

Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова

Факультет вычислительной математики и кибернетики

Отчёт по практическому заданию 3
в рамках курса «Суперкомпьютерное моделирование и
технологии»

Вариант 8

Выполнил:
Шорошов Григорий Максимович,
622 группа

Москва, 2021

1. Математическая постановка 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

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

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

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 условия

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

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

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

Был реализован вариант 8 для функции

$$u(x, y, z, t) = \sin\left(\frac{2\pi}{L_x}x\right) \cdot \sin\left(\frac{4\pi}{L_y}y\right) \cdot \sin\left(\frac{6\pi}{L_z}z\right) \cdot \cos(a_t \cdot t), \quad a_t = \pi \sqrt{\frac{4}{L_x^2} + \frac{16}{L_y^2} + \frac{36}{L_z^2}}$$

и периодических граничных условий.

2. Численный метод решения задачи

Для численного решения задачи введем на Ω сетку $\omega_{h\tau} = \overline{\omega_h} \times \omega_\tau$, где

$$T = T_0,$$

$$L_x = L_{x_0}, \quad L_y = L_{y_0}, \quad L_z = L_{z_0},$$

$$\overline{\omega_h} = \{(x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z), i, j, k = 0, 1, \dots, N, h_xN = L_x, h_yN = L_y, h_zN = L_z\},$$

$$\omega_\tau = \{t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, K, \tau K = T\}.$$

Через ω_h обозначим множество внутренних, а через γ_h — множество граничных узлов сетки $\overline{\omega_h}$.

Для аппроксимации исходного уравнения (1) воспользуемся следующей системой уравнений:

$$\frac{u_{ijk}^{n+1} - 2u_{ijk}^n + u_{ijk}^{n-1}}{\tau^2} = \Delta_h u^n, (x_i, y_j, z_k) \in \omega_h, n = 1, 2, \dots, K-1, \quad (10)$$

где Δ_h — разностный аналог оператора Лапласа:

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

Значения $u_{i,j,k}^{n+1}$ можно явным образом выражаются через значения на n -м и $(n-1)$ -м шаге.

Зададим значения $u_{i,j,k}^0, u_{i,j,k}^1, (x_i, y_j, z_k) \in \omega_h$, исходя из условий (2) и (3):

$$u_{i,j,k}^0 = \phi(x_i, y_j, z_k), (x_i, y_j, z_k) \in \omega_h \quad (11)$$

$$u_{i,j,k}^1 = u_{i,j,k}^0 + \frac{\tau^2}{2} \Delta_h \phi(x_i, y_j, z_k) \quad (12)$$

Разностная аппроксимация для периодических граничных условий (7)–(9) выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} u_{0,j,k}^{n+1} &= u_{N,j,k}^{n+1} = \frac{u_{1,j,k}^{n+1} + u_{N-1,j,k}^{n+1}}{2} \\ u_{i,0,k}^{n+1} &= u_{i,N,k}^{n+1} = \frac{u_{i,1,k}^{n+1} + u_{i,N-1,k}^{n+1}}{2} \\ u_{i,j,0}^{n+1} &= u_{i,j,N}^{n+1} = \frac{u_{i,j,1}^{n+1} + u_{i,j,N-1}^{n+1}}{2} \end{aligned}$$

3. Описание программной реализации

Код решения можно найти по ссылке.

Конфигурация запуска хранится в формате INI, для чтения конфигурации использовалась библиотека ini.h. Пример файла конфигурации:

```
[Solver]
L_x=1.0
L_y=1.0
L_z=1.0
N_x=128
N_y=128
```

```

N_z=128
periodic_x=true
periodic_y=true
periodic_z=true
K=20
T=0.025
print_layer_err=true
save_layers=false
save_step=5
layers_path=./layers/

```

Данные из файла считывает объект класса Config, который создается в конструкторе класса Solver. Далее в конструкторе Solver:

- выполняем команду

```
MPI_Init(&argc, &argv);
```

- запрашиваем количество запущенных MPI процессов и свой номер:

```

MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);

```

- определяем сбалансированное распределение процессов по решетке, создаем виртуальную топологию и определяем координаты процессора в решетке:

```

MPI_Dims_create(size, 3, dims);
MPI_Cart_create(MPI_COMM_WORLD, 3, dims,
                config.periodic, true, &comm);
MPI_Cart_coords(comm, rank, 3, coords);

```

- вычисляем размеры и координаты блока решетки $\overline{\omega_h}$, за который отвечает процессор:

```
compute_block_coords();
```

- выделяем память (вызывая метод resize) под блоки на шагах $n + 1$, n , $n - 1$ алгоритма, блоки для хранения погрешности и аналитического решения, а также под значения, пересылаемые из соседних процессов:

```

Block3D<double> blocks[3];
Block3D<double> errs;
Block3D<double> analytical;
Block3DBound<double> bound;

```

- создаем типы для передачи граней блока соседним процессам.

Для хранения блоков используются класс Block3D, который содержит размер блока, его координаты и узлы решетки, которые хранятся в объекте класса Grid3D. Элементы решетки хранятся в объекте класса std::vector<double> размера P_x * P_y * P_z. Доступ к элементам решетки происходит через вызов оператора operator()(int i, int j, int k).

Каждому процессу соответствует один блок. Расчет внутренних элементов блока не зависит от соседних блоков и векторизуется через pragma omp parallel for. Однако для расчета граничных элементов блока необходимо:

- получить граничные элементы соседних блоков u^n ;
- если граница блока совпадает с границей области Ω , получить $u_{1,j,k}^{n+1}, u_{N-1,j,k}^{n+1}, u_{i,1,k}^{n+1}, u_{1,N-1,k}^{n+1}, u_{i,j,1}^{n+1}, u_{i,j,N-1}^{n+1}$.

Пересылка граничных элементов блоков реализована в методах send_inner_values (для внутренних узлов сетки) и send_boundary_values (для граничных узлов сетки). Алгоритм пересылки следующий:

- по каждой оси выполняется асинхронная отправка граней своего блока соседним процессам;
- для каждой оси выполняется блокирующее получение граней блоков соседних процессов;
- процесс дожидается завершения отправок.

Вычисление разностной схемы происходит в методе run класса Solver. Алгоритм работы следующий:

- рассчитываются аналитические значения на 0 слое;
- рассчитывается 1 слой по формуле (12);
- для всех $t_n, 2 \leq n \leq K$:
 - рассчитывается 2 слой по формуле (10);
 - вычисляется максимальная погрешность на слое;
 - если в конфигурации задано сохранение слоя, то слой сохраняется на диск.

4. Графики аналитического, посчитанного решений и погрешности

Рис. 1: Аналитическое и посчитанное решения для $N = 256$, $T = 0.025$, $L_x = L_y = L_z = 1.0$

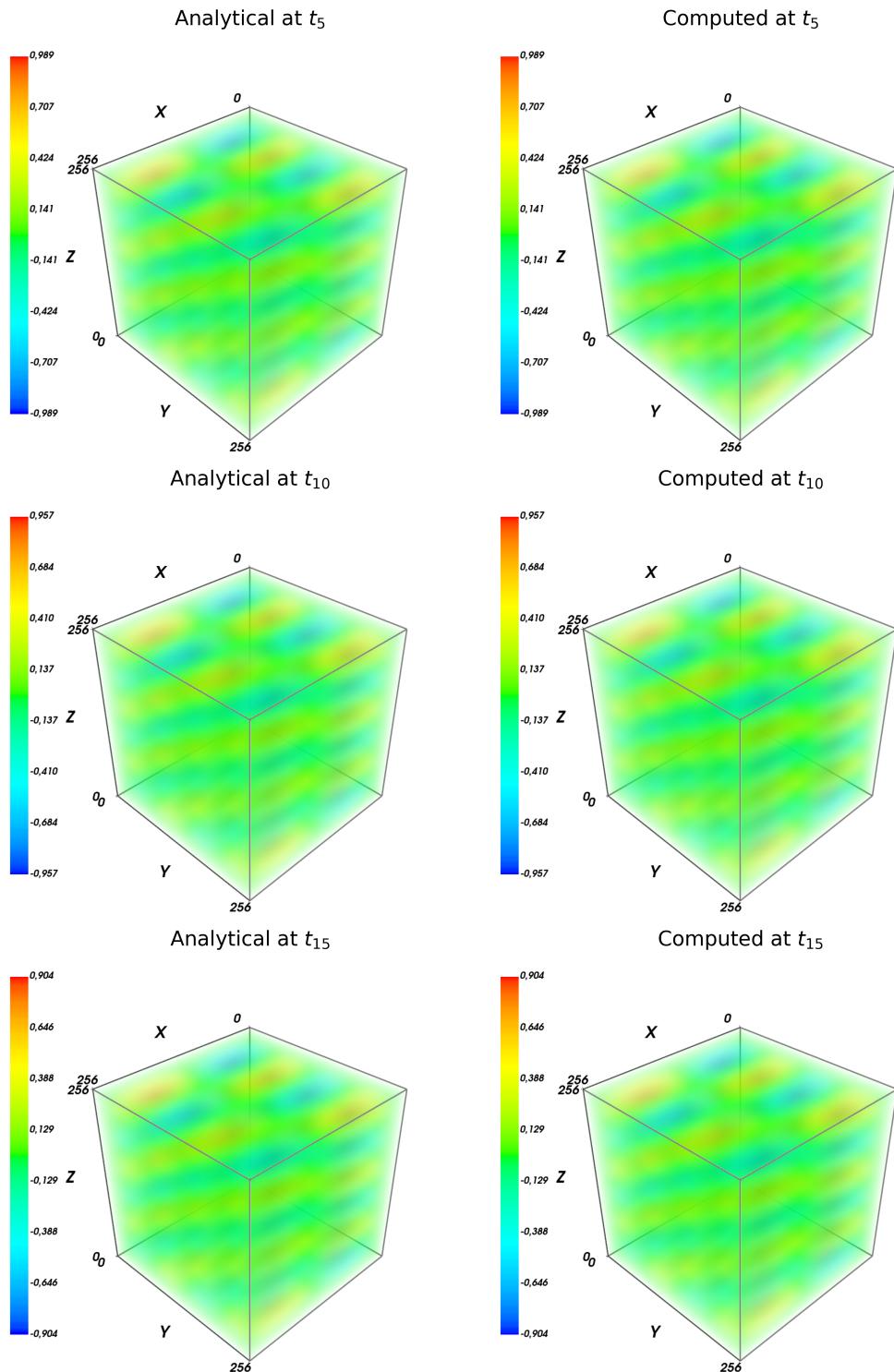
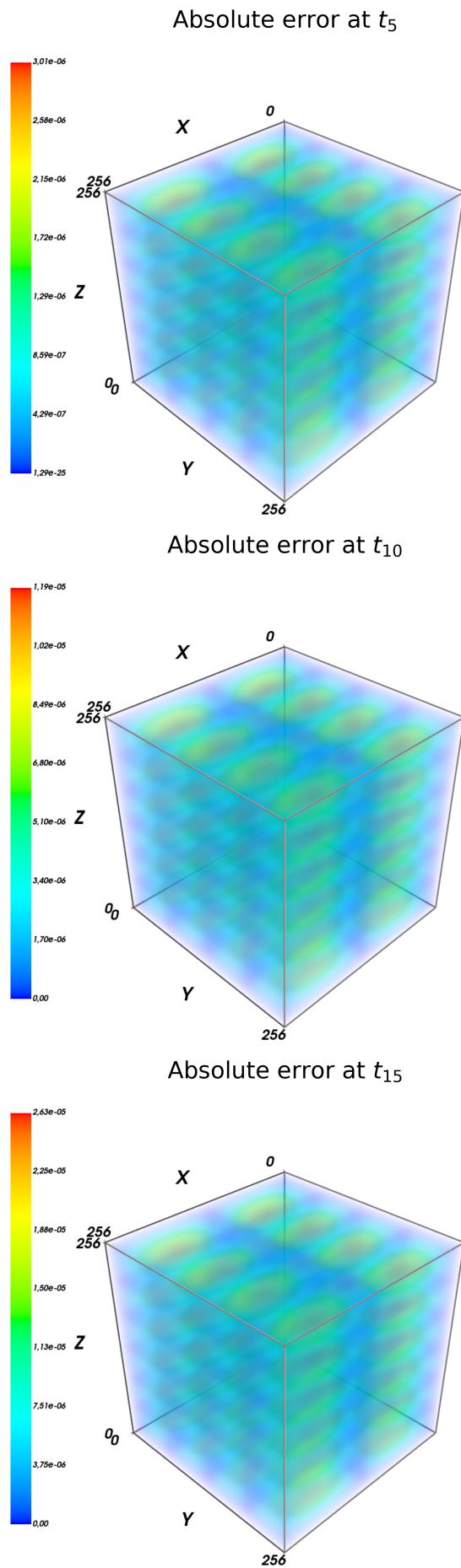


Рис. 2: Погрешность решения для $N = 256$, $T = 0.025$, $L_x = L_y = L_z = 1.0$



5. Результаты расчетов

Запуски программы проведены на системах Blue Gene/P и Polus для:

- $L_x = L_y = L_z = 1.0, K = 20, T = 0.025$
- $L_x = L_y = L_z = \pi, K = 20, T = 0.025$

Запуски на Blue Gene/P проводились в режиме SMP. Гибридная версия программы MPI/OpenMP запускалась на BlueGene/P с OMP_NUM_THREADS=4.

Таблица 1: Таблица с результатами расчётов для системы Polus, $L_x = L_y = L_z = 1.0, K = 20, T = 0.025$

Число точек сетки N^3	Число процессоров N_p	Время решения T_s	Ускорение S	Погрешность δ
128^3	10	0.500381	1.000	0.000217197
	20	0.480773	1.041	
	40	0.305147	1.640	
256^3	10	3.21378	1.000	4.55295e-05
	20	2.21081	1.454	
	40	1.51976	1.920	
512^3	10	25.7701	1.000	2.58835e-06
	20	16.9553	1.520	
	40	10.2758	2.741	

Таблица 2: Таблица с результатами расчётов для системы Polus, $L_x = L_y = L_z = \pi, K = 20, T = 0.025$

Число точек сетки N^3	Число процессоров N_p	Время решения T_s	Ускорение S	Погрешность δ
128^3	10	0.503114	1.000	2.43122e-05
	20	0.458164	1.046	
	40	0.379943	1.649	
256^3	10	3.21623	1.000	5.98586e-06
	20	2.53981	1.454	
	40	1.67373	2.115	
512^3	10	25.3253	1.000	1.4015e-06
	20	16.8522	1.520	
	40	9.40066	2.508	

Таблица 3: Таблица с результатами расчётов для системы Blue Gene/P, $L_x = L_y = L_z = 1.0$, $K = 20$, $T = 0.025$

N^3	N_p	Время решения T_{MPI}	Ускорение S_{MPI}	Время решения T_{MPI_OpenMP}	Ускорение S_{MPI_OpenMP}	$\frac{T_{MPI}}{T_{MPI_OpenMP}}$	Погрешность δ
128^3	64	1.24332	1.000	1.02164	1.000	1.217	0.000217197
	128	0.663452	1.874	0.550758	2.257	1.205	
	512	0.189424	6.564	0.16313	7.622	1.161	
256^3	64	9.24793	1.000	7.52347	1.000	1.229	4.55295e-05
	128	4.77661	1.936	3.88483	2.381	1.230	
	512	1.25157	7.389	1.03271	8.955	1.212	
512^3	64	71.1094	1.000	57.4299	1.000	1.238	2.58822e-06
	128	36.1014	1.970	29.2037	2.435	1.236	
	512	9.22459	7.709	7.51079	9.468	1.228	

Таблица 4: Таблица с результатами расчётов для системы Blue Gene/P, $L_x = L_y = L_z = \pi$, $K = 20$, $T = 0.025$

N^3	N_p	Время решения T_{MPI}	Ускорение S_{MPI}	Время решения T_{MPI_OpenMP}	Ускорение S_{MPI_OpenMP}	$\frac{T_{MPI}}{T_{MPI_OpenMP}}$	Погрешность δ
128^3	64	1.20823	1.000	0.984039	1.000	1.228	2.43122e-05
	128	0.643533	1.877	0.531532	2.273	1.211	
	512	0.18526	6.522	0.158304	7.632	1.170	
256^3	64	8.93799	1.000	7.2172	1.000	1.238	5.98586e-06
	128	4.61897	1.935	3.73138	2.239	1.238	
	512	1.21666	7.346	0.996557	8.969	1.221	
512^3	64	68.6497	1.000	55.008	1.000	1.248	1.4015e-06
	128	34.8717	1.969	27.988	2.453	1.246	
	512	8.92707	7.690	7.21071	9.521	1.238	