

MPI: сеточные методы

НОЦ МФТИ 2011

Введение

- Основной принцип — декомпозиция по данным
- Пример уравнения теплопроводности для одно- и двумерного случая
- Явные схемы
- Итерационных процесс
- Обмен происходит на границах областей (приграничные ячейки, ghost cells)
- Число приграничных ячеек зависит от шаблона схемы
- Структурные/неструктурные сетки

Уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad \text{- уравнение в частных производных}$$

$$u_k^{n+1} = u_k^n + c \frac{\tau}{h^2} (u_{k-1}^n - 2u_k^n + u_{k+1}^n) \quad \text{- разностная схема в одномерном случае}$$

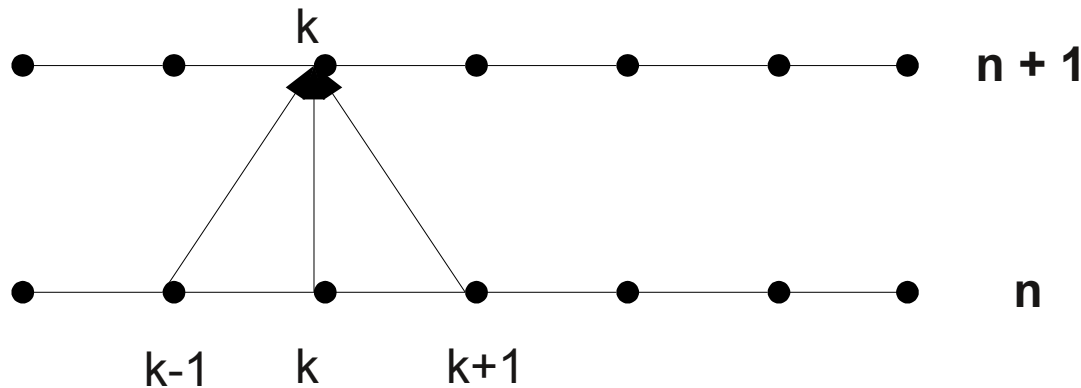
$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + c \frac{\tau}{h^2} (u_{i-1,j}^n + u_{i,j-1}^n - 4u_{i,j}^n + u_{i+1,j}^n + u_{i,j+1}^n)$$

- разностная схема в двумерном случае

τ - шаг по времени

h - шаг по координате

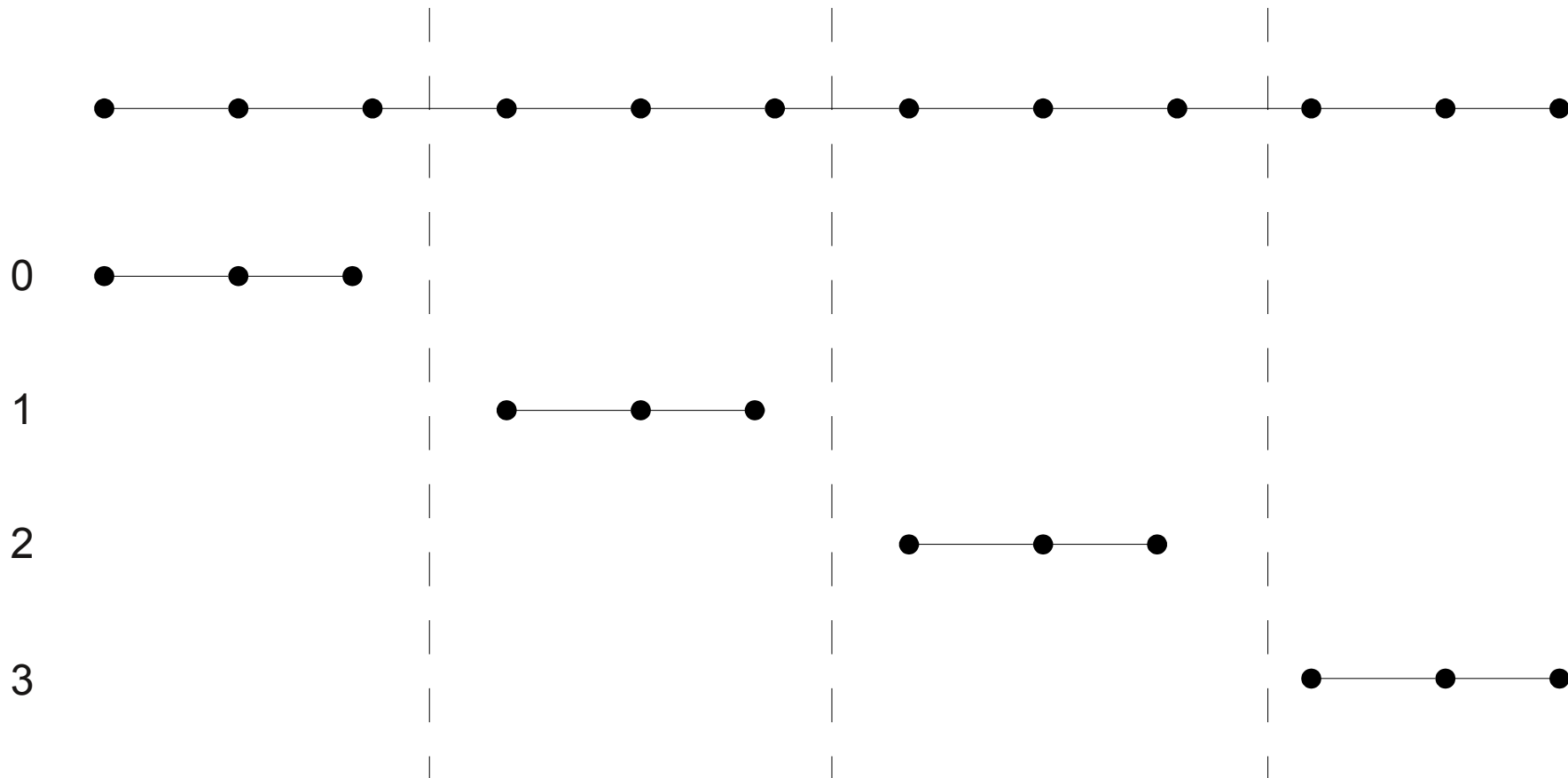
Расчетная область (1d)



- Для расчета следующего узла требуется три узла с предыдущего слоя
- Индексы узлов k , $k+1$, $k-1$
- На границах расчетной области выставлены граничные условия
- Хранится два временных слоя n и $n+1$

Декомпозиция по данным

- Разделение расчетной области между процессами на части по координате

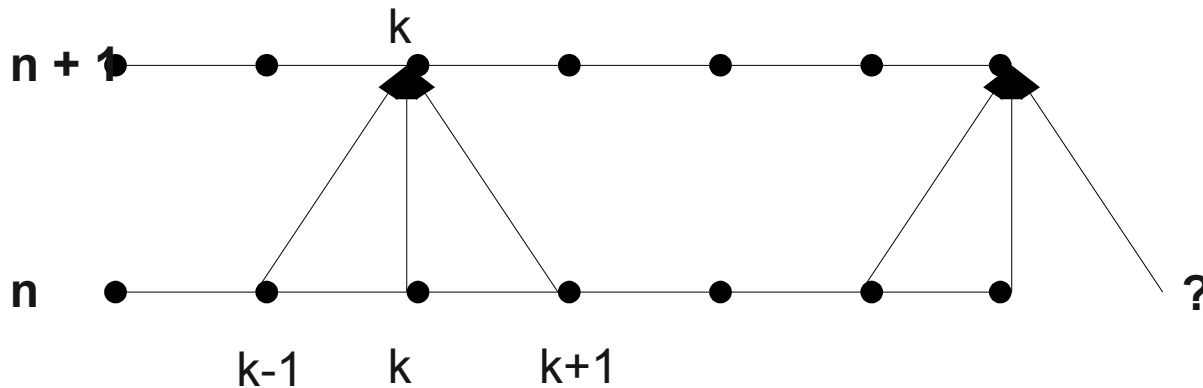


Декомпозиция по данным

- Каждый процесс имеет свою часть расчетной области, на которой обновляет значение функций
- При расчете значений в ячейках на границах не хватает данных для перехода на следующий временной слой
- Требуются данные с соседних процессов для продолжения расчета
- Перед каждым шагом необходима парасылка

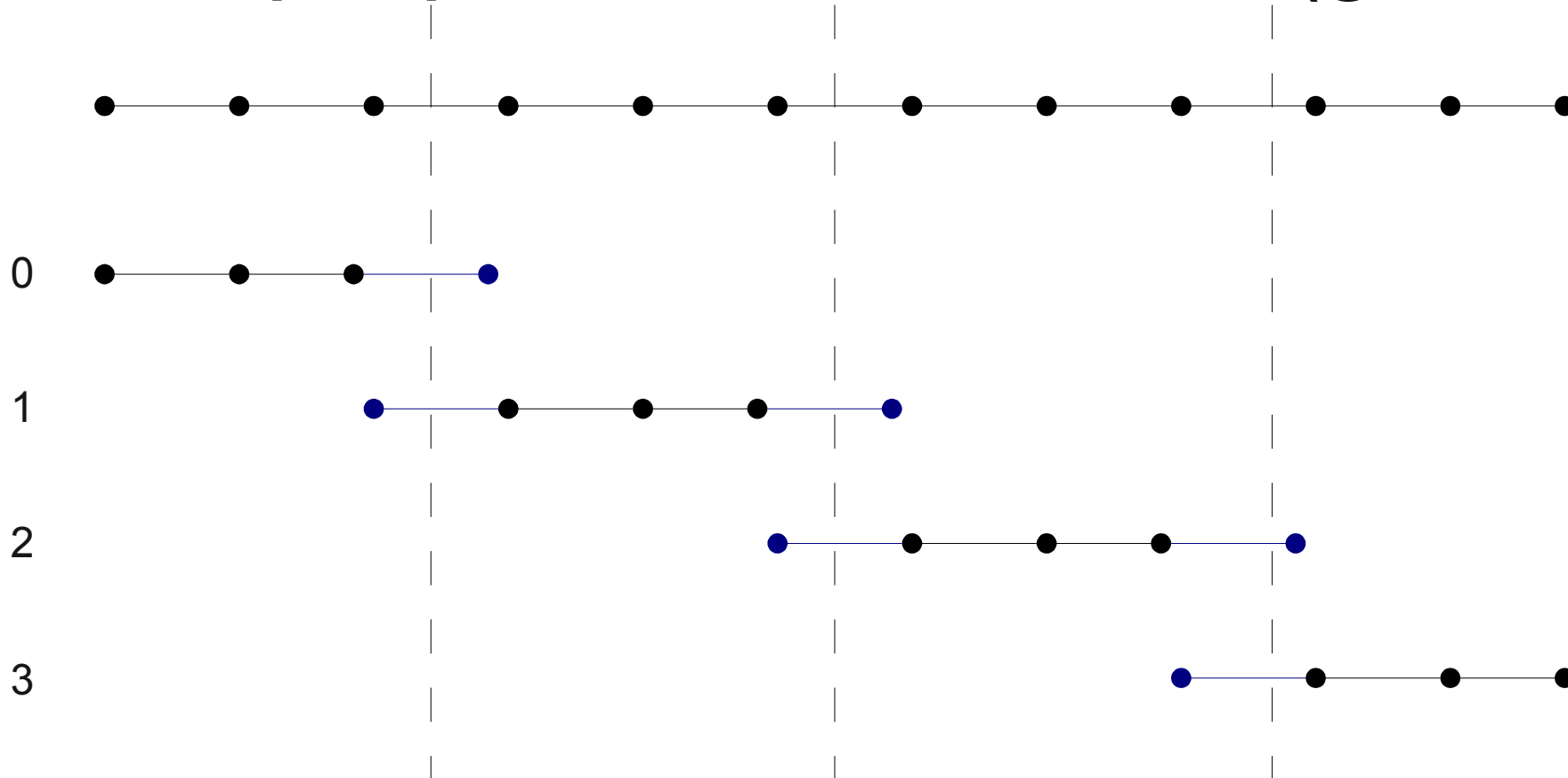
Процесс 0

- При расчете внутри области достаточно данных
- При расчете на границах не достаточно данных



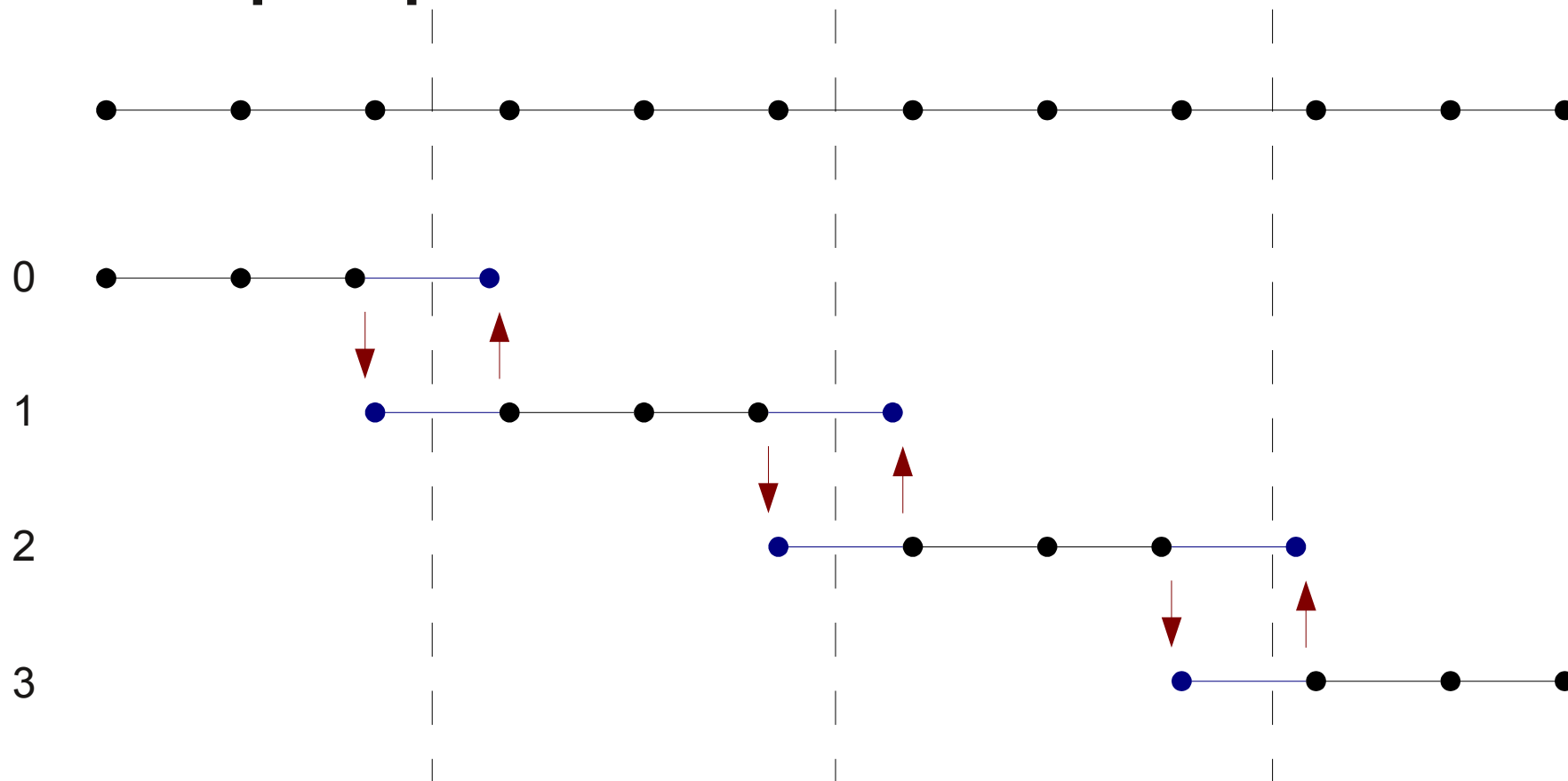
Недостаточно данных

Приграничные ячейки (ghost)



Необходимо хранить несколько ячеек на границе расчетной области. Значения берутся от соседних процессов. Такие ячейки называются приграничными или ghost cells. В зависимости от шаблона разностной схемы число ячеек может меняться.

Приграничные ячейки - обмен



Для поддержания актуальных данных необходим обмен значениями с соседними процессами.

Различие последовательного и параллельного алгоритма

Последовательный

- Загрузка данных
- Начало итераций
- Обсчет нового временного слоя
- Конечная обработка
- Конечная итерация
- Сохранение результата

Параллельный

- Загрузка данных
- Начало итераций
- Обсчет нового временного слоя
- **Обмен приграничными слоями**
- Конечная обработка
- **Сбор результата**
- Сохранение результата

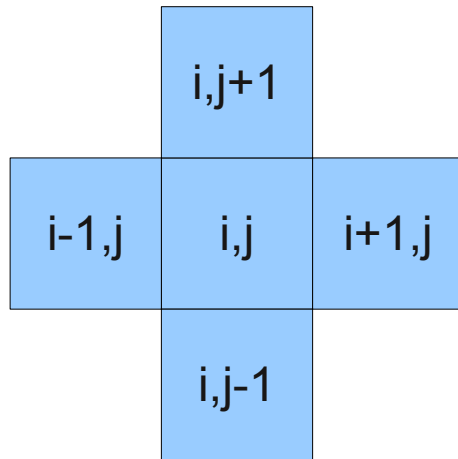
Пример пересылок

```
if (rank % 2 == 0) {
    if (rank < size - 1) {
        MPI_Send(u[u_num] + to - 1, 1, MPI_DOUBLE, rank + 1, 0, MPI_COMM_WORLD);
        MPI_Recv(u[u_num] + to, 1, MPI_DOUBLE, rank + 1, 0, MPI_COMM_WORLD,
MPI_STATUS_IGNORE);
    }
    if (rank > 0) {
        MPI_Send(u[u_num] + from, 1, MPI_DOUBLE, rank - 1, 0, MPI_COMM_WORLD);
        MPI_Recv(u[u_num] + from - 1, 1, MPI_DOUBLE, rank - 1, 0, MPI_COMM_WORLD,
MPI_STATUS_IGNORE);
    }
} else {
    if (rank > 0) {
        MPI_Recv(u[u_num] + from - 1, 1, MPI_DOUBLE, rank - 1, 0, MPI_COMM_WORLD,
MPI_STATUS_IGNORE);
        MPI_Send(u[u_num] + from, 1, MPI_DOUBLE, rank - 1, 0, MPI_COMM_WORLD);
    }
    if (rank < size - 1) {
        MPI_Recv(u[u_num] + to, 1, MPI_DOUBLE, rank + 1, 0, MPI_COMM_WORLD,
MPI_STATUS_IGNORE);
        MPI_Send(u[u_num] + to - 1, 1, MPI_DOUBLE, rank + 1, 0, MPI_COMM_WORLD);
    }
}
```

Двумерный случай

- Разделение области на домены
- Разделение может быть как по одной оси, так и по двум
- В случае деления по двум осям число пересылок уменьшается
- Оптимальный вариант по пересылкам — все области одинаковые по размеру квадраты
- Для обмена необходимы приграничные слои ячеек

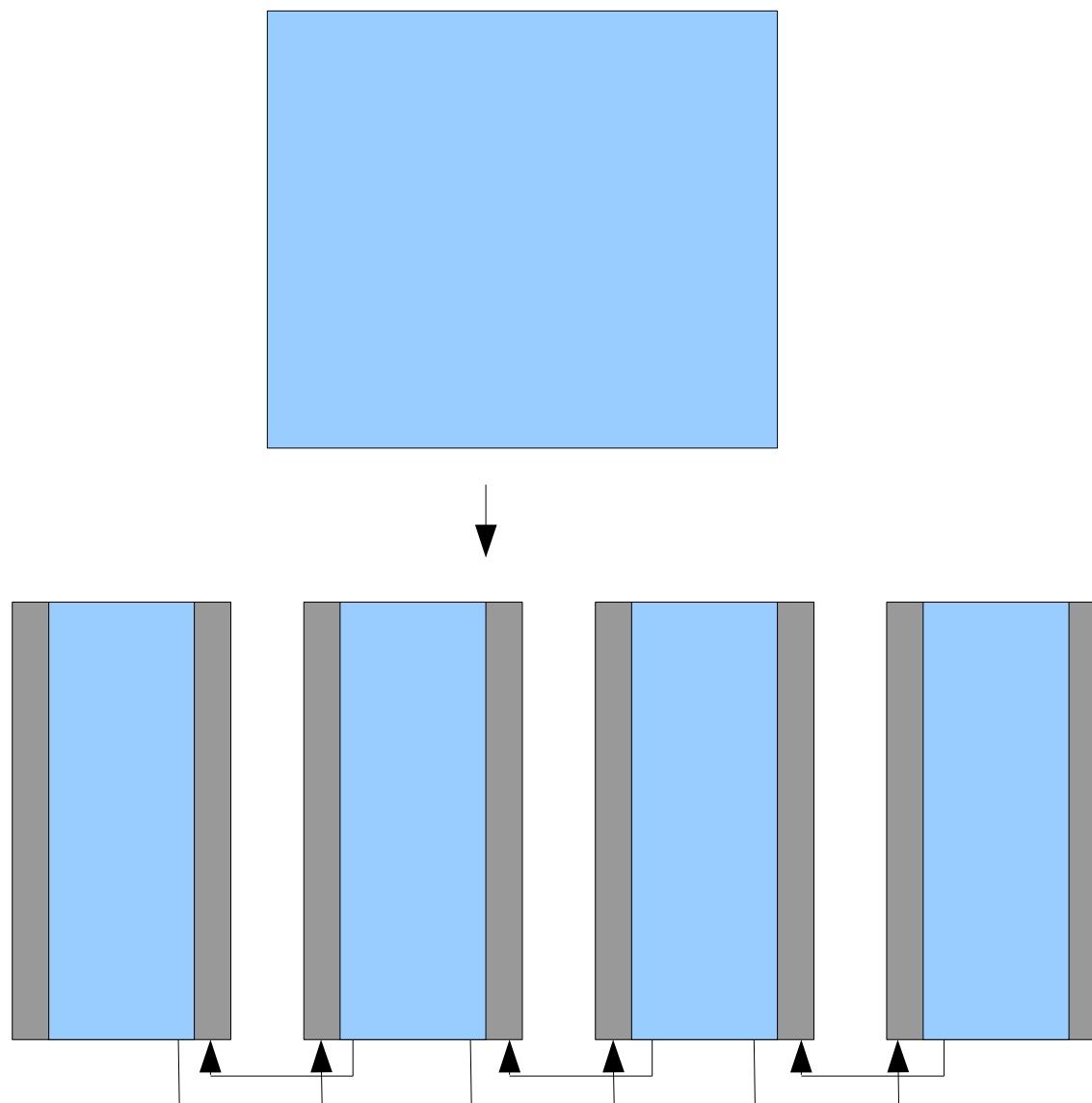
Двумерный случай: схема



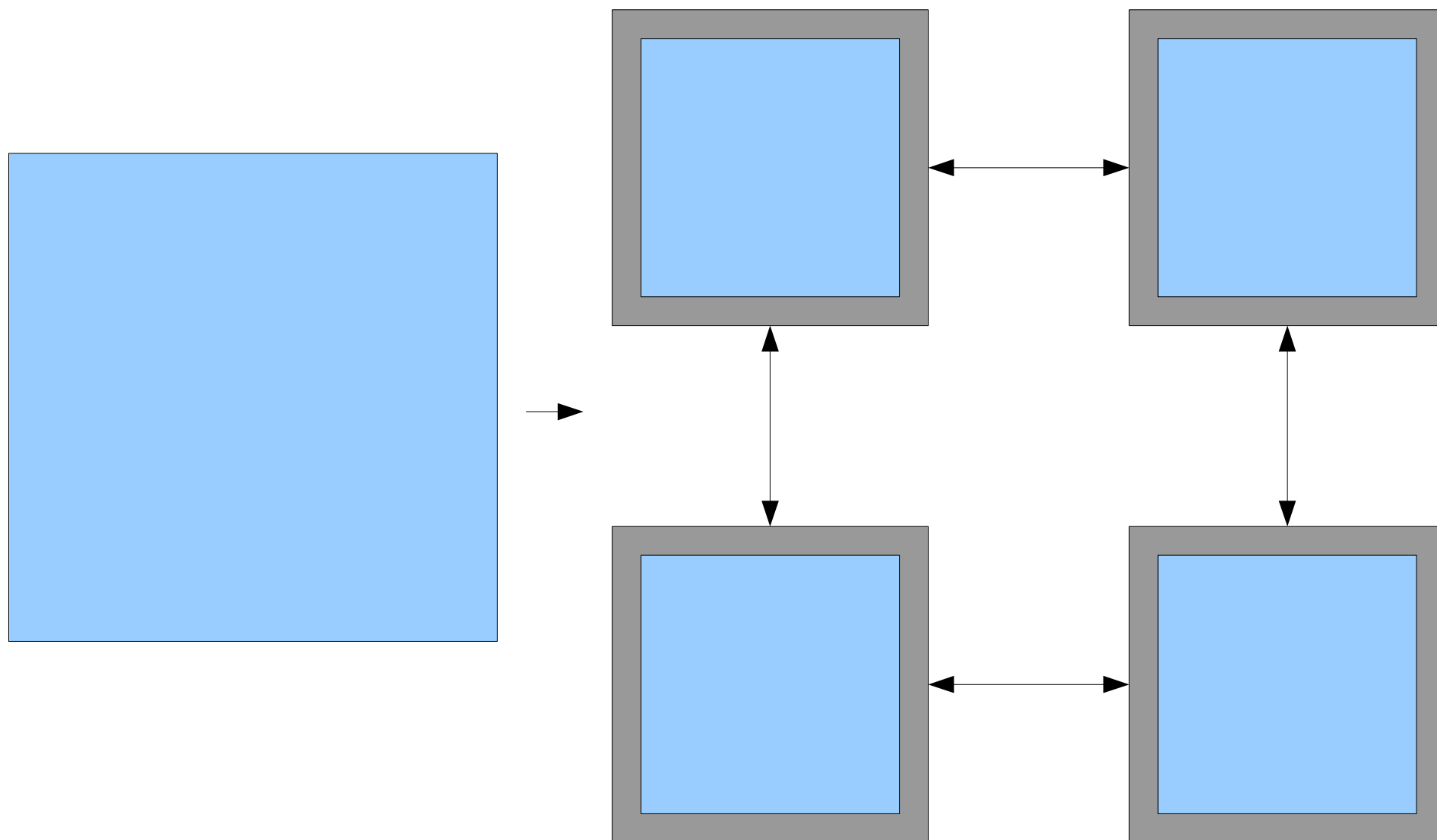
- шаблон разностной схемы в расчетах

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + c \frac{\tau}{h^2} (u_{i-1,j}^n + u_{i,j-1}^n - 4u_{i,j}^n + u_{i+1,j}^n + u_{i,j+1}^n)$$

Одномерная декомпозиция



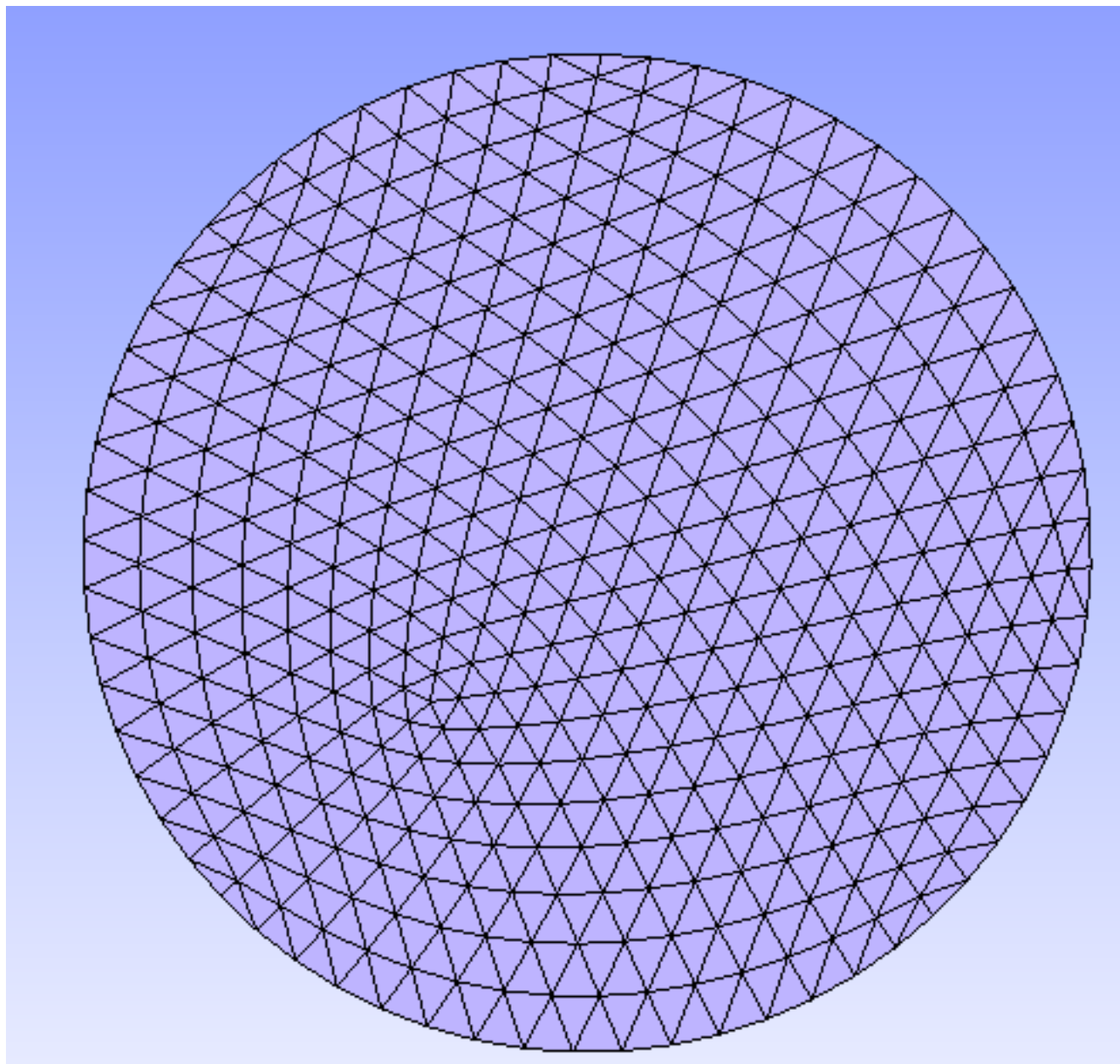
Двумерная декомпозиция



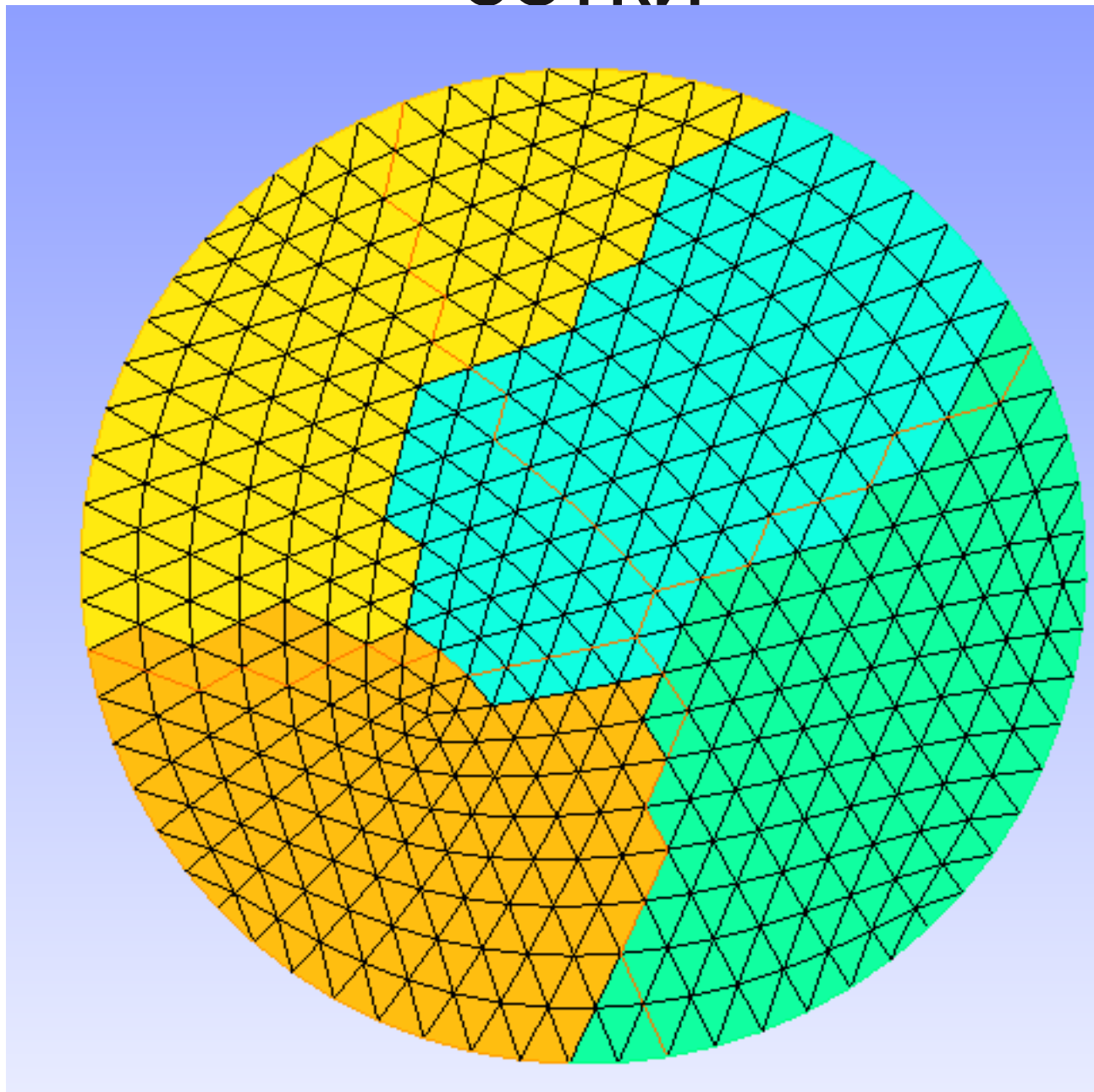
Неструктурные сетки

- Данные расположены в памяти не последовательно и возникают сложности с разбиением на части
- Для деления используются специальные алгоритмы разбиения графов
- Наиболее известные пакеты:
 - Metis <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis>
 - Scotch <http://www.labri.fr/perso/pelegrin/scotch/>

Пример деления неструктурной сетки



Пример деления неструктурной сетки



Примеры

- Одномерная теплопроводность
- Двумерная теплопроводность с декомпозицией по одной из осей

Вопросы