

12. 熱伝導問題の並列計算

13. ハイブリッド並列

2次元熱伝導問題

- 2次元正方形領域 $[0,1] \times [0,1]$ に一定の熱を加え続けた時の領域の温度がどうなるか？

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + 40 = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + 40 \rightarrow 0$$

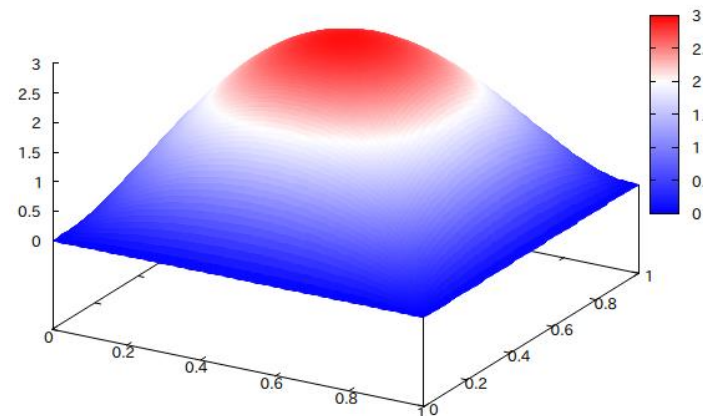
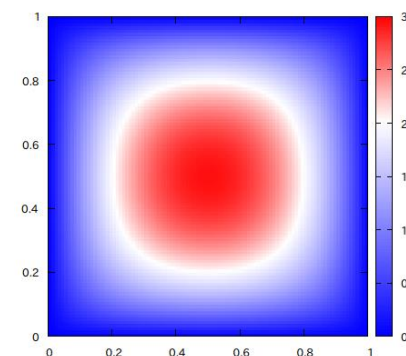
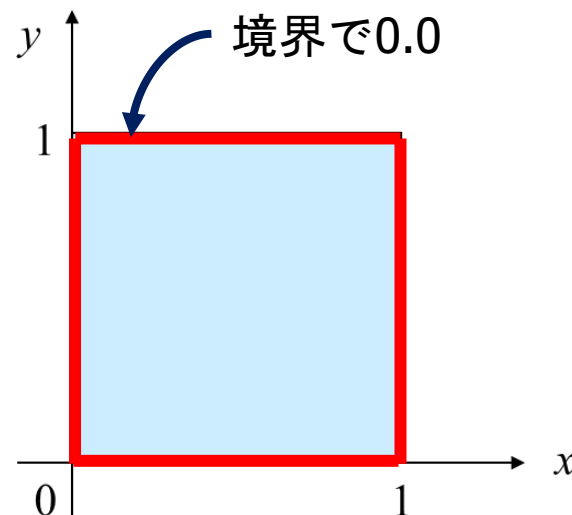
- 境界条件

$$u(0, y) = 0.0 \quad (0 \leq y \leq 1)$$

$$u(1, y) = 0.0 \quad (0 \leq y \leq 1)$$

$$u(x, 0) = 0.0 \quad (0 \leq x \leq 1)$$

$$u(x, 1) = 0.0 \quad (0 \leq x \leq 1)$$



熱伝導方程式の差分表現

- 空間（ x および y 方向）2階微分 $\Rightarrow$ 中心差分

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \sim \frac{u_{i+1,j}^t - 2u_{i,j}^t + u_{i-1,j}^t}{(\Delta x)^2}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \sim \frac{u_{i,j+1}^t - 2u_{i,j}^t + u_{i,j-1}^t}{(\Delta y)^2}$$

- 時間微分 $\Rightarrow$ 前進差分

$$\frac{\partial u}{\partial t} \sim \frac{u_{i,j}^{t+\Delta t} - u_{i,j}^t}{\Delta t}$$

- 熱伝導方程式の差分表現

$$\frac{u_{i,j}^{t+\Delta t} - u_{i,j}^t}{\Delta t} = \frac{u_{i+1,j}^t - 2u_{i,j}^t + u_{i-1,j}^t}{(\Delta r)^2} + \frac{u_{i,j+1}^t - 2u_{i,j}^t + u_{i,j-1}^t}{(\Delta r)^2} + 40$$

温度の時間発展方程式の導出

■ 差分表現に直した熱伝導方程式を変形

$$\begin{aligned}u_{i,j}^{t+\Delta t} &= u_{i,j}^t + \frac{\Delta t}{(\Delta r)^2} (u_{i+1,j}^t - 2u_{i,j}^t + u_{i-1,j}^t) + \frac{\Delta t}{(\Delta r)^2} (u_{i,j+1}^t - 2u_{i,j}^t + u_{i,j-1}^t) + 40\Delta t \\&= \left(1 - \frac{4\Delta t}{(\Delta r)^2}\right) u_{i,j}^t + \frac{\Delta t}{(\Delta r)^2} (u_{i+1,j}^t + u_{i-1,j}^t + u_{i,j+1}^t + u_{i,j-1}^t) + 40\Delta t \\&= \alpha u_{i,j}^t + \beta (u_{i+1,j}^t + u_{i-1,j}^t + u_{i,j+1}^t + u_{i,j-1}^t) + 40\Delta t,\end{aligned}$$

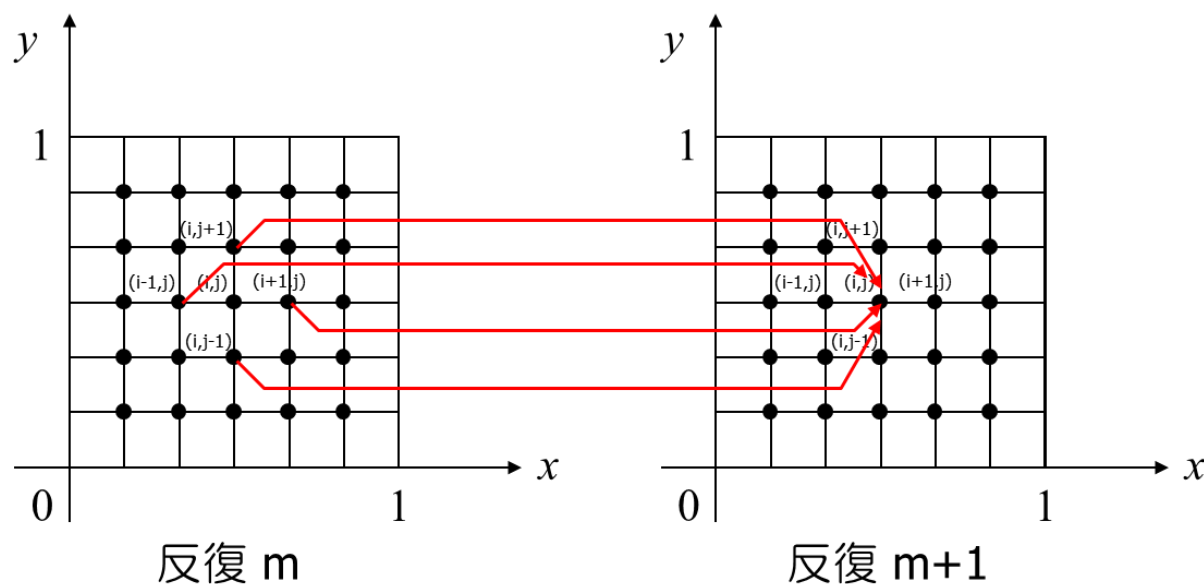
ただし, $\alpha = 1 - 4\beta$, $\beta = \frac{\Delta t}{(\Delta r)^2}$. ここで, $\beta = \frac{\Delta t}{(\Delta r)^2} = 0.25$ とすると...

$$u_{i,j}^{t+\Delta t} = 0.25 (u_{i+1,j}^t + u_{i-1,j}^t + u_{i,j+1}^t + u_{i,j-1}^t) + 10(\Delta r)^2$$

有限差分法による熱伝導問題の解法

■ 温度時間発展計算のアルゴリズム

```
for( i=1; i<=N; i++ ) {  
  for( j=1; j<=N; j++ ) {  
     $u_{i,j}^{(m+1)} = (u_{i-1,j}^{(m)} + u_{i+1,j}^{(m)} + u_{i,j-1}^{(m)} + u_{i,j+1}^{(m)}) * 0.25 + 10.0 * dx * dx;$   
  };  
};
```



演習12a：プログラム heat2d.c の実行

- 2次元熱伝導問題の逐次プログラム heat2d.c をコンパイルして実行せよ.

```
$ cp /home/guest60/share/heat2d.c ./
$ icx heat2d.c
$ ./a.out
```

[Fortran]

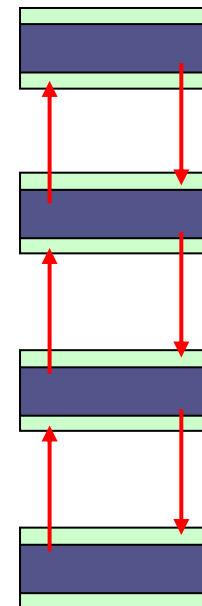
```
$ cp /home/guest60/share/heat2d.f90 ./
$ ifx heat2d.f90
$ ./a.out
```

- ◆ プログラムでは $N = 128$ の時に、反復ベクトルの差のノルム $\|u_{i,j}^{m+1} - u_{i,j}^m\|_2$ が閾値 $\epsilon = 1.0 \times 10^{-3}$ より小さくなったら反復を停止している.
- ◆ プログラム実行が正常に完了したら「To visualize data,...」というメッセージが出てくる. この指示に従うと計算結果をpng画像ファイルに出力できる (gnuplot を用いる. 事前に「module load gnuplot」で使用環境を load する).

heat2d.c のMPIによる並列化（Cの場合）

■ 並列化のヒント

1. 2次元配列 u (u^m), u_new (u^{m+1}) をブロック行分割しておく.
2. $u[is:ie][\]$ の計算をする前に,
 - 上のプロセスの u の ie 行を下のプロセスの $(is-1)$ 行へ,
 - 下のプロセスの u の is 行を上のプロセスの $(ie+1)$ 行へ,
送る.
 - 並列化 `sr_matrix.c` を参考にして, `MPI_Sendrecv` を用いて送受信.
3. u の $is \sim ie$ 行の計算を行う. 計算結果は u_new に格納.
4. 反復ベクトルの差のノルムの部分和を計算し,
`MPI_Allreduce` で総和を取り, 収束の判定を行うようにする.
 - ローカルで残差の部分和を計算し, 各プロセスでノルムを計算する.
5. u_new を u に入れなおして, 手順2に戻る.

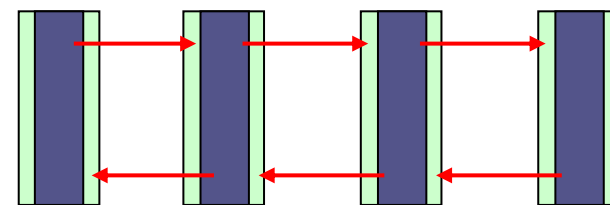


上下のプロセスから1行を受信
(受信用の領域を確保しておく)

heat2d.f90 のMPIによる並列化（Fortranの場合）

■ 並列化のヒント

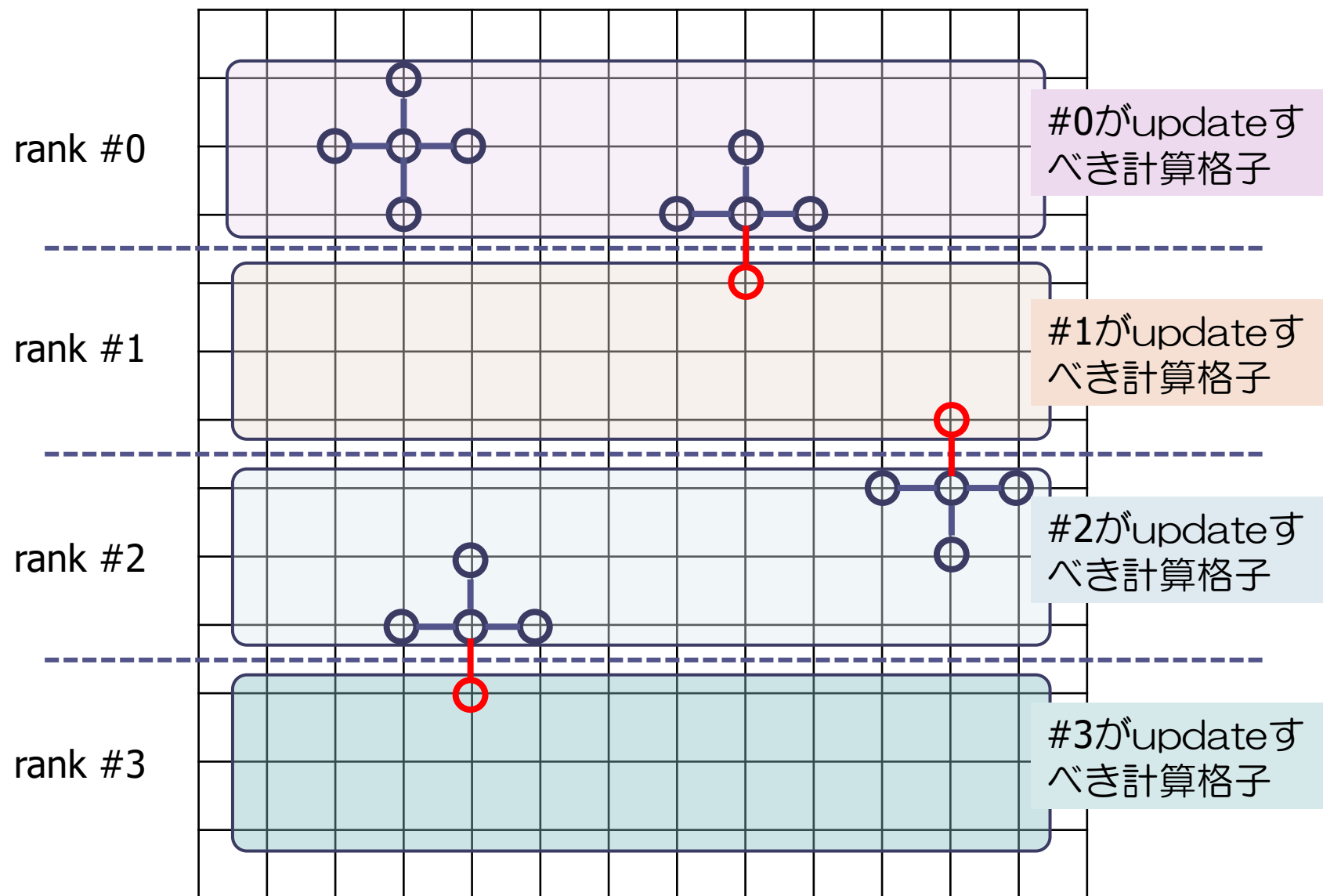
1. 2次元配列 u (u^m) , u_new (u^{m+1}) をブロック列分割しておく.
2. $U(:,js:je)$ の計算をする前に,
 - 左のプロセスの u の je 列を右のプロセスの $(js-1)$ 列へ,
 - 右のプロセスの u の js 列を左のプロセスの $(je+1)$ 列へ,
送る.
 - 並列化 `sr_matrix.f90` を参考にして, `MPI_Sendrecv` を用いて送受信.
3. u の $js \sim je$ 列の計算を行う. 計算結果は u_new に格納.
4. 反復ベクトルの差のノルムの部分和を計算し,
`MPI_Allreduce` で総和を取り, 収束の判定を行うようにする.
 - ローカルで残差の部分和を計算し, 各プロセスでノルムを計算する.
5. u_new を u に入れなおして, 手順2に戻る.



左右のプロセスから1行を受信
(受信用の領域を確保しておく)

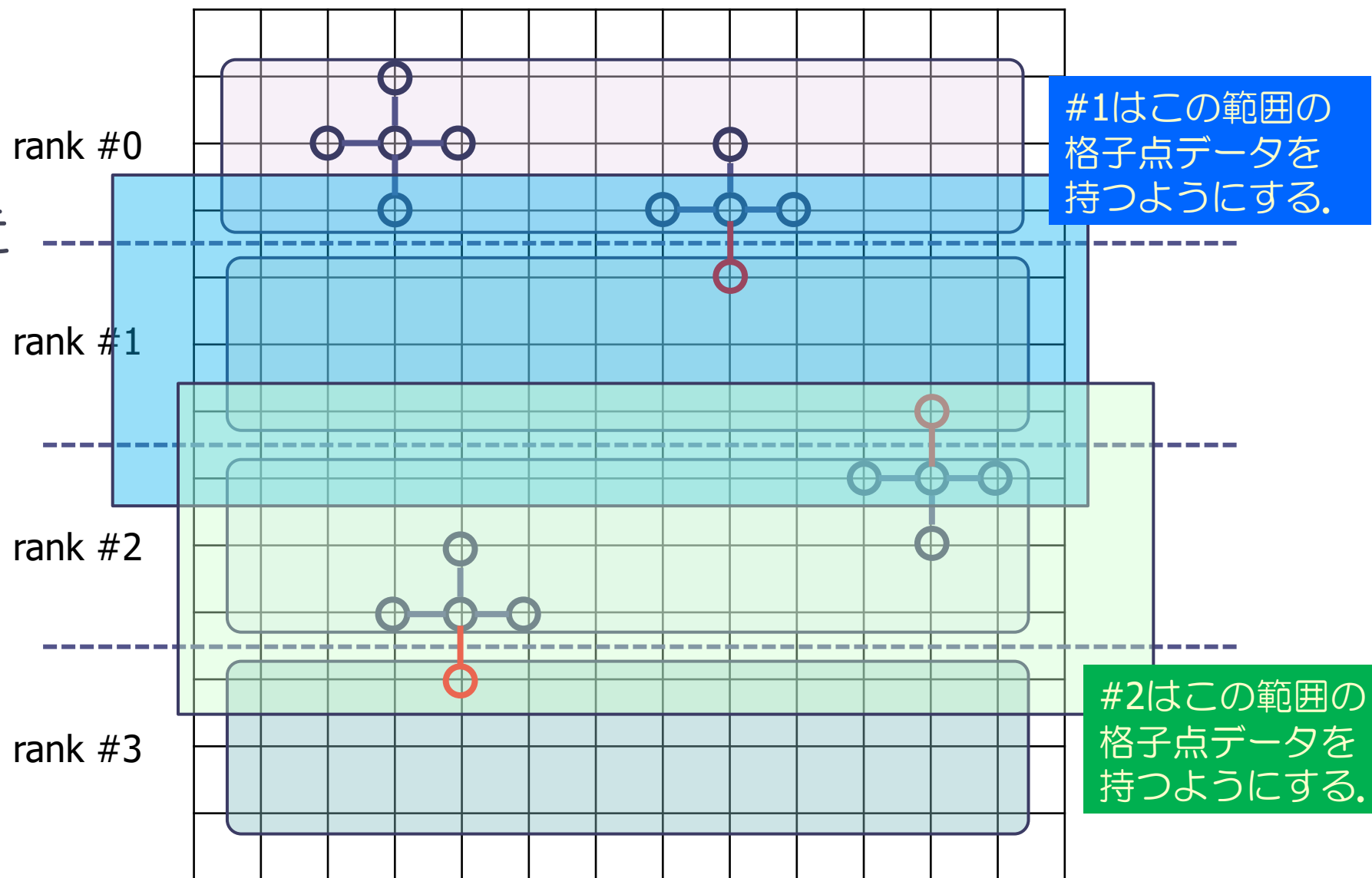
Cの場合の処理のイメージ

※Fortranの場合はこれを横に寝かしたようなイメージになる



Cの場合の処理のイメージ

※Fortranの場合はこれを横に寝かしたようなイメージになる



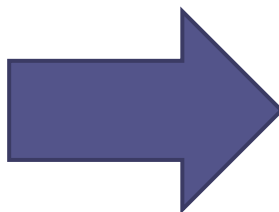
ファイルへのデータ出力について

- 各プロセスは分割された小領域のみ計算を担当

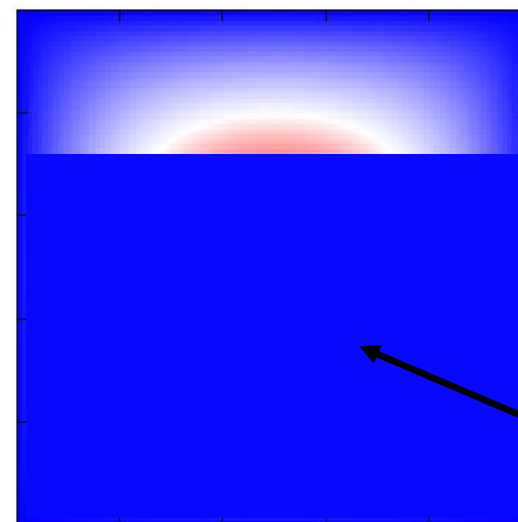
2次元配列
(ブロック行分割)

rank 0
rank 1
rank 2
rank 3

出力



不完全なデータ

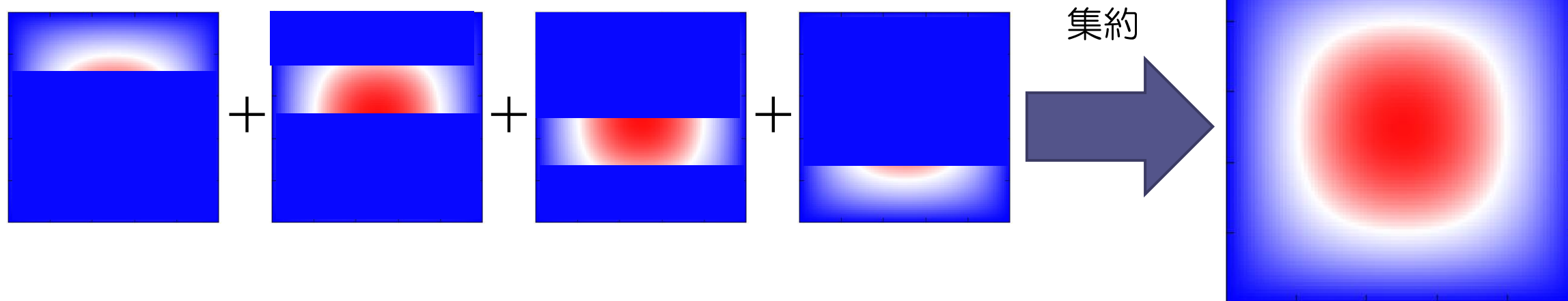


ここは値が0.0

- 全体領域をファイル出力するためには温度データをプロセス0に集約する必要がある.
⇒ プログラム中の「data output」の直前のタイミング（計3箇所）で実施

ファイルへのデータ出力について

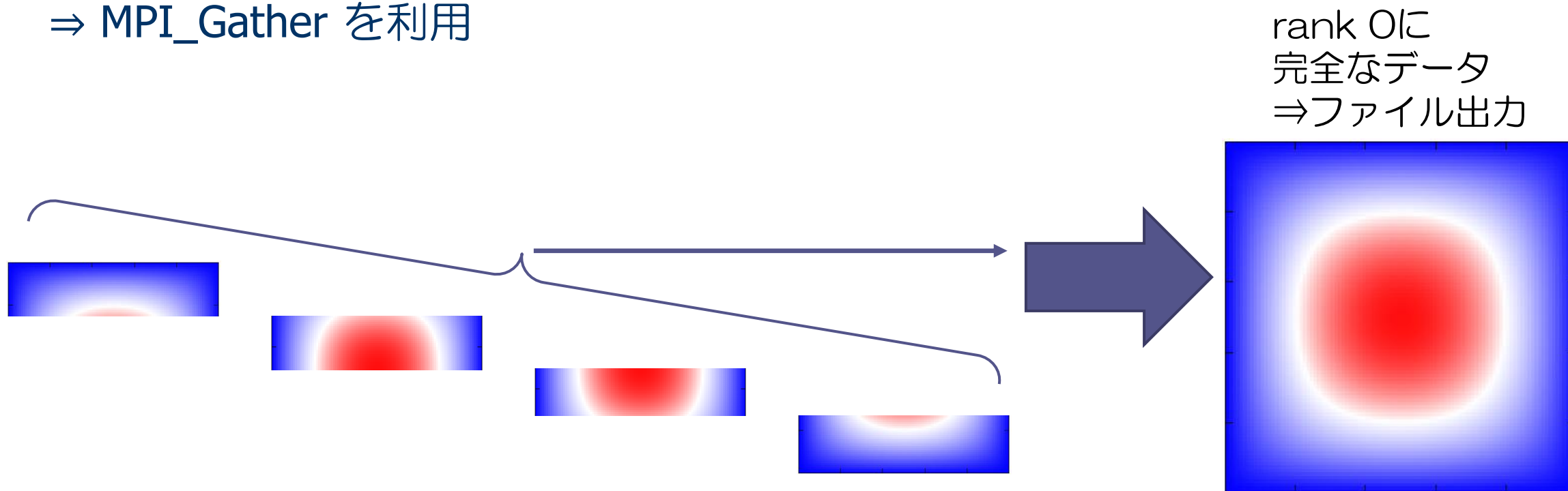
- データ集約の仕方：配列として全領域を確保している場合
⇒ MPI_Reduce を利用



- 注意：各プロセスのデータに重複があると、その部分の値が不正になる

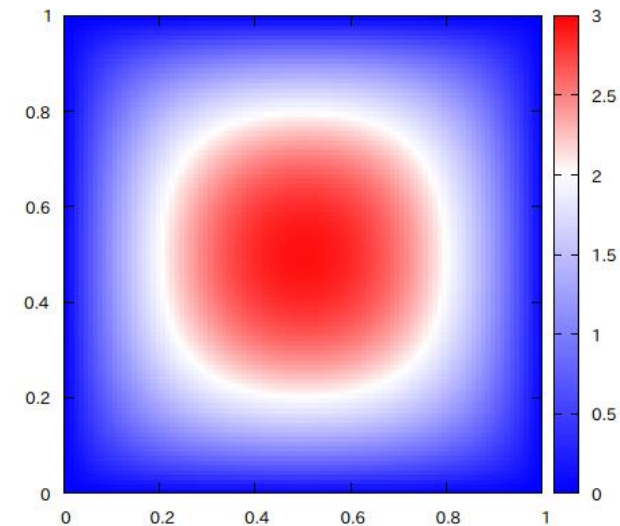
ファイルへのデータ出力について

- データ集約の仕方：配列として部分領域のみ確保している場合
⇒ MPI_Gather を利用



演習12b：heat2d.{c/f90} の並列化

- heat2d.c, heat2d.f90 をMPIを用いて並列化せよ.
- 計算結果を gnuplot 等で図示し、非並列版と同じ結果になることを確認せよ.
 - ◆ 計算結果の出力は、プロセス 0 にデータを集め※、ファイルに出力する.
 - ◆ 集め方（通信の仕方）は複数ある。考えてみよ.
- N=128とし、プロセス数1, 2, 4, 8 として、反復開始から終了までの計算時間を計測し、速度向上率を求めよ。また、それをグラフにせよ.
- 時間計測時は反復計算途中データのファイル出力を OFF にすると良い.
 - ◆ プログラム中のパラメータ INTV の値を 1 にするとデータのファイル出力が抑制される.
 - ◆ ファイル出力がないので、通信によるデータの収集（上述の※）も反復計算中は必要ない.



演習13：ハイブリッド並列化

- MPI を用いて並列化した `heat2d.{c/f90}` に，さらに OpenMP のディレクティブを挿入し，スレッド並列とプロセス並列の併用により，実行時間が削減されるかどうか確認せよ。
 - ◆ `#pragma omp parallel` などを利用する（C言語）。
 - ◆ 冒頭で `omp.h` をインクルードするのを忘れずに（C言語）。
 - ◆ `!$OMP parallel` などを利用する（Fortran言語）。
 - ◆ 冒頭で `!$ use omp_lib` を宣言するのを忘れずに（Fortran言語）。
 - ◆ 一般にハイブリッド並列はプロセス・スレッド並列単体より高度な並列実装であるが，速度上のメリットが得られるかどうかは，計算の内容や計算機の仕様に依存する。
- コンパイル
 - ◆ `icx -qopenmp xxxxx.c -lmpi`
 - ◆ `ifx -qopenmp xxxxx.f90 -lmpi`

【サンプル】Hybrid並列プログラムの実行シェル（jobh.sh）

```
#!/bin/bash
```

```
#PBS -N hybrid
```

```
#PBS -q WS
```

```
#PBS -j oe
```

```
#PBS -l select=4:ncpus=16:mpiprocs=2
```

```
source /etc/profile.d/modules.sh
```

```
module load intel
```

```
module load mpt
```

```
export KMP_AFFINITY=disabled
```

```
export OMP_NUM_THREADS=8
```

```
cd ${PBS_O_WORKDIR}
```

```
mpiexec_mpt omplace -nt ${OMP_NUM_THREADS} ./a.out
```

ジョブ名の指定

キューの設定：スクール専用キューWS

select: 計算ノード数

ncpus : 1計算ノード内のコア数

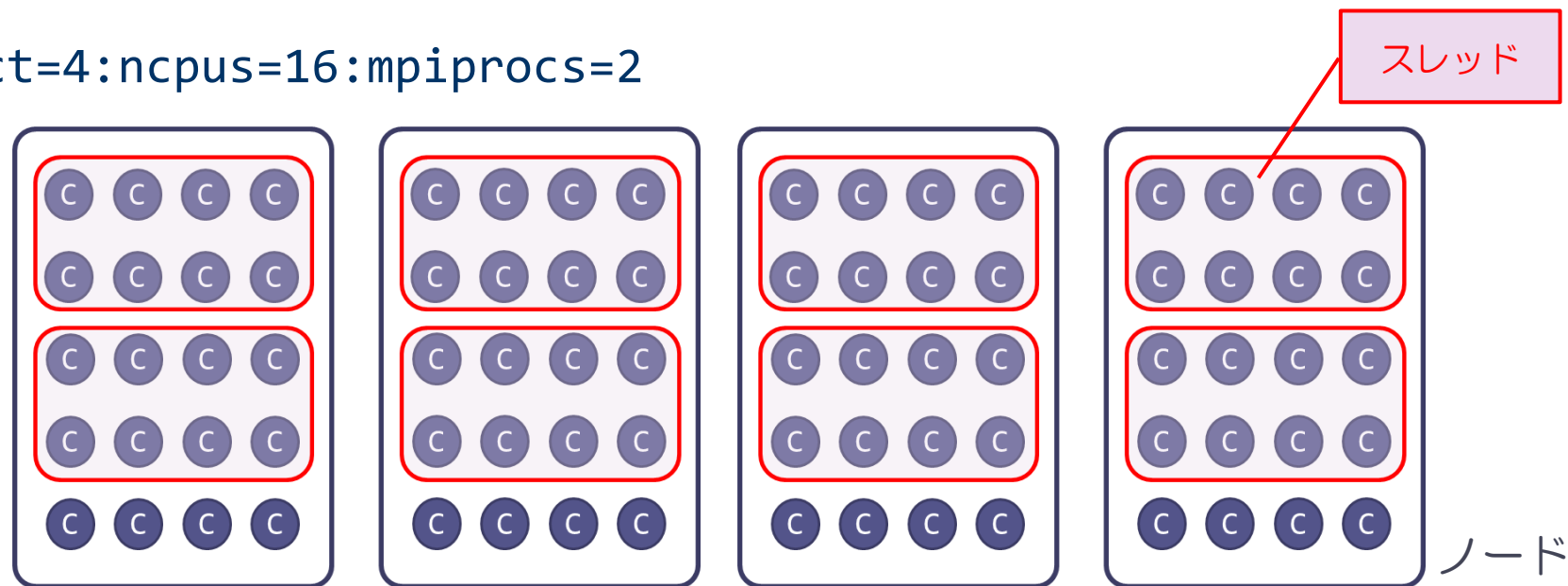
mpiprocs: 1計算ノード内のMPIプロセス数


```
#PBS -l select=N:ncpus=T:mpiprocs=M
```

- T: 1ノード（共有メモリ）のコア数（ ≤ 40 ）
- M: 1ノードのMPIプロセス数
- N: 全ノード数
- NM: 全MPIプロセス数

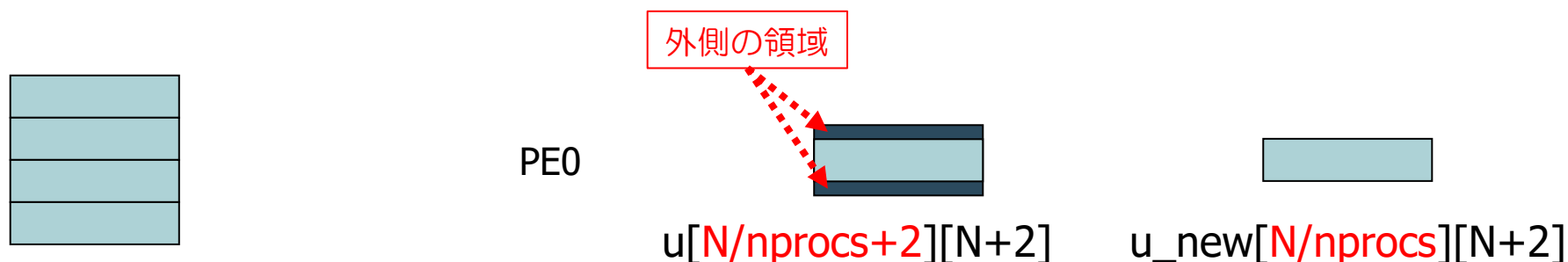
例えば、コア数を 16、全MPIプロセスを 8 とすると、以下のようなマッピングが考えられる。この場合、

```
#PBS -l select=4:ncpus=16:mpiprocs=2
```



上級者になるために. . .

- 大規模問題を解く場合には、1プロセスのメモリ使用容量を少なくする必要が出てくる。
- 今回のプログラムでは、どのプロセスも $u[N+2][N+2]$, $u_new[N+2][N+2]$ として、計算全領域の変数を宣言したが、



各プロセスは、これだけの大きさをもてば良いはず。

- 実行前から並列数 ($nprocs$) が固定されていれば、上記のように、プログラムの先頭で小さい領域を宣言することも出来るが、汎用のプログラムとしては、 $nprocs$ を実行開始時に決めたい。
- 配列を動的に確保する必要がある (C言語: `malloc` 関数、Fortran言語: `allocate` 文) 。
 - ◆ サンプルプログラム `/home/guest60/share/alloc_heat2d.c` もしくは `alloc_heat3d.f90`