



Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Задание 2

Исследование характеристик комплексов IBM Blue Gene/P и IBM Polus при решении задач с использованием стандартов MPI и OpenMP

Факультет: Вычислительной математики и кибернетики

Кафедра: Математической статистики

Группа: 620

Студент: Осипова Анастасия Андреевна

Предмет: Суперкомпьютерное моделирование и технологии

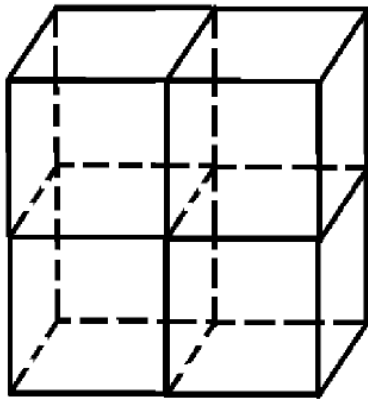
Москва, 2020

1. Формулировка задания

Необходимо исследовать характеристики вычислительных комплексов IBM Blue Gene/P и IBM Polus при решении задач с использованием стандартов MPI и OpenMP. Требуется:

- Реализовать алгоритм, вычисляющий значения аналитического и численного решений дифференциального уравнения с применением стандарта MPI для данных количества процессов, разрешения координатной сетки и границы области расчета
- Реализовать алгоритм, вычисляющий значения аналитического и численного решений дифференциального уравнения с применением стандартов MPI и OpenMP для данных количества процессов, разрешения координатной сетки и границы области расчета
- Построить графики численного и аналитического решений, а также график погрешности между ними
- Привести результаты расчетов, включающие в себя время решения и максимальное значение погрешности на узлах сетки

В ходе решения задачи необходимо реализовать блочное разбиение области по вычислительным блокам:



2. Математическое описание задачи и алгоритма

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

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

С начальными условиями

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

$$\frac{\partial u}{\partial t}|_{t=0} = 0,$$

При условии, что на границах области по оси Y заданы однородные граничные условия первого рода:

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

а на границах области по осям X и Z – периодические граничные условия:

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

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

Аналитическим решением данного уравнения является функция:

$$\sin\left(\frac{2\pi}{L_x}x\right) * \sin\left(\frac{\pi}{L_y}y + \pi\right) * \sin\left(\frac{2\pi}{L_z}z + 2\pi\right) * \cos(\alpha_t * t + \pi), \quad \alpha_t = \pi \sqrt{\frac{4}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2} + \frac{4}{L_z^2}}$$

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

$$T = T_0$$

$$L_x = L_{x0}, L_y = L_{y0}, L_z = L_{z0}$$

$$\overline{\omega_h} = \{(x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z), \quad i, j, k = 0 \dots N, h_x N = L_x, h_y N = L_y, h_z N = L_z\}$$

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

Через ω_h обозначим множество внутренних, а через γ_h – множество граничных узлов сетки.

Для аппроксимации исходного уравнения 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.

Таким образом, мы можем явным образом выразить значения каждого временного слоя через значения на предыдущих шагах по времени.

Для начала счета выразим значения на шагах 0 и 1 по времени:

$$u_{ijk}^0 = \phi(x_i, y_j, z_k), \quad (x_i, y_j, z_k) \in \omega_h,$$

$$u_{ijk}^1 = u_{ijk}^0 + \frac{\tau^2}{2} \Delta_h \phi(x_i, y_j, z_k), \quad (x_i, y_j, z_k) \in \omega_h,$$

Разностную аппроксимацию для периодических граничных условий по оси X выразим как

$$u_{0jk}^{n+1} = u_{Njk}^{n+1}, \quad u_{1jk}^{n+1} = u_{N+1jk}^{n+1}, \quad i, j, k = 0 \dots N$$

для периодических граничных условий по оси Z:

$$u_{ij0}^{n+1} = u_{ijN}^{n+1}, \quad u_{ij1}^{n+1} = u_{ijN+1}^{n+1}, \quad i, j, k = 0 \dots N$$

3. Ход работы

Для реализации задачи был написан класс Block, отвечающий за вычисления в рамках одного процесса. Каждому процессу соответствует свой номер, свой кусок области, и вычисления в рамках одного шага по времени происходят независимо. В конце каждого шага происходит синхронизация краевых значений процессов, а также обновляются края тех блоков, у которых нет соседей.

Структура проекта:

- src/main.cpp — инициализация переменных, MPI пространства, создание экземпляров Block в каждом процессе, основной цикл по времени (20 шагов).

-include/Block.h -- заголовочный файл

-src/Block.cpp — конструктор, деструктор и основной цикл класса

-src/BlockMaths.cpp — реализация математических функций класса

-src/CoordinatesGetter.cpp -- вспомогательные функции для получения корректных значений функций (учитывается периодичность по двум осям, выход за границу и т.д.)

-Makefile

В OMP реализации в коде дополнительно прописаны директивы omp в местах, где возможно распараллелить циклы (в основной функции класса Block).

Погрешность считалась отдельно на каждом блоке, максимум ее по всем процессам находился уже локально на компе с помощью скрипта на python по записанным логам. Через тот же скрипт рисовались графики с иллюстрациями.

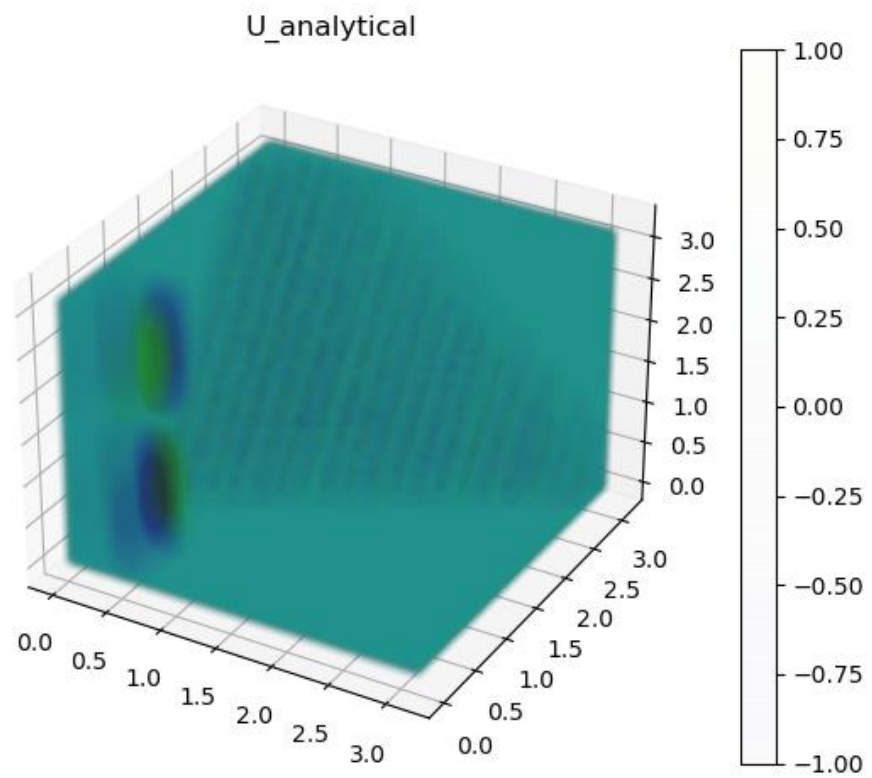


Рисунок 1. Аналитическое решение $u_{\text{analytical}}$ на шаге 20

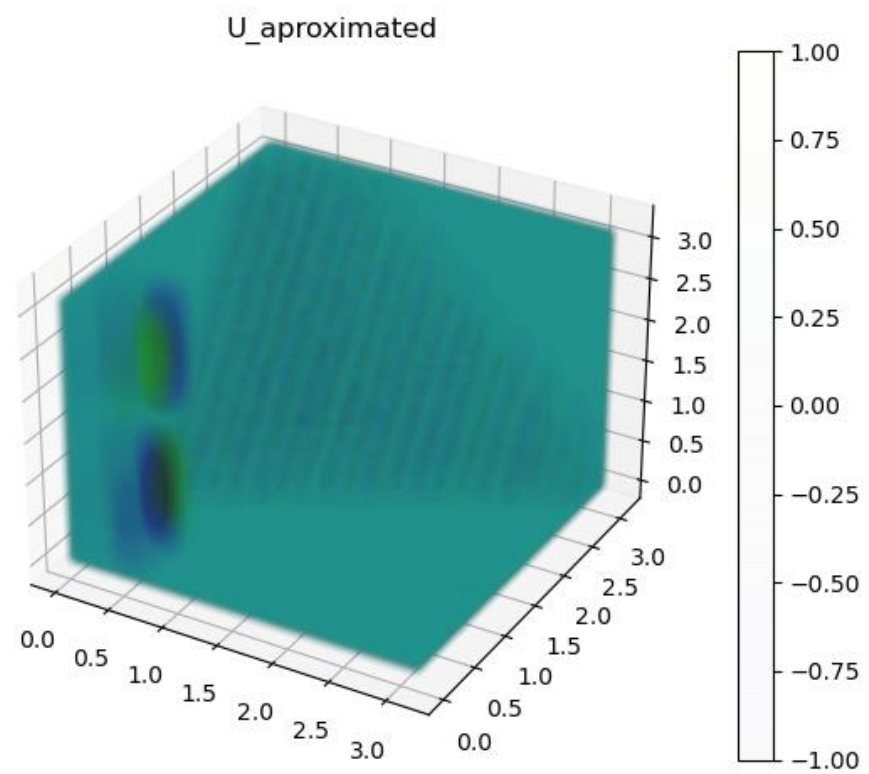


Рисунок 2. Посчитанное решение u_{aprox} на шаге 20

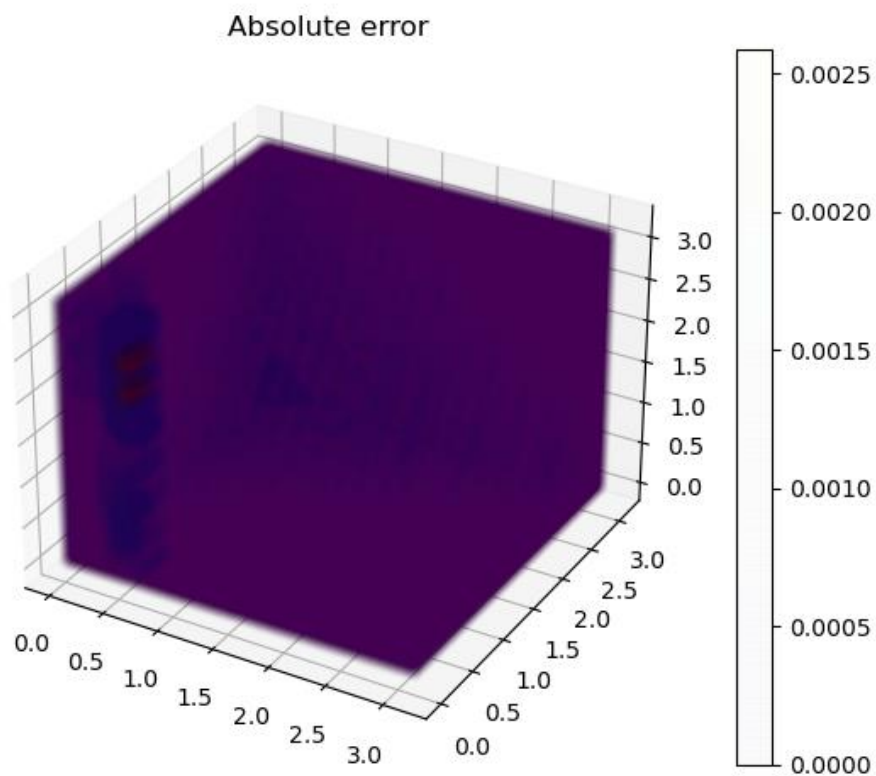


Рисунок 3. График погрешности на шаге 20

Число процессоров Np	Число точек сетки N ³	Время решения T для версии MPI, с	Ускорение S	Максимальная погрешность на 20 шаге δ	Время решения T для версии MPI/OpenMP, с	Ускорение версии MPI/OpenMP относительно версии MPI
64	128	2.15344	1.0	0.0010759900	1.70522	1.263
128	128	1.10278	1.953	0.0021229200	0.875254	1.260
256	128	0.596791	3.608	0.0027534000	0.487747	1.224
64	256	15.5244	1.0	0.0006687920	12.179	1.275
128	256	7.83207	1.982	0.0011336700	6.15396	1.273
256	256	3.9751	3.905	0.0014388200	3.13307	1.269
64	512	129.206	1.0	0.0003650520	98.4756	1.312
128	512	61.5088	2.101	0.0005788800	46.283	1.329
256	512	31.0316	4.164	0.0007290860	23.3873	1.327

Таблица 1. Результаты расчетов на IBM Blue Gene/P для L = 1, OMP_NUM_THREADS = 2

Число процессоров Nr	Число точек сетки N³	Время решения T для версии MPI, с	Ускорение S	Максимальная погрешность на 20 шаге δ	Время решения T для версии MPI/OpenMP, с	Ускорение версии MPI/OpenMp относительно версии MPI
64	128	2.33022	1.0	0.0010759900	1.84697	1.262
128	128	1.21091	1.924	0.0021229200	0.968655	1.250
256	128	0.641167	3.634	0.0027534000	0.512997	1.250
64	256	16.946	1.0	0.0006687920	13.322	1.272
128	256	8.55878	1.980	0.0011336700	6.73042	1.272
256	256	4.14411	4.090	0.0014388200	3.42362	1.210
64	512	141.026	1.0	0.0003650520	107.489	1.312
128	512	67.2601	2.097	0.0005788800	50.8761	1.322
256	512	33.94	4.155	0.0007290860	25.7237	1.319

Таблица 2. Результаты расчетов на IBM Blue Gene/P для L = 3.14, OMP_NUM_THREADS = 2

Число процессоров Nr	Число точек сетки N³	Время решения T для версии MPI, с	Ускорение S	Максимальная погрешность на 20 шаге δ
16	128	0.987894	1.0	0.0012806100
32	128	1.26972	0.778	0.0014388200
64	128	0.837583	1.179	0.0010759900
16	256	11.6432	1.0	0.0006442010
32	256	8.54756	1.362	0.0007290860
64	256	4.64231	2.508	0.0006687920
16	512	100.678	1.0	0.0003224920
32	512	54.1467	1.859	0.0003666610
64	512	28.7795	3.498	0.0003650520

Таблица 3. Результаты расчетов на IBM Polus для L = 1

Число процессоров Nr	Число точек сетки N³	Время решения T для версии MPI, с	Ускорение S	Максимальная погрешность на 20 шаге δ
16	128	2.0983	1.0	0.0012806100
32	128	0.952692	2.202	0.0014388200
64	128	0.893376	2.349	0.0010759900
16	256	13.017	1.0	0.0006442010
32	256	6.88227	1.899	0.0007290860
64	256	4.65105	2.810	0.0006687920
16	512	98.51	1.0	0.0003224920
32	512	55.3888	1.779	0.0003666610
64	512	29.1767	3.376	0.0003650520

Таблица 4. Результаты расчетов на IBM Polus для L = 3.14