문제 4 (대학원): Conjugate Gradient 방법 기반의 Poisson PDE 계산 병렬화 (배점: 대학원 30 점)

문제 개요

Poisson 방정식은 전기전자/재료/물리/화학/기계 등의 매우 다양한 계산과학분야에서 특정 현상을 계산하기 위해 폭넓게 활용되는 2차 편미분방정식 (Partial Differential Equation, PDE) 중 하나로, 주어진 조건 ρ 에 대한 해 Ψ 를 구하는 것이 그 목적이다. 실함수 Ψ 가 유클리드 공간에서 두 번 미분 가능한 경우 Poisson 방정식은 수식 (1)과 같이 정의된다. 2 차원 공간에서 Ψ 와 ρ 는 공간변수 x와 y의 함수가 되며 ($\Psi(x, y)$, $\rho(x, y)$), 결과적으로 수식 (1)의 Poisson 방정식은 수식 (2)와 같아진다..

$$\nabla^2\Psi = \rho \tag{1}$$

$$\frac{d^2\Psi(x,y)}{dx^2} + \frac{d^2\Psi(x,y)}{dx^2} = \rho(x,y) \tag{2}$$

유한차분법(Finite Difference Method)을 이용해 컴퓨터로 수식 (2)의 Poisson 방정식을 푸는 경우, 수식 (2)의 Poisson 방정식은 결국 선형시스템의 해를 계산하는 문제가 되며, 수식 (3)에 보여진 것과 같이 정방형 행렬 A와 RHS (Right-Hand-Side) 벡터 b가 주어졌을 때의 해 z를 구하는 문제와 같아진다.

$$Az = b \tag{3}$$

문제 설명

2차원 공간 (x, y) 에서 수식 (4)와 같이 정의되고, 수식 (5)의 경계조건을 만족하는 Poisson 방정식의 해 $\Psi(x, y)$를 계산하는 순차코드가 C 와 Fortran 으로 주어져 있다.

$$\frac{d^2\Psi(x,y)}{dx^2}+\frac{d^2\Psi(x,y)}{dx^2}=\sin(\pi x)\sin(\pi y)\ \ (0\le x,y\le 1) \tag{4}$$

$$\Psi(x,0)=\Psi(0,y)=\Psi(x,1)=\Psi(1,y)=0 \tag{5}$$

주어진 Poisson 방정식 계산 순차코드를 MPI를 이용해 병렬화하되, 다음에 제시된 병렬화 과정에서의 유의사항을 위반하는 경우 제출한 코드의 성능과 상관없이 0점으로 평가됨에 유의한다.

- **A**: (NxN) matrix.
- **x, r, b, p**: (Nx1) vector.

We want to solve $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. First compute $\mathbf{r_0} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax_0}$, $\mathbf{p_0} = \mathbf{r_0}$

loop for (j=1; j<=**K** ; j++)

$\mathbf{a_j} \leftarrow <\mathbf{r_j}\bullet\mathbf{r_j}>/<\mathbf{Ap_j}\bullet\mathbf{p_j}>$;

$\mathbf{x_{j+1}} \leftarrow \mathbf{x_j} + \mathbf{a_j p_j}$;

$\mathbf{r_{j+1}} \leftarrow \mathbf{r_j} - \mathbf{a_j Ap_j}$;

if ($\|\mathbf{r_{j+1}}\|/\|\mathbf{r_0}\| < \mathbf{e}$)

declare $\mathbf{r_{j+1}}$ is the solution of $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ and break the loop

$\mathbf{c_j} \leftarrow <\mathbf{r_{j+1}}\bullet\mathbf{r_{j+1}}>/<\mathbf{r_j}\bullet\mathbf{r_j}>$;

$\mathbf{p_{j+1}} \leftarrow \mathbf{r_{j+1}} + \mathbf{c_j p_j}$;

end loop

<그림 1> Conjugate Gradient 알고리즘의 실행 Flow

참고 및 유의 사항

1. 주어진 순차코드는 그림 1에 제시된 Conjugate Gradient (CG) 알고리즘을 이용해 Poisson 방정식의 해를 계산한다. 제시된 CG 알고리즘의 실행 Flow 및 주어진 순차코드의 subroutine 호출 구조를 유지하는 범위에서의 코드변경은 허용하나, CG 외 다른 알고리즘을 사용하거나 다른 공개코드를 사용해 주어진 subroutine 의 호출 구조를 변경하는 행위는 일체 금지한다.

2. 주어진 순차코드는 poisson_serial.c (f90) 에서 cgsolver_serial.c (f90) 와 matrix_constructor.c (f90) 에 정의된 subroutine 들을 호출해 사용하는 방식으로 수행된다. Compile 및 Link를 위한 Makefile 이 함께 주어져 있으며 이를 변경해 사용한다.
3. 동적메모리의 할당/삭제는 반드시 시간측정 구간 안에서 수행한다. 순차코드에 정의된 차분계수 (gridsize), 수렴조건 (tolerance), iteration 한도 (maxiteration) 값의 변경은 금지한다.
4. 본 문제는 편미분방정식, 유한차분법, CG 알고리즘의 사전지식이 없어도 풀 수 있다는 점을 참고한다. 행렬로 구성된 선형시스템을 푸는 문제이고, 순차 코드에 행렬 및 RHS 의 모든 정보가 주어져 있다. 주어진 순차코드의 해를 위해 그림 1에 제시된 CG 알고리즘의 실행 Flow를 참고한다. 벡터의 내적, 행렬-벡터의 곱만 알면 해석 가능한 알고리즘이다. **알고리즘의 이해를 위해 필요한 경우 Staff에게 질문할 수 있다.**

평가 방법

- 64 CPU 를 이용해서 병렬화된 코드 수행 시간을 `time` 으로 측정. Reference 병렬 코드 대비 실행 시간 비율로 순위 결정.
- 순차코드 실행이 끝나면 result 폴더 밑에 solution.dat 파일이 생성된다. 병렬 코드는 순차코드의 해와 오차범위내 (1e-6)에서 같은 해를 생성해야 하며, 해의 계산에 소요되는 iteration 수는 정확히 일치해야 한다. 본 조건이 만족되지 않는 경우 코드의 정확성 미달로 결격 처리한다.