

Einführung in HPC

Sommersemester 2016

Übung 10

Programmieraufgabe 7 (6 Punkte).

Lösen Sie mithilfe des vorkonditionierten CG-Verfahrens die diskretisierte Laplace-Gleichung

$$-u_{i,j-1} - u_{i-1,j} + 4u_{i,j} - u_{i,j+1} - u_{i+1,j} = h^2 f_{i,j}, \quad i, j = 1, \dots, N$$

auf einem regelmäßigen Gitter der Größe $(N + 2) \times (N + 2)$, $N \in \mathbb{N}$ gerade (d. h. mit Schrittweite $h := 1/(N + 1)$), mit

$$f_{i,j} = -1, \quad i, j = 1, \dots, N,$$

und mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} u_{0,j} &= 0, & u_{N+1,j} &= 0, & j &= 1, \dots, N, \\ u_{i,0} &= 0, & u_{i,N+1} &= 0, & i &= 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Nutzen Sie dazu die in **PETSc** bereitgestellte MPI-parallele CG Implementierung (PETSc-Typ **KSPCG**). Testen Sie verschiedene in PETSc implementierte Vorkonditionierer Ihrer Wahl (z. B. SSOR, Jacobi), sowie CG ohne Vorkonditionierer. Eine Übersicht der verschiedenen in PETSc verfügbaren Vorkonditionierern findet sich unter <http://www.mcs.anl.gov/petsc/petsc-current/docs/manualpages/PC/PCType.html>. Untersuchen Sie auch verschiedene Problemgrößen N und unterschiedliche Anzahlen von MPI-Prozessen.

Hinweise:

- Die Installation von PETSc ist vergleichsweise einfach (s.u.).
- Assemblieren Sie zunächst die Laplace-Matrix als parallele, dünn-besetzte Matrix vom PETSc-Typ **MATMPIAIJ**. Vergleichen Sie dazu auch das Beispiel der parallelen Matrix-Vektor-Multiplikation in PETSc aus Abschnitt 4.10.4 der Vorlesung (Woche 4. - 8. Juli 2016).
- Stellen Sie die rechte Seite und den Lösungsvektor auf. Beide Vektoren müssen die gleiche Datenverteilung aufweisen, die bei der Laplace-Matrix gewählt wurde!
- Initialisieren Sie den CG Löser und den Vorkonditionierer mit folgenden Befehlen: `KSPCreate`, `KSPSetType`, `KSPSetTolerances`, `KSPGetPC`, `PCSetType`, `KSPSetOperators`.

- Lösen Sie mit `KSPSolve`. Die Lösung können Sie sich mit `VecView` ausgeben lassen.
- Um sich in jeder CG-Iteration die aktuelle Residuumsnorm ausgeben zu lassen, nutzen Sie `KSPMonitorSingularValue`.
- Für eine genaue Beschreibung der verschiedenen Befehle, nutzen Sie die PETSc Manual Pages unter <https://www.mcs.anl.gov/petsc/documentation/index.html>

Kompilieren eines PETSc Programms:

- Um ein PETSc-Programm übersetzen zu können, muss erst der Pfad zu den PETSc-Bibliotheken gesetzt werden durch: `export PETSC_DIR=/Pfad/zum/PETSc/Ordner` wobei der Pfad der bei der PETSc-Installation gewählte Ort ist (s. u.).
- In dem Ordner, in dem sich das zu übersetzende Programm befindet, muss sich eine Datei namens `makefile` befinden. Ein Beispiel dazu findet sich zum Download auf der Homepage zu dieser Vorlesung, welches Sie ohne Änderung verwenden können, falls Sie Ihr Programm `laplace_petsc.c` nennen.
- Übersetzen Sie dann einfach durch Eingabe von `make`.

Installation von PETSc:

1. Laden Sie Version 3.7.2 unter <https://www.mcs.anl.gov/petsc/download/index.html> herunter. **Nicht die *lite*-Version!**
2. Entpacken Sie das Archiv an einem Ort Ihrer Wahl.
3. Navigieren Sie im Terminal in den PETSc-Ordner.
4. Führen Sie den Befehl
`./configure --with-cc=mpicc --with-cxx=0 --with-fc=0 --download-f2cblaslapack`
aus, um PETSc zu konfigurieren.
5. Achten Sie darauf, das Ihr `mpicc`-Wrapper im PATH liegt (wie es auch sein muss, wenn Sie ein MPI Programm übersetzen). Alternativ können Sie auch den Pfad angeben mit: `--with-cc=/Pfad/zu/Ihrem/mpicc`.
6. Setzen Sie den PETSc-Pfad mit `export PETSC_DIR=/Pfad/zu/Ihrem/PETSc/Ordner`
7. Übersetzen Sie PETSc mit `make all`.

Unter Windows: Mit GNU-Compilern (Cygwin, MinGW) sollte es genauso funktionieren wie oben beschrieben. Alternativ empfiehlt sich eine VirtualBox mit einer Linux-Installation (zum Beispiel auf einem USB-Stick). Allerdings muss man dann zunächst erneut C-Compiler und MPI installieren. Eine Anleitung zur Installation von PETSc unter Windows gibt es auch unter <https://www.mcs.anl.gov/petsc/documentation/installation.html#windows>

Abgabedatum: Donnerstag, 14. Juli 2016 bis 12:00 Uhr per E-Mail.
