MATHEMATISCHES INSTITUT
DER UNIVERSITÄT ZU KÖLN

Dr. Martin Lanser

Einführung in das Hochleistungsrechnen

Wintersemester 2017/2018

Übung 7

Hinweis: Schreiben Sie bitte jede Aufgabe auf ein neues Blatt und auf **jedes Blatt Ihren Namen**. Auf die erste Seite Ihrer Übung schreiben Sie bitte zusätzlich zu Ihrem Namen Ihre Matrikelnummer.

Aufgabe 1 (4 Punkte).
Betrachten Sie den ungerichteten Graphen $G = (V, E)$ mit $V = \{1, ..., 10\}$ in Abbildung 1.

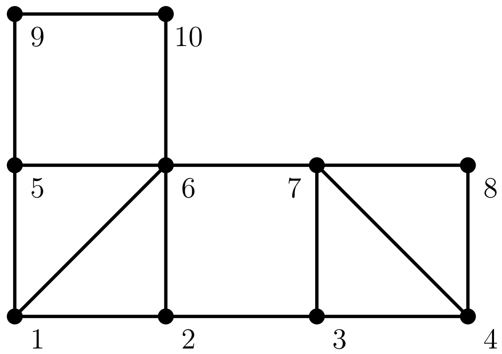

Abbildung 1: Graph zu Aufgabe 1

Geben Sie die zum Graphen G gehörige Laplace-Matrix $L(G)$ an und bestimmen Sie mithilfe des Verfahrens der spektralen Bisektion eine Partition $V = V_1 \cup V_2$ mit zwei gleich großen Partitionen V_1 und V_2. Sie können die Eigenwerte und Eigenvektoren von L dabei z. B. mithilfe des Befehls *eig* aus MATLAB berechnen, oder aber mit einem Tool Ihrer Wahl arbeiten. Zeichnen Sie auch den entstehenden Schnitt in den Graphen G ein.

Aufgabe 2 (1 + 2 + 2 + 1 = 6 Punkte).
Beweisen Sie die folgenden vier Aussagen aus Satz 4.19 der Vorlesung:

Die zu einem Graphen $G = (V, E)$ mit $V = \{1, \ldots, n\}$ gehörige Laplace-Matrix $L = L(G)$ besitzt die folgenden Eigenschaften:

(i) L ist symmetrisch.

(ii) L besitzt den Eigenwert 0 mit zugehörigem Eigenvektor $(1, \ldots, 1)^T$.

(iii) Für alle $x \in \mathbb{R}^n$ gilt

$$x^T L x = l(x) = \sum_{\substack{\{i,j\}\in E,\\ i<j}} (x_i - x_j)^2.$$

(iv) L ist positiv semidefinit.

Aufgabe 3 (3 + 2 = 5 Punkte).
Es sei $\Omega = (0,1) \times (0,1)$ das offene Einheitsquadrat im zweidimensionalen Raum. Wir nehmen an, dass wir das Einheitsquadrat durch ein regelmäßiges Punktegitter mit einer Schrittweite von $h := 1/(N+1)$ diskretisieren, welches wir durch

$$\Omega_h := \{(x_i, y_j) \ : \ x_i = ih, \ y_j = jh, \ i,j = 0,1,\ldots,N+1\}$$

definieren. Betrachten Sie die partielle Differentialgleichung

$$-\Delta u(x,y) + \frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x \partial y} = f(x,y), \quad (x,y) \in \Omega.$$

(a) Leiten Sie durch Taylor-Entwicklung und Vernachlässigung quadratischer Fehlerterme für die inneren Gitterpunkte den folgenden 9-Punkte Differenzenstern her:

$$\begin{matrix} -\frac{1}{4} & -1 & \frac{1}{4} \\ -1 & 4 & -1 \\ \frac{1}{4} & -1 & -\frac{1}{4} \end{matrix} \ .$$

Bemerkung: Differenzensterne sind Verallgemeinerungen der Differenzenquotienten für höhere Dimensionen. Obiger 9-Punkte-Stern angewendet auf die diskretisierte Funktion an einem inneren Gitterpunkt $(ih, jh), \ i,j = 1,\ldots,N$ bedeutet

$$\begin{aligned} \frac{1}{4}u_{i-1,j-1} - u_{i,j-1} - \frac{1}{4}u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j} + 4u_{i,j} - u_{i+1,j} \\ - \frac{1}{4}u_{i-1,j+1} - u_{i,j+1} + \frac{1}{4}u_{i+1,j+1} = h^2 f_{i,j} \end{aligned}$$

(b) Geben Sie den zu der durch den Differenzenstern aus Teil (a) definierten Matrix A gehörenden Graphen $G(A)$ an. Ignorieren Sie dabei die Randpunkte.

Programmieraufgabe 5 (2 + 2 + 2 + 6 Punkte).
(**Information:** Für diese Aufgabe haben Sie zwei Wochen Zeit, d. h. der Abgabetermin für diese Aufgabe ist der 21. Dezember 2017 bis 18:00 Uhr. Teil (a) - (c) werden als Theorieaufgabe gewertet.)

Gegeben sei eine regelmäßige Diskretisierung des Einheitsquadrats mit $(N+2) \times (N+2)$ Gitterpunkten und demnach $N \times N$ inneren Punkten (siehe auch Vorlesung und Aufgabe 2). Sei $n := N^2$. Wir betrachten die zugehörige Laplacematrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ für alle inneren Punkte und den 5-Punkte-Stern

$$\begin{matrix} & -1 & \\ -1 & 4 & -1 \\ & -1 & \end{matrix}$$

(a) Beschreiben Sie die Matrix-Vektor-Multiplikation $y = Ax$ komponentenweise unter Ausnutzung des 5-Punkte-Sterns, d. h. überlegen Sie sich eine Funktion f, die für einen minimalen, von Ihnen zu definierenden Teilvektor x_{I_i} von x die i-te Komponente y_i von y berechnet; $i = 1, ..., n$. Beachten Sie den Sonderfall von Punkten die direkt neben dem Rand liegen! Geben Sie einen kurzen Algorithmus an, der y aus x unter Ausnutzung von f berechnet, ohne dabei die Matrix A aufzustellen. Eine solche Matrix-Vektor-Multiplikation nennt sich auch „matrixfrei“.

(b) Ist die Reihenfolge (z. B. zeilenweise), in der die Komponenten y_i berechnet werden generell von Bedeutung für die Performance der matrixfreien Matrix-Vektor-Multiplikation? Falls ja, überlegen Sie sich eine möglichst effiziente Variante und erläutern Sie Ihre Überlegungen.

(c) Betrachten wir nun die **parallele** Matrix-Vektor-Multiplikation $y = Ax$. Gegeben sei dazu ein Parallelrechner mit $p = P^2$ Prozessoren und es sei $N = m * P^2$, $m \in \mathbb{N}$. Wir partitionieren unser Gitter einmal in Streifen mit je $m \times N$ Gitterpunkten und einmal in Quadrate mit je $mP \times mP$ Gitterpunkten (s. Abbildung 2). Jeder parallele Prozessor bearbeite genau eine der Partitionen, d. h. jeder Prozessor hält alle Zeilen der Matrix A und des Vektors x die zu Gitterpunkten aus der entsprechenden Partition gehören. Berechnen Sie Speed-up und Scale-up der parallelen matrixfreien Matrix-Vektor-Multiplikation für beide Varianten. Betrachten Sie dazu Rechen- und Kommunikationszeit wie üblich. Betrachten Sie nur den parallelen Fall mit Prozessorzahlen $p >= 9$. Kommentieren Sie Ihre Ergebnisse.

(d) Implementieren Sie die parallele und matrixfreie Matrix-Vektor-Multiplikation der Laplace-Matrix für beide in Abbildung 2 vorgeschlagenen Partitionierungen. Testen Sie Ihr Programm für verschiedene p, n und z. B. mit $x = (1, ..., 1)^T$. Für den Streifen-Fall gibt es auf der Homepage erneut ein **Gerüst**. Der Quadrate-Fall ist dann von Ihnen analog und vollständig abzuhandeln.

Hinweis: Für den Austausch der Werte in den Randpunkten der Partitionen ist

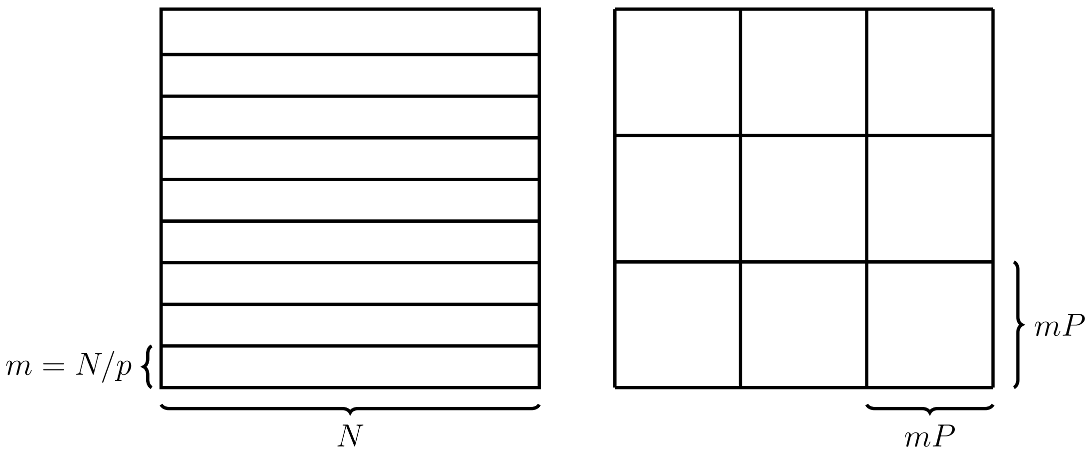

Abbildung 2: Partition des $N \times N$-Gitters in Streifen und Quadrate mit $p = P^2 = 9$.

es hilfreich für jeden Prozess lokal die Partition und deren Rand der Breite 1 zu betrachten (sogenannte „ghost layer“). D. h. verwenden Sie lokal Streifen mit je $(m + 2) \times (N + 2)$ Gitterpunkten für die Partition in Streifen bzw. Quadrate mit je $(mP + 2) \times (mP + 2)$ Gitterpunkten. Schauen Sie sich dazu auch das Code-Gerüst genauer an.

Abgabedatum: 14. Dezember 2017 bis 18:00 Uhr im entsprechenden Kasten in Raum 3.01 des Mathematischen Instituts oder am Ende der Vorlesung.