Задание по курсу «Суперкомпьютерное моделирование и технологии»

сентябрь 2018 - декабрь 2018

Содержание

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. IBM Polus [2],

2 Математическая постановка дифференциальной задачи

В трехмерной замкнутой области

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

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

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \Delta u \tag{1}$$

с начальными условиями

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

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

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

$$u(0, y, z, t) = 0, \qquad u(L_x, y, z, t) = 0, \tag{4}$$

$$u(x, 0, z, t) = 0, \qquad u(x, L_y, z, t) = 0, \tag{5}$$

$$u(x, y, 0, t) = 0, \qquad u(x, y, L_z, t) = 0, \tag{6}$$

либо периодические граничные условия

$$u(0, y, z, t) = u(L_x, y, z, t), \qquad u_x(0, y, z, t) = u_x(L_x, y, z, t), \tag{7}$$

$$u(x, 0, z, t) = u(x, L_y, z, t), \qquad u_y(x, 0, z, t) = u_y(x, L_y, z, t), \tag{8}$$

$$u(x, y, 0, t) = u(x, y, L_z, t), \qquad u_z(x, y, 0, t) = u_z(x, y, L_z, t). \tag{9}$$

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

3 Численный метод решения задачи

Содержание данного пункта основано на материале книги [3].

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

$$T = T_0,$$
$$L_x = L_{x_0}, L_y = L_{y_0}, L_z = L_{z_0}$$
$$\bar{\omega}_h = \{(x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z), i, j, k = 0, 1, \dots, N, h_x N = L_x, h_y N = L_y, h_z N = L_z\},$$
$$\omega_\tau = \{t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, K, \tau K = T\}.$$

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

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

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

Здесь Δ_h — семиточечный разностный аналог оператора Лапласа:

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

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

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

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

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

$$\frac{u^1_{ijk} - u^0_{ijk}}{\tau} = \frac{\tau}{2}\Delta_h \varphi(x_i, y_j, z_k), \quad (x_i, y_j, z_k) \in \omega_h.$$
$$u^1_{ijk} = u^0_{ijk} + \frac{\tau^2}{2}\Delta_h \varphi(x_i, y_j, z_k)$$

Разностная аппроксимация для периодических граничных условий выглядит следующим образом

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

$i, j, k = 0, 1, \ldots, N$. ****За применение аппроксимации периодических условий, не выходящих за границы области, полагаются дополнительные баллы.***

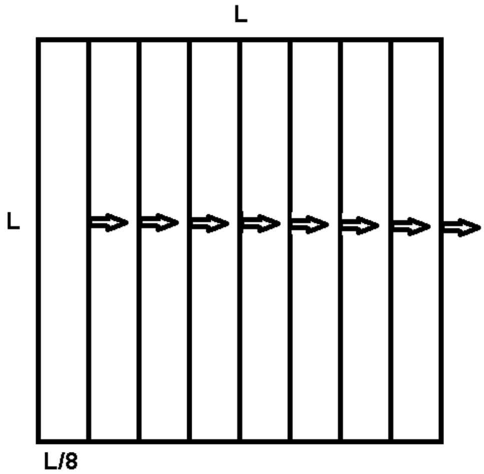
Для вычисления значений $y^0, y^1 \in \gamma_h$ допускается использование аналитического значения y, которое задается в программе еще для вычисления погрешности решения задачи.

4 Программная реализация

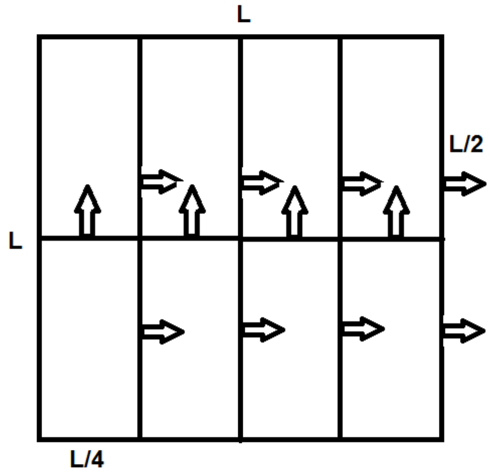
Студентам предлагается реализовать блочное разбиение области между процессами, поскольку в этом случае предполагается меньше межпроцессорных коммуникаций, по сравнению с ленточным. ****За создание алгоритма, производящего разбиение не только на четное число областей, полагаются дополнительные баллы.***

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

Число процессоров N_p	*Число точек сетки* N^3	*Время решения* T	*Ускорение* S	*Невязка* δ
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 512^3, 1024^3, 1536^3. ****За применение маппинга на этой машине полагаются дополнительные баллы.***

IBM Polus

Расчеты должны быть проведены на сетках 128^3, 256^3, 512^3.

Список литературы

[1] IBM Blue Gene/P. — `http://hpc.cmc.msu.ru`.

[2] Суперкомпьютер IBM Polus. — `http://hpc.cs.msu.su/polus`.

[3] *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы. — М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1989.