

Einführung in das Hochleistungsrechnen

Sommersemester 2019

PETSc Hands-on Session

Programmieraufgabe

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, Block-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 , unterschiedliche Parameter für die Vorkonditionierer (z.B. verschiedene ω bei SSOR) und unterschiedliche Anzahlen von MPI-Prozessen. Vergleichen Sie auch mit in Petsc implementierten direkten Lösern, z.B. PCLU. Bei letzterem sollte die Matrix allerdings sequentiell sein. Für paralleles LU kann man das MUMPS Paket verwenden.

Hinweise:

- 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 der Vorlesung (Quellcode auf Homepage).
- 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 zu `makefile` umbenennen müssen und ansonsten ohne Änderung verwenden können, falls Sie Ihr Programm `laplace_petsc.c` nennen.
- Übersetzen Sie dann einfach durch Eingabe von `make`.