядер на polus - 64 ядра. Ускорение считалось относительно времени на 4 ядрах.

Cores	Threads	Mesh	Time (sec)	Iterations	Error (L2)	Error (C)	$\operatorname{SpeedUp}$
4	1	512 x 512	1417.981806	1000001	0.070567	0.000275	1.00
16	1	512 ± 512	393.908352	1000001	0.070561	0.000275	3.60
32	1	512 ± 512	232.955863	1000001	0.070569	0.000275	6.09
64	1	512 ± 512	209.950782	1000001	0.070571	0.000275	6.75
4	1	1024 x 1024	568.089891	100001	1173.411148	1.971368	1.00
16	1	1024×1024	153.858860	100001	1173.411148	1.971368	3.69
32	1	1024×1024	79.389629	100001	1173.411148	1.971368	7.15
64	1	1024×1024	63.293906	100001	1173.411148	1.971368	8.97

4.4 Профайлинг МРІ версии

Для задачи 1024 на 1024 точек на суперкомьютере Blue Gene был проведен профайлинг MPI версии программы для 512 ядер, результаты представлены на рисунке. Также приведено значения ускорения для разных частей параллельной версии по сравнению с последовательной.

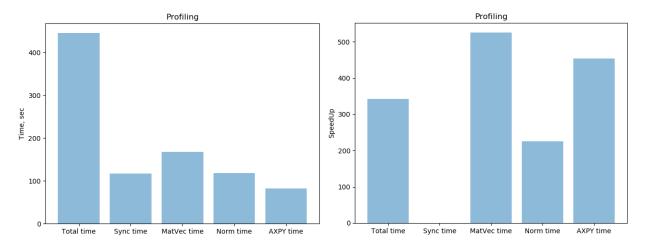


Рис. 5: Слева - время разных частей в программе для параллельной версии на 512 ядрах; справа - ускорение по сравнению последовательной версией. Total - общее время; sync - время синхронизаций между процессорами; matvec - время расчета функции "матрица на вектор"; norm - время расчета нормы; AXPY - время расчета всех функций вида $x=a^*x+y$

Видно, что для операций MatVec и AXPY получается линейное ускорение, расчет нормы ускоряется хуже в связи с необходимой редукцией для ее расчета.

5 Заключение

В рамках данной работы была реализована программа, решающая уравнение Пуассона в прямоугольнике с граничными условиями типа Дирихле и Неймана на границах. Была реализована последовательная версия, параллельная МРІ версия и гибридная MРІ/OpenMP версия. Все версии программ были протестированы и показано, что при увеличении сетки в 2 раза ошибка в норме C падает в 4 раза и в норме L_2 в 2 раза, как и должно быть согласно теории. Параллельные версии были протестированы на суперкомпьютере Blue Gene и кластере Polus. На обоих платформах было получено хорошее ускорение, близкое к линейному.