

Задание по курсу «Суперкомпьютерное моделирование и технологии»

сентябрь 2017 - декабрь 2017

Содержание

Содержание	1
1 Введение	1
2 Математическая постановка дифференциальной задачи	1
3 Численный метод решения задачи	2
4 Программная реализация	3
5 Варианты заданий	4
6 Требования к отчету	4
Список литературы	5

1 Введение

В качестве модельной задачи предлагается задача для трехмерного гиперболического уравнения в области, представляющей из себя прямоугольный параллелепипед. Индивидуальные варианты заданий отличаются типом граничных условий.

Задание необходимо выполнить на следующих ПВС Московского университета:

1. IBM Blue Gene/P. В качестве дополнительного задания предлагается реализовать использование “мэппинга” [1],
2. «Ломоносов» [2],
3. В качестве тестового компьютера можно использовать IBM eServer pSeries 690 Regatta, ее использования не обязательно. [3]

2 Математическая постановка дифференциальной задачи

В трехмерной замкнутой области

$$\Omega = [0 \leq x \leq L_x] \times [0 \leq y \leq L_y] \times [0 \leq z \leq L_z]$$

для $(0 < t \leq T]$ требуется найти решение $u(x, y, z, t)$ уравнения в частных производных

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \Delta u \quad (1)$$

с начальными условиями

$$u|_{t=0} = \varphi(x, y, z), \quad (2)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t=0} = 0, \quad (3)$$

при условии, что на границах области заданы однородные граничные условия первого рода

$$u(0, y, z, t) = 0, \quad u(L_x, y, z, t) = 0, \quad (4)$$

$$u(x, 0, z, t) = 0, \quad u(x, L_y, z, t) = 0, \quad (5)$$

$$u(x, y, 0, t) = 0, \quad u(x, y, L_z, t) = 0, \quad (6)$$

либо периодические граничные условия

$$u(0, y, z, t) = u(L_x, y, z, t), \quad u_x(0, y, z, t) = u_x(L_x, y, z, t), \quad (7)$$

$$u(x, 0, z, t) = u(x, L_y, z, t), \quad u_y(x, 0, z, t) = u_y(x, L_y, z, t), \quad (8)$$

$$u(x, y, 0, t) = u(x, y, L_z, t), \quad u_z(x, y, 0, t) = u_z(x, y, L_z, t). \quad (9)$$

Конкретная комбинация граничных условий определяется индивидуальным вариантом задания (см. п. 5).

3 Численный метод решения задачи

Содержание данного пункта основано на материале книги [4].

Для численного решения задачи введем на Ω сетку $\omega_{h\tau} = \bar{\omega}_h \times \omega_\tau$, где

$$\begin{aligned} T &= L = 1^*, \\ \bar{\omega}_h &= \{(x_i = ih, y_j = jh, z_k = kh), i, j, k = 0, 1, \dots, N, hN = 1\}, \\ \omega_\tau &= \{t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, K, \tau K = 1\}. \end{aligned}$$

Через ω_h обозначим множество внутренних, а через γ_h — множество граничных узлов сетки $\bar{\omega}_h$.

**: Приветствуется решение задачи в общем случае, когда $L_x \neq L_y \neq L_z \neq L$ и $T \neq 1$. В таком случае L_x, L_y, L_z, T — являются входными параметрами алгоритма. В этом случае получаем сетку*

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_h &= \{(x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z), i, j, k = 0, 1, \dots, N, h_x N = L_x, h_y N = L_y, h_z N = L_z\}, \\ \omega_\tau &= \{t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, K, \tau K = T\}. \end{aligned}$$

За решение задачи в такой, более общей формулировке полагаются дополнительные баллы.

Для аппроксимации исходного уравнения (1) с однородными граничными условиями (4)–(6) и начальными условиями (2)–(3) воспользуемся следующей системой уравнений:

$$\frac{y_{ijk}^{n+1} - 2y_{ijk}^n + y_{ijk}^{n-1}}{\tau^2} = \Delta_h y^n, \quad (x_i, y_j, z_k) \in \omega_h, \quad n = 1, 2, \dots, K-1,$$

Здесь Δ_h — семиточечный разностный аналог оператора Лапласа:

$$\Delta_h y^n = \frac{y_{i-1,j,k}^n - 2y_{i,j,k}^n + y_{i+1,j,k}^n}{h^2} + \frac{y_{i,j-1,k}^n - 2y_{i,j,k}^n + y_{i,j+1,k}^n}{h^2} + \frac{y_{i,j,k-1}^n - 2y_{i,j,k}^n + y_{i,j,k+1}^n}{h^2}.$$

Приведенная выше разностная схема является явной — значения y_{ijk}^{n+1} на $(n+1)$ -м шаге можно явным образом выразить через значения на предыдущих слоях.

Для начала счета (т.е. для нахождения y_{ijk}^2) должны быть заданы значения y_{ijk}^0 , y_{ijk}^1 , $(x_i, y_j, z_k) \in \omega_h$. Из условия (2) имеем

$$y_{ijk}^0 = \varphi(x_i, y_j, z_k), \quad (x_i, y_j, z_k) \in \omega_h.$$

Простейшая замена начального условия (3) уравнением $(y_{ijk}^1 - y_{ijk}^0)/\tau = 0$ имеет лишь первый порядок аппроксимации по τ . Аппроксимацию второго порядка по τ и h дает разностное уравнение

$$\begin{aligned} \frac{y_{ijk}^1 - y_{ijk}^0}{\tau} &= \frac{\tau}{2} \Delta_h \varphi(x_i, y_j, z_k), \quad (x_i, y_j, z_k) \in \omega_h. \\ y_{ijk}^1 &= y_{ijk}^0 + \frac{\tau^2}{2} \Delta_h \varphi(x_i, y_j, z_k) \end{aligned}$$

Разностная аппроксимация для периодических граничных условий выглядит следующим образом

$$\begin{aligned} y_{0jk}^{n+1} &= y_{Njk}^{n+1}, & y_{1jk}^{n+1} &= y_{N+1jk}^{n+1}, \\ y_{i0k}^{n+1} &= y_{iNk}^{n+1}, & y_{i1k}^{n+1} &= y_{iN+1k}^{n+1}, \\ y_{ij0}^{n+1} &= y_{ijN}^{n+1}, & y_{ij1}^{n+1} &= y_{ijN+1}^{n+1}, \end{aligned}$$

$i, j, k = 0, 1, \dots, N$.

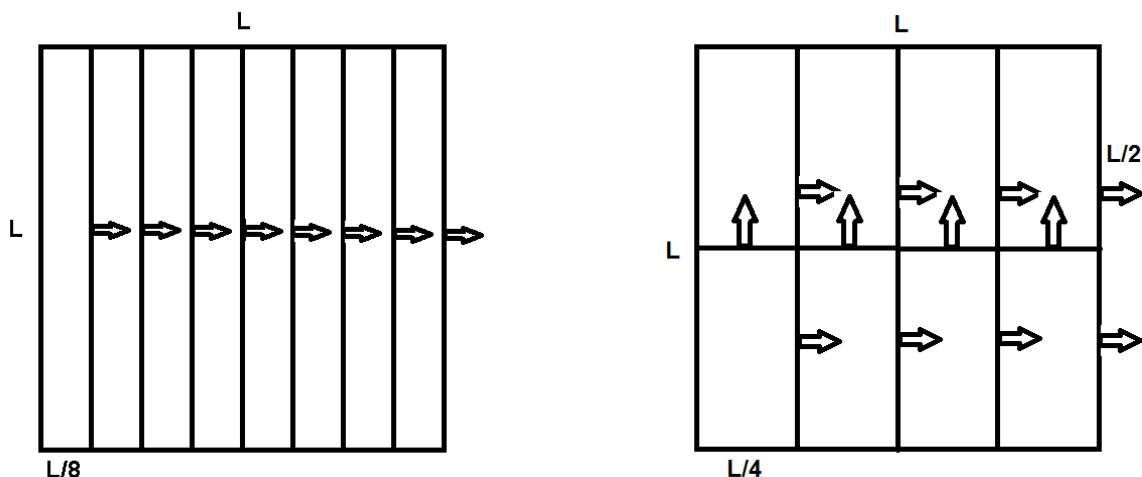
Для вычисления значений $y^0, y^1 \in \gamma_h$ допускается использование аналитического значения y , которое задается в программе еще для вычисления погрешности решения задачи.

4 Программная реализация

Студентам предлагается реализовать блочное разбиение области между процессами, поскольку в этом случае предполагается меньше межпроцессорных коммуникаций, по сравнению с ленточным.

На рисунке 1 изображен схематично двумерный ленточный и блочный вариант разбиения квадратной области на 8 частей.

В случае ленточного разбиения получаем $S_{strip} = 8L$ межпроцессорных коммуникаций. В блочном случае $S_{block} = 8(L/2) + 4(L/4) = 5L$ коммуникаций, то есть в 1.6 раз меньше. С ростом числа разбиений (и процессов, соответственно) это число будет только увеличиваться. Данные рассуждения можно обобщить и на трехмерный случай.



Ленточное разбиение.

Блочное разбиение.

Рис. 1: Виды разбиений

5 Варианты заданий

Индивидуальные варианты заданий отличаются комбинацией граничных условий. Варианты приведены в следующей таблице 1. Значениям «1-го рода» и «периодические» в

Таблица 1: Варианты заданий

Вариант	x	y	z
1	1-го рода	1-го рода	1-го рода
2	1-го рода	1-го рода	периодические
3	1-го рода	периодические	1-го рода
4	1-го рода	периодические	периодические
5	периодические	1-го рода	1-го рода
6	периодические	1-го рода	периодические
7	периодические	периодические	1-го рода
8	периодические	периодические	периодические

столбце x отвечают формулы (4) и (7), в столбце y — (5) и (8), в столбце z — (6) и (9).

6 Требования к отчету

Для того, чтобы успешно сдать задание, необходимо

- уверенно ориентироваться в программном коде;
- понимать семантику всех используемых в коде функций MPI и директив OpenMP;
- представить отчет с результатами исследования параллельных характеристик программы;
- представить программный код.

Исследование параллельных характеристик MPI-программы необходимо провести на обеих ПВС. На ПВС Blue Gene/P также необходимо провести исследование параллельных характеристик гибридной программы MPI/OpenMP и сравнить полученные результаты с программой, не использующей директивы OpenMP.

Отчет о выполнении задания должен содержать

- математическую постановку задачи;
- численные метод ее решения;
- краткое описание проделанной работы по созданию гибридной реализации MPI/OpenMP;
- результаты расчетов (см. ниже).

Расчеты проводятся для разных размеров задач и на разном числе процессоров. Результаты расчетов заносятся в таблицу. Значениями в ячейках таблицы являются время решения и ускорение (таблица 2). Таблица результатов расчетов на системе Blue Gene/P

Таблица 2: Пример оформления таблицы с результатами расчетов

<i>Число процессоров N_p</i>	<i>Число точек сетки N^3</i>	<i>Время решения T</i>	<i>Ускорение S</i>
1	128 ³		
2	128 ³		
4	128 ³		
8	128 ³		
1	256 ³		
2	256 ³		
4	256 ³		
8	256 ³		
1	512 ³		
2	512 ³		
4	512 ³		
8	512 ³		

должна содержать три дополнительных столбца. В двух из них должны быть приведены время и ускорение для гибридной версии MPI/OpenMP, а в третьем — отношение времени выполнения MPI-версии программы к времени работы гибридной версии MPI/OpenMP.

Следует выполнить около 20 шагов по времени.

IBM Blue Gene/P

Расчеты должны быть проведены для следующего числа процессоров: 128, 256 и 512. MPI-версию следует запускать в режиме SMP, гибридную версию MPI/OpenMP — в режиме SMP, но использовать при этом не четыре, а только три процессорных ядра. Расчеты должны быть проведены на сетках 512³, 1024³, 1536³.

«Ломоносов»

Расчеты должны быть проведены для следующего числа процессоров: 8, 16, 32, 64 и 128. Расчеты должны быть проведены на сетках 128³, 256³, 512³.

Список литературы

- [1] IBM Blue Gene/P. — <http://hpc.cmc.msu.ru>.
- [2] Суперкомпьютер «Ломоносов». — <http://hpc.cmc.msu.ru>.
- [3] IBM eServer pSeries 690 Regatta. — <http://www.regatta.cmc.msu.ru>.
- [4] Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. — М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1989.