Конкурсное задание по суперкомпьютерной практике

Тьюторы: И.Н.Коньшин и А.А.Лёгкий
Команды: A, B, C, D (группа 1М-ММ)

1 Формулировка задачи диффузии

Рассматривается решение нестационарного уравнения диффузии с неизвестной $U = U(x, y, z, t)$:

$$\partial U/\partial t - \nabla(D \cdot \operatorname{grad} U) = f(x, y, z, t),$$

где точка (x, y, z) принадлежит $\Omega = [0; 1]^3$, а время t рассматривается на отрезке $[0; T]$. Граничные условия: $U(x, y, z, t) = g(x, y, z)$ на границе области $\partial\Omega$, а начальные условия: $U(x, y, z, 0) = 0$ в начальный момент времени $t_0 = 0$. Пусть конечный момент времени $T = 1$.

Будем использовать диагональный тензор D:

$$D = \begin{bmatrix} d_x & 0 & 0 \\ 0 & d_y & 0 \\ 0 & 0 & d_z \end{bmatrix},$$

где $d_x = 0.25$, $d_y = 0.15$, $d_z = 0.1$. Зададим также начально-краевые условия:

$$\begin{aligned} g(x, y, z) &= 0, \\ f(x, y, z) &= (d_x + d_y + d_z) \cdot \pi^2 \cdot \sin(\pi x)\sin(\pi y)\sin(\pi z). \end{aligned}$$

Решаемое уравнения имеет аналитическое решение:

$$U^* = \sin(\pi x)\sin(\pi y)\sin(\pi z) \cdot (1 - \exp(-(d_x + d_y + d_z) \cdot \pi^2\, t)).$$

Требуется найти решение дискретного уравнения на время $t = T$. Вычислить среднеквадратичную норму отклонения от аналитического решения.

2 Конечноразностная дискретизация уравнения диффузии

Построим в нашей области Ω равномерную сетку, состоящую из параллелепипедов. Пусть нам заданы количества точек N_x, N_y и N_z вдоль каждого из направлений Ox, Oy и Oz, соответственно. При этом количество ячеек вдоль каждого из направлений будет равно $N_x - 1$, $N_y - 1$ и $N_z - 1$, а шаги сетки будет равны $\Delta x = 1/(N_x - 1)$, $\Delta y = 1/(N_y - 1)$ и $\Delta z = 1/(N_z - 1)$, соответственно.

Обозначим через V_{ijk} узел сетки с координатами $x_i = i\,\Delta x$, $y_j = j\,\Delta y$ и $z_k = k\,\Delta z$. Будем описывать дискретную функцию $[U]^h$ в момент времени $t_n = n\,\Delta t$ её степенями свободы, которые расположим в узлах сетки, а степень свободы в узле V_{ijk} обозначим через U^n_{ijk}, $0 \leqslant i \leqslant N_x$, $0 \leqslant j \leqslant N_y$ и $0 \leqslant k \leqslant N_z$. Дискретизуем наше уравнение по пространству методом конечных разностей, а по времени явной схемой Эйлера. Заметим, что для такой дискретизации шаг по времени должен удовлетворять условию Куранта:

$$\Delta t < \tau^* = \frac{1}{2}\left(\frac{d_x}{(\Delta x)^2} + \frac{d_y}{(\Delta y)^2} + \frac{d_z}{(\Delta z)^2}\right)^{-1}.$$

Для определенности можно положить $\Delta t = 0.9\tau^*$.

Введём дискретные операторы вторых пространственных производных:

$$\begin{aligned}
L_{x,ijk}U^n &= (U^n_{i-1,j,k} - 2\,U^n_{i,j,k} + U^n_{i+1,j,k})/(\Delta x)^2,\\
L_{y,ijk}U^n &= (U^n_{i,j-1,k} - 2\,U^n_{i,j,k} + U^n_{i,j,k+1})/(\Delta y)^2,\\
L_{z,ijk}U^n &= (U^n_{i,j,k-1} - 2\,U^n_{i,j,k} + U^n_{i,j,k+1})/(\Delta z)^2,
\end{aligned}$$

а также $f^n_{i,j,k} = f(i\,\Delta x, j\,\Delta y, k\,\Delta z, n\,\Delta t)$ и $g_{i,j,k} = g(i\,\Delta x, j\,\Delta y, k\,\Delta z)$.

В этих обозначениях во всех внутренних точках численная схема записывается следующим образом:

$$U^{n+1}_{ijk} = U^n_{ijk} + \Delta t\left(f^n_{ijk} + d_x\,L_{x,ijk}U^n + d_y\,L_{y,ijk}U^n + d_z\,L_{z,ijk}U^n\right),$$

т.е., если $1 \leqslant i \leqslant Nx - 1$, $1 \leqslant j \leqslant Ny - 1$, $1 \leqslant k \leqslant Nz - 1$. Во всех граничных точках значения остаются старыми (функция g от времени не зависит):

$$U^{n+1}_{ijk} = g_{ijk},$$

т.е., если $(i\%N_x)\cdot(j\%N_y)\cdot(k\%N_z) = 0$ (это как раз и есть все граничные точки). Здесь $a\%b$ – операция взятия остатка от деления a на b (как это и делается в языках C и C++).

3 Особенности реализации

При отладке можно использовать, например, такие значения: $N_x = N_y = N_z = 9$; при расчетах можно взять значения $N_x = N_y = N_z = 129$ (помним, что шаг по x равен $\Delta x = 1/(N_x - 1)$, а количество узлов по x равно N_x). Если для получения более красивых результатов понадобится размерность больше, то обговорим это позднее.

Особенно стоит отметить, что не требуется хранить решение на каждом временном шаге, достаточно сохранять его только на текущем n-м шаге $t = t_n$, т.е. U^n, и на следующем вычисляемом $(n+1)$-м шаге $t = t_{n+1}$, т.е. U^{n+1}. Когда шаг сделан, то можно переставить указатели у массивов.

Даже при фиксированном константном значении размерностей сетки N_x, N_y и N_z для версии программы на распределенной памяти (с использованием логической сети процессов $p_x \times p_y \times p_z$) невозможно использовать простейшее объявление трехмерных массивов:

```
double U[Nz][Ny][Nx];
```

Поэтому, если вы решили использовать трехмерные массивы, то смотрите задание 7, где инициализируется двумерный массив. Если же решите работать с данными как с одномерными массивами (объявленными, например, так):

```
std::vector<double> U(Nx*Ny*Nz);
```

то к значению элемента U_{ijk} можно обратиться так:

```
U[k*Ny*Nx+j*Nx+i];
```

4 Параллельная реализация на распределенной памяти через MPI

При параллельной реализации на распределенной памяти с использованием $p_x \times p_y \times p_z$ процессов MPI, будем считать, что все размеры делятся нацело на число процессов. Тогда на каждом из процессов расчетная область также будет параллелепипедом, но уже меньшей размерности. Сами вычисления будут очень похожи, только на каждом шаге по времени нужно будет организовать обмен значений в узлах, которые лежат на границе.

Но об этом чуть позже...

5 Критерии оценки работы команды

- Корректность получения решения и небольшая норма ошибки.
- Скорость работы последовательной версии программы.
- Максимальная скорость работы на любом количестве процессов и ускорение при этом полученное.
- Теоретическая оценка ускорения, которое можно получить на данном кластере для этой задачи, и его сравнение с реальностью.
- Наглядность презентации и само выступление с представлением материалов.
- Командность работы (желательно, чтобы все члены команды внесли свой вклад: разработка структуры данных, написание кода, его отладка, проведение экспериментов, графическая обработка результатов, подготовка презентации, выступление с презентацией).
- Активность участия в обсуждении результатов коллег.

Критерий	A	B	C	D
Корректность				
Однопроцессорность				
Ускорение				
Теория				
Презентация				
Командность				
Активность				