

計算科学演習A2

MPIを用いた並列計算 (IV)

MPI + OpenMPのハイブリッド並列

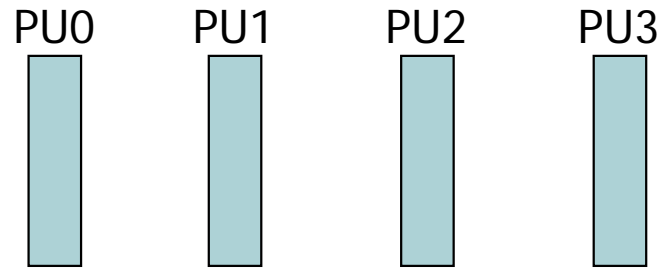
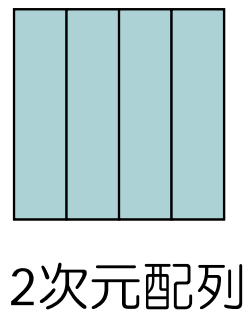
神戸大学大学院システム情報学研究科

横川 三津夫

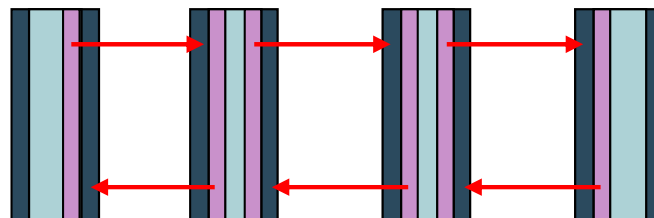
yokokawa@port.kobe-u.ac.jp

MPI_sendrecvの応用

- 2次元配列がブロック列分割されている。
- このとき、自分の両端の1列の要素を、隣接するプロセスの持つ領域の外側に受信用の領域を確保し、その領域にそれぞれ転送するプログラムを作る。



ブロック列分割



両隣のプロセスから1列を受信
(受信用の領域を確保しておく)

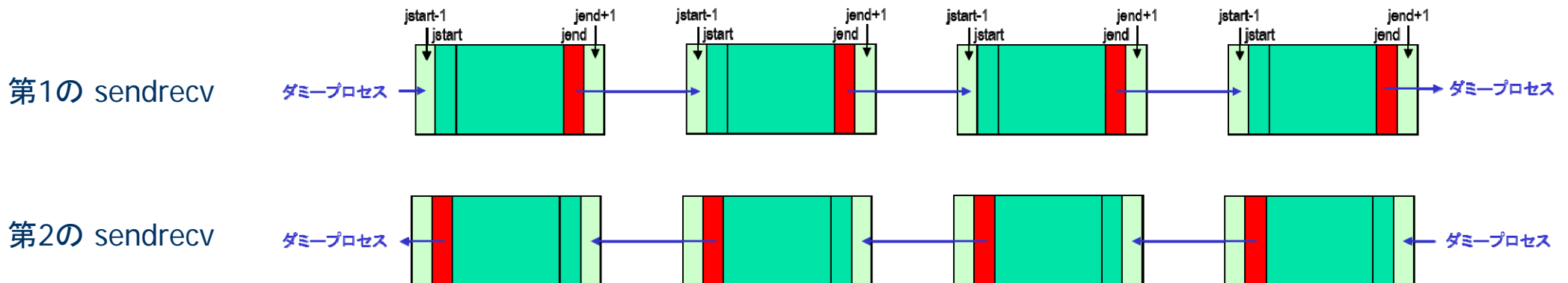
MPI_sendrecvの応用（続き）

■ 配列の確保

- ◆ 自プロセスの担当範囲は $jstart \sim jend$ 列
- ◆ 受信領域を考慮し, $jstart-1 \sim jend+1$ 列の領域を確保

■ mpi_sendrecv による送受信

- ◆ まず, 右隣に $jend$ 列を送り, 左隣から $jstart-1$ 列に受信
- ◆ 次に, 左隣に $jstart$ 列を送り, 右隣から $jend+1$ 列に受信
- ◆ 両端のプロセスは, ダミープロセス (MPI_PROC_NULL) と送受信するようにする.
 - MPI_sendrecvで同じように記述できる.



mpi_sendrecv関数

```
mpi_sendrecv( sendbuf, sendcount, sendtype, dest, sendtag, &  
              recvbuf, recvcount, recvtype, source, recvtag, &  
              comm, status, ierr )
```

- ◆ sendbuf: 送信するデータのための変数名 (先頭アドレス)
- ◆ sendcount: 送信するデータの数 (整数型)
- ◆ sendtype: 送信するデータの型
 - MPI_INTEGER, MPI_REAL8, MPI_CHARACTER など
- ◆ dest: 送信する相手のプロセス番号
- ◆ sendtag: メッセージ識別番号. 送られて来たデータを区別するための番号
- ◆ recvbuf: 受信するデータのための変数名 (先頭アドレス)
- ◆ recvcount: 受信するデータの数 (整数型)
- ◆ recvtype: 受信するデータの型
- ◆ source: 送信してくる相手のプロセス番号
- ◆ recvtag: メッセージ識別番号. 送られて来たデータを区別するための番号
- ◆ comm: コミュニケータ (例えば, MPI_COMM_WORLD)
- ◆ status: 受信の状態を格納するサイズMPI_STATUS_SIZEの配列 (整数型)
- ◆ ierr: 戻りコード (整数型)

プログラム M-8 (続く)

```
program sendrecv
  use mpi
  implicit none
  integer, parameter :: m=100
  integer             :: i,j,jstart,jend
  real(kind=8), dimension(:,,:), allocatable :: u
  real(kind=8)       :: err
```

```
integer             :: nprocs,myrank,ierr,left,right
integer, dimension(MPI_STATUS_SIZE) :: istat
```

Recvで必要な配列変数の宣言

```
call mpi_init(ierr)
call mpi_comm_size( MPI_COMM_WORLD, nprocs, ierr )
call mpi_comm_rank( MPI_COMM_WORLD, myrank, ierr )
```

```
jstart = m*myrank/nprocs+1
jend   = m*(myrank+1)/nprocs
allocate(u(m,jstart-1:jend+1))
```

各プロセスの担当する列の範囲を計算

jstart-1列~jend+1列の領域を確保

```
do i = 1, m
  do j = jstart, jend
    u(i,j) = dble(i+j)
  end do
end do
```

自分の担当する列に値を設定

プログラム M-8 (続き)

```
left = myrank-1
if (myrank==0)      left = MPI_PROC_NULL
right = myrank+1
if (myrank==nprocs-1) right= MPI_PROC_NULL

! from the right process to the left
call mpi_sendrecv( )

! from the left process to the right
call mpi_sendrecv( )

err = 0.0
if ( myrank > 0 ) then
  do i = 1, m
    err = err + abs(u(i,jstart-1)-dble(i+jstart-1))
  end do
endif
if ( myrank < nprocs-1 ) then
  do i = 1, m
    err = err + abs(u(i,jend+1)-dble(i+jend+1))
  end do
endif
print *, 'myrank =', myrank, 'error =', err

deallocate( u )
call mpi_finalize( ierr )

end program sendrecv
```

左右のプロセスのプロセス番号を計算
(存在しない場合は MPI_PROC_NULL とする)

mpi_sendrecv による送受信

正しく受信できたことを確認

演習M4-1 : M-8プログラムの実行

- sendrecv.f90 は未完成である.
- MPI_sendrecvを完成させ、コンパイルして、4, 8 プロセスで実行し、データの送受信が正しくできていることを確かめよ.

```
$ cp /tmp/mpi4/sendrecv.f90 ./
```

- ◆ すべてのプロセスが error = 0.0 を出力すればよい.

2次元定常熱伝導問題

- 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？

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 10.0$$

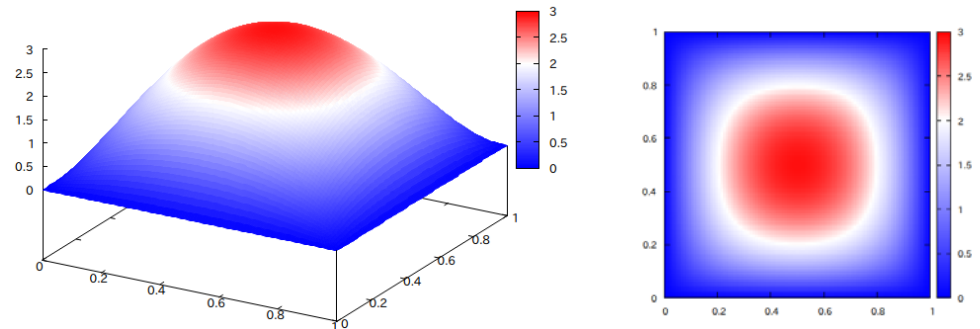
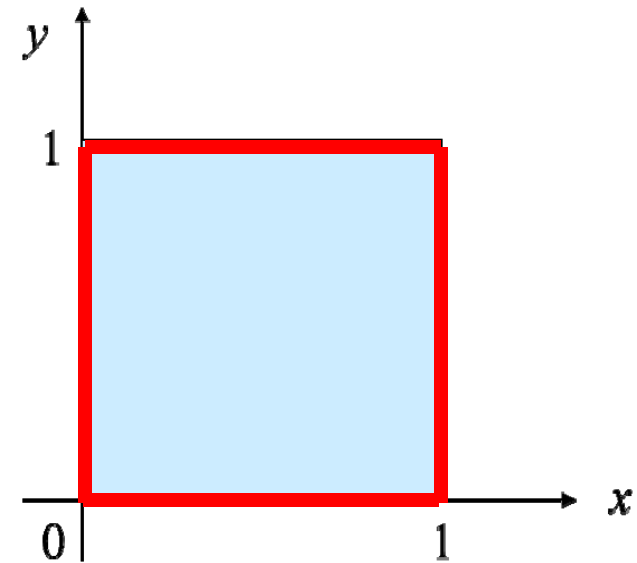
- 境界条件

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

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

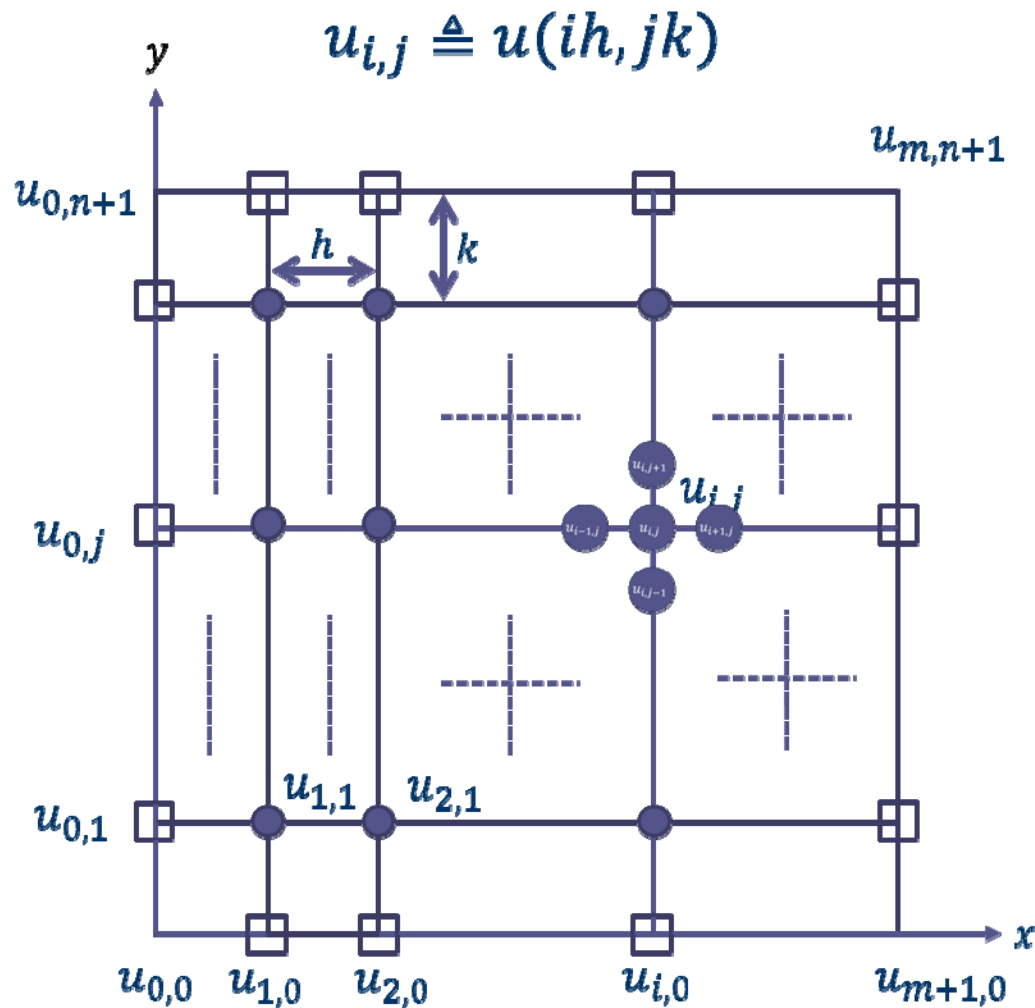
$$u(x, 0) = 0 \quad (0 \leq x \leq 1)$$

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



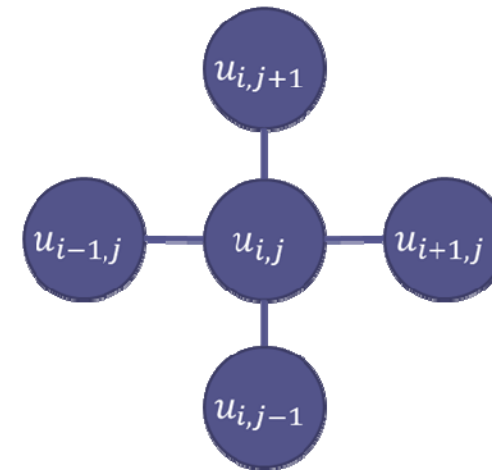
2次元定常熱伝導問題の離散化

x方向を $(m + 1)$ 等分： $h = 1/(m + 1)$ ， y方向を $(n + 1)$ 等分： $k = 1/(n + 1)$



- 境界条件として既知の値
- 内部の格子点（未知数）

内部の格子点での関係式を作る。



$u_{i,j}$ を辞書式順序で並べたベクトルを \mathbf{u} とすると、点 (i,j) に関する離散式は

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,1} \\ u_{3,1} \\ \vdots \\ u_{m,1} \\ u_{1,2} \\ u_{2,2} \\ u_{3,2} \\ \vdots \\ u_{m,2} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{1,j} \\ \vdots \\ u_{i,j} \\ \vdots \\ u_{m,j} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{1,n} \\ u_{2,n} \\ u_{3,n} \\ \vdots \\ u_{m,n} \end{bmatrix}$$

$$u_{i,j-1} + u_{i-1,j} - 4u_{i,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1} = 10 h^2$$

$$\begin{bmatrix} 0 & \dots & 1 & \dots & 1 & -4 & 1 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,1} \\ u_{3,1} \\ \vdots \\ u_{m,1} \\ u_{1,2} \\ u_{2,2} \\ u_{3,2} \\ \vdots \\ u_{m,2} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{1,j} \\ \vdots \\ u_{i,j} \\ \vdots \\ u_{m,j} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{1,n} \\ u_{2,n} \\ u_{3,n} \\ \vdots \\ u_{m,n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{1,1} \\ b_{2,1} \\ b_{3,1} \\ \vdots \\ b_{m,1} \\ b_{1,2} \\ b_{2,2} \\ b_{3,2} \\ \vdots \\ b_{m,2} \\ \vdots \\ \vdots \\ b_{1,j} \\ \vdots \\ b_{i,j} \\ \vdots \\ b_{m,j} \\ \vdots \\ \vdots \\ b_{1,n} \\ b_{2,n} \\ b_{3,n} \\ \vdots \\ b_{m,n} \end{bmatrix}$$

$\underbrace{\quad \quad \quad}_{m \text{離れている}} \quad \underbrace{\quad \quad \quad}_{m \text{離れている}}$

連立一次方程式の反復解法

■ 反復解法

- ◆ $x^{(0)}$ を真の解 x^* の近似値とし、反復ベクトルの系列 $x^{(0)} \rightarrow x^{(1)} \rightarrow x^{(2)} \rightarrow \dots \rightarrow x^{(m)}$ により、真の解に近づける方法
- ◆ 反復ベクトルの系列の作り方によりいろいろな解法がある。

▶ 定常反復法

- ヤコビ法 (Jacobi法)
- ガウス・ザイデル法 (Gauss-Seidel法)
- 逐次過大緩和法 (Successive Over-Relaxation : SOR法)
- 交互方向法 (Alternating-Direction Implicit Iterative Method: ADI法) など

▶ 非定常反復法

- 共役勾配法 (Conjugate Gradient Method, CG法)
- 双共役勾配法 (Bi-CG法)
- 一般化最小残差法 (GMRES法) など

行列分離

$$A = D - E - F$$

行列分離： $A = D - E - F$

$D = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn})$ ：対角行列

E：狭義下三角行列

F：狭義上三角行列

$$Ax = b \quad \Rightarrow \quad (D - E - F)x = b$$

ヤコビ法 (その1)

$$(D - E - F)x = b \quad \Rightarrow \quad Dx = (E + F)x + b$$

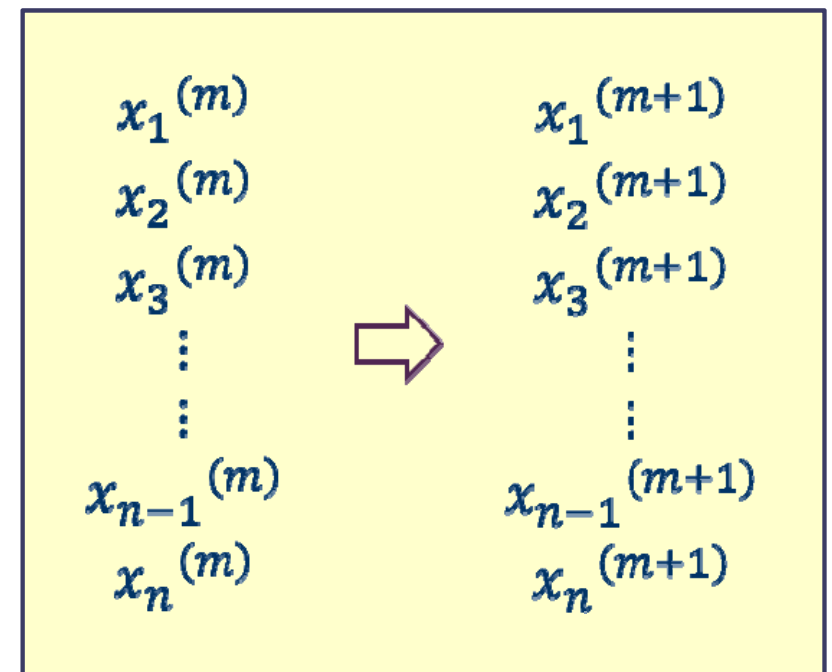
$$x^{(m+1)} = D^{-1}(E + F)x^{(m)} + D^{-1}b \quad (m \geq 0)$$

ヤコビ行列

で、反復ベクトル系列を生成する。

$$x_i^{(m+1)} = \left(- \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j^{(m)} + b_i \right) / a_{ii}$$

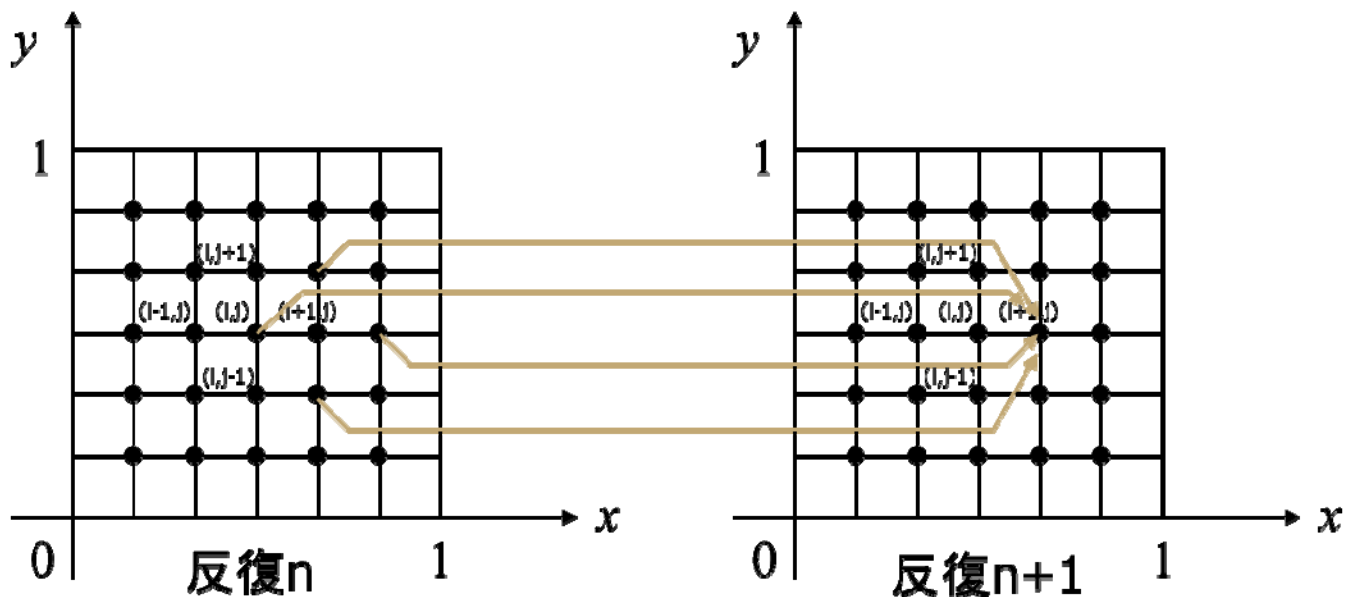
$(1 \leq i \leq n, m \geq 0)$



熱伝導問題へのヤコビ法の適用

■ 反復ベクトル生成のアルゴリズム

```
do j=1, n-1
  do i=1, n-1
     $u_{ij}^{(n+1)} = (u_{i-1,j}^{(n)} + u_{i+1,j}^{(n)} + u_{i,j-1}^{(n)} + u_{i,j+1}^{(n)}) / 4 + 10.0 * dx * dx$ 
  end do
end do
```



演習M4-2 : プログラムM-9の実行

- 2次元定常熱伝導問題の逐次プログラムM-9をコンパイルして実行せよ。

```
$ cp /tmp/mpi4/heat2d.f90 ./
```

```
$ f95 heat2d.f90
```

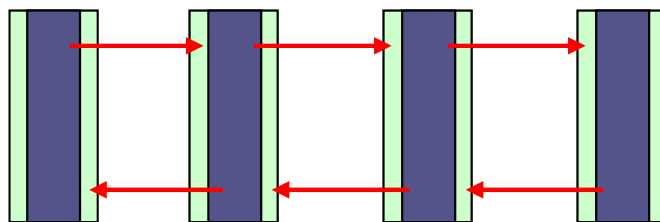
```
$ ./a.out
```

- ◆ どこかの格子の値が一定に近づいていることを確認せよ。

heat2d.f90 の並列化

■ 考え方

- ◆ 2次元配列 u , u_0 をブロック列分割
 - 配列 u は, $jstart \sim jend$ 列の領域を確保
 - 配列 u_0 は, 受信領域を考慮し, $jstart-1 \sim jend+1$ 列の領域を確保
- ◆ u の計算前に, u を u_0 にコピーし, 左のプロセスから u_0 の $jstart-1$ 列, 右のプロセスから u_0 の $jend+1$ 列を送ってもらう.
 - `sendrecv.f90` と同様にして, `mpi_sendrecv` を用いて送受信



両隣のプロセスから1列を受信
(受信用の領域を確保しておく)

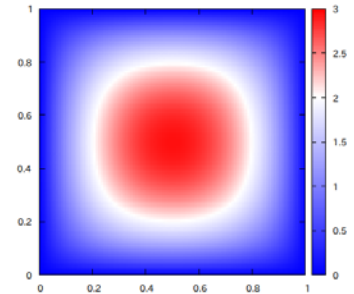
- ◆ u の $jstart \sim jend$ 列の計算を行う.
- ◆ プロセス0で収束の判定を行うようにする.
 - ローカルで残差の部分和を計算し, プロセス0で総和を取る.

演習M4-3 heat2d.f90の並列化

- heat2d.f90をMPIを用いて並列化せよ。
- nを64に変更し, 2, 4, 8 プロセスで実行せよ. プログラムが正しく動作することを確認せよ。

課題：ヤコビ法の並列化と性能評価

- ① (必須) 計算結果をgnuplotで図示せよ。
 - 計算結果の出力は、プロセス0で行えば良い。
- ② (必須) MPIによる並列プログラムにおいて $n=128$ 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。
- ③ (任意課題) MPIに加え、OpenMPのディレクティブを挿入し、MPI+OpenMPのハイブリッド並列の実行性能を評価せよ。スレッド並列は1, 2, 4, 8, 16と変化させるものとする。
 - ハイブリッド並列では、 $u(i,j)$ などの変数について、 j についてMPI並列（プロセス並列）、 i についてOpenMPによるスレッド並列とすれば良い。



課題の提出方法と提出期限

- 課題をレポートとしてまとめ、pdf形式にして、メールで yokokawa@port.kobe-u.ac.jp まで送ること。
 - ◆ 課題①, ②は必須 (プログラムもレポートに含める)
 - ◆ 課題③は任意
 - ◆ メール Subject は, "4:アカウント名" とすること.
- 期限 : 7月11日 (水) 午後5時