Задание по курсу «Суперкомпьютерное моделирование и технологии»

сентябрь 2016 - декабрь 2016

Содержание

Содержание **1**

1 Введение **1**

2 Математическая постановка дифференциальной задачи **1**

3 Численный метод решения задачи **2**

4 Варианты заданий **3**

5 Требования к отчету **3**

Список литературы **4**

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 eServer pSeries 690 Regatta (использовать данную ПВС необязательно, рекомендуется для отладки программ) [1],
2. IBM Blue Gene/P. В качестве дополнительного задания предлагается реализовать использование "мэппинга" [2],
3. «Ломоносов» [3].

2 Математическая постановка дифференциальной задачи

В трехмерной замкнутой области

$$\Omega = [0 \leqslant x \leqslant L] \times [0 \leqslant y \leqslant L] \times [0 \leqslant z \leqslant L]$$

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

$$u(0, y, z, t) = 0, \qquad u(L, y, z, t) = 0, \tag{4}$$
$$u(x, 0, z, t) = 0, \qquad u(x, L, z, t) = 0, \tag{5}$$
$$u(x, y, 0, t) = 0, \qquad u(x, y, L, t) = 0, \tag{6}$$

либо периодические граничные условия

$$u(0, y, z, t) = u(L, y, z, t), \qquad u_x(0, y, z, t) = u_x(L, y, z, t), \tag{7}$$
$$u(x, 0, z, t) = u(x, L, z, t), \qquad u_y(x, 0, z, t) = u_y(x, L, z, t), \tag{8}$$
$$u(x, y, 0, t) = u(x, y, L, t), \qquad u_z(x, y, 0, t) = u_z(x, y, L, t). \tag{9}$$

Конкретная комбинация граничных условий определяется индивидуальным вариантом задания (см. п. 4).

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

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

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:

$$\frac{y^{n+1}_{ijk} - 2y^n_{ijk} + y^{n-1}_{ijk}}{\tau^2} = \Delta_h y^n, \quad (x_i, y_j, z_k) \in \omega_h, \quad n = 1, 2, \ldots, K-1,$$
$$y^{n+1}_{ijk} = 0, \quad (x_i, y_j, z_k) \in \gamma_h, \quad n = 0, 1, \ldots, K-1.$$

Здесь Δ_h — семиточечный разностный аналог оператора Лапласа:

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

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

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

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

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

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

Разностная аппроксимация для периодических граничных условий выглядит следующим образом

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

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

4 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).

5 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 всех трех 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 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.

Таблица 2: Пример оформления таблицы с результатами расчетов

Число процессоров N_p	*Число точек сетки* N^3	*Время решения* T	*Ускорение* S
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		

Следует выполнить около 20 шагов по времени.

IBM eServer pSeries 690 Regatta

Расчеты должны быть проведены для следующего числа процессоров: 1, 2, 4 и 8. Расчеты должны быть проведены на сетках 128^3, 256^3, 512^3.

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.

«Ломоносов»

Расчеты должны быть проведены для следующего числа процессоров: 8, 16, 32, 64 и 128. Расчеты должны быть проведены на сетках 128^3, 256^3, 512^3.

Список литературы

[1] IBM eServer pSeries 690 Regatta. — `http://www.regatta.cmc.msu.ru`.

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

[3] Суперкомпьютер «Ломоносов». — `http://hpc.cmc.msu.ru`.

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