計算科学演習A2

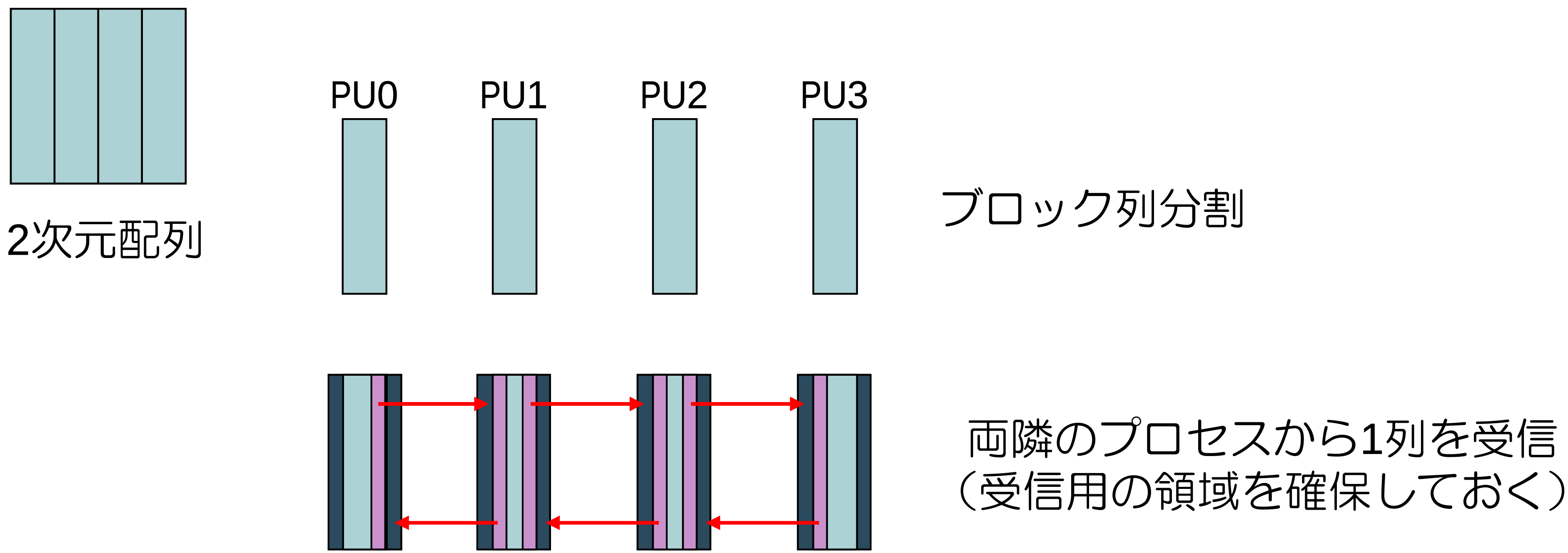
MPIを用いた並列計算（IV）

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

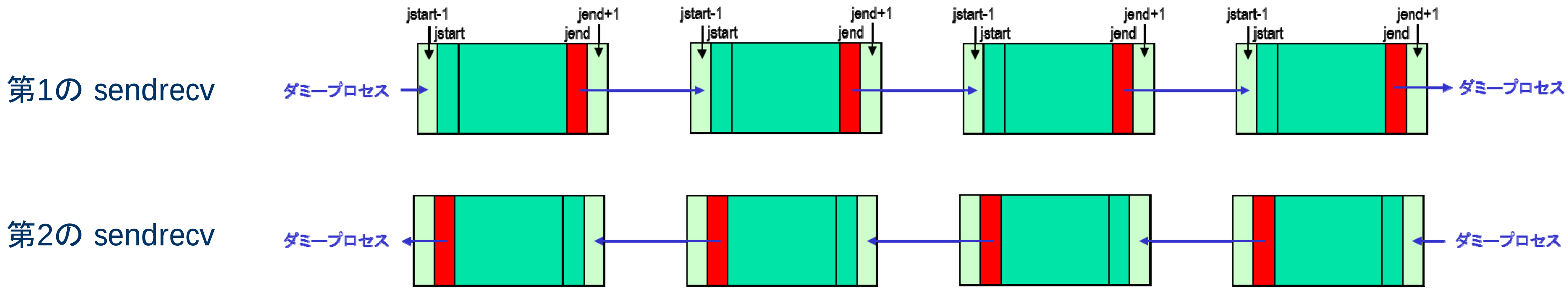
MPI_sendrecvの応用

- 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.



MPI_sendrecvの応用（続き）

- 配列の確保
  - 自プロセスの担当範囲は jstart ～ jend 列
  - 受信領域を考慮し，jstart-1 ～ 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

  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))


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

Recvで必要な配列変数の宣言

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

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.

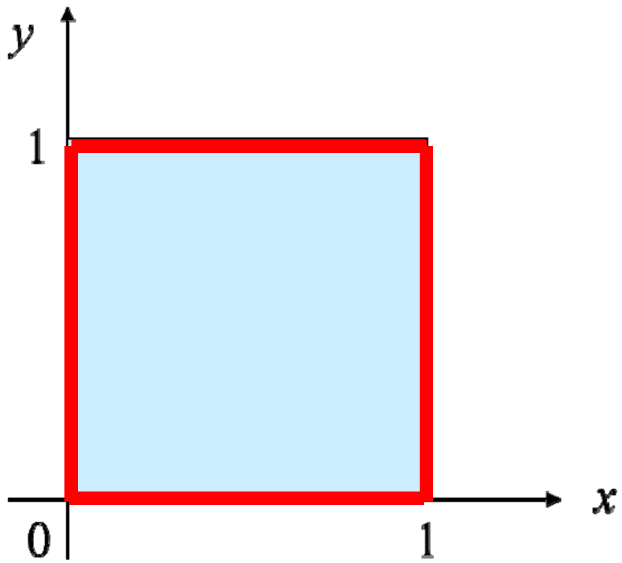
```
$ cp /tmp/mpi4/sendrecv.f90 ./
```

  - 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

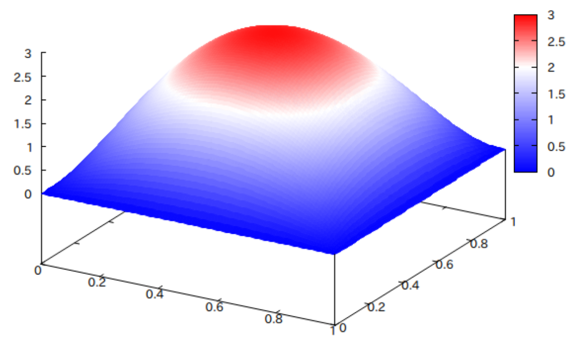
- 2次元正方形領域 [0,1]×[0,1] に一定の熱を加え続けた時の領域の温度がどうなるか？

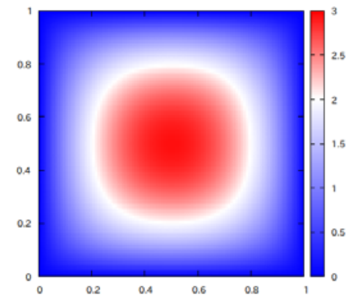
$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 10.0$$



- 境界条件

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

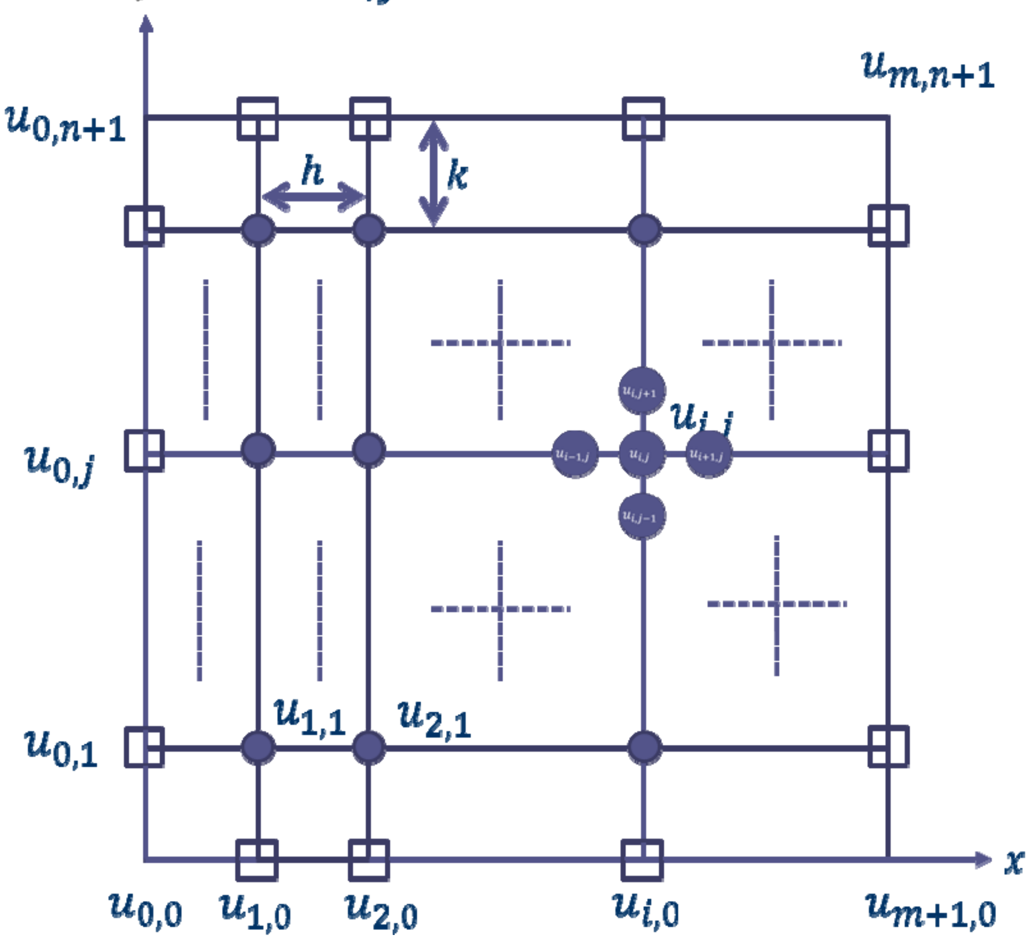




2次元定常熱伝導問題の離散化

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

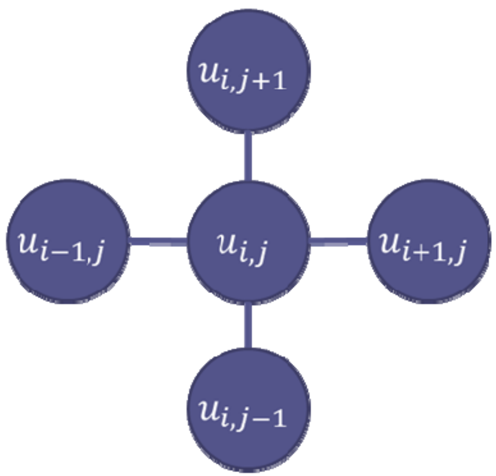
$$u_{i,j} \triangleq u(ih, jk)$$



□　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.



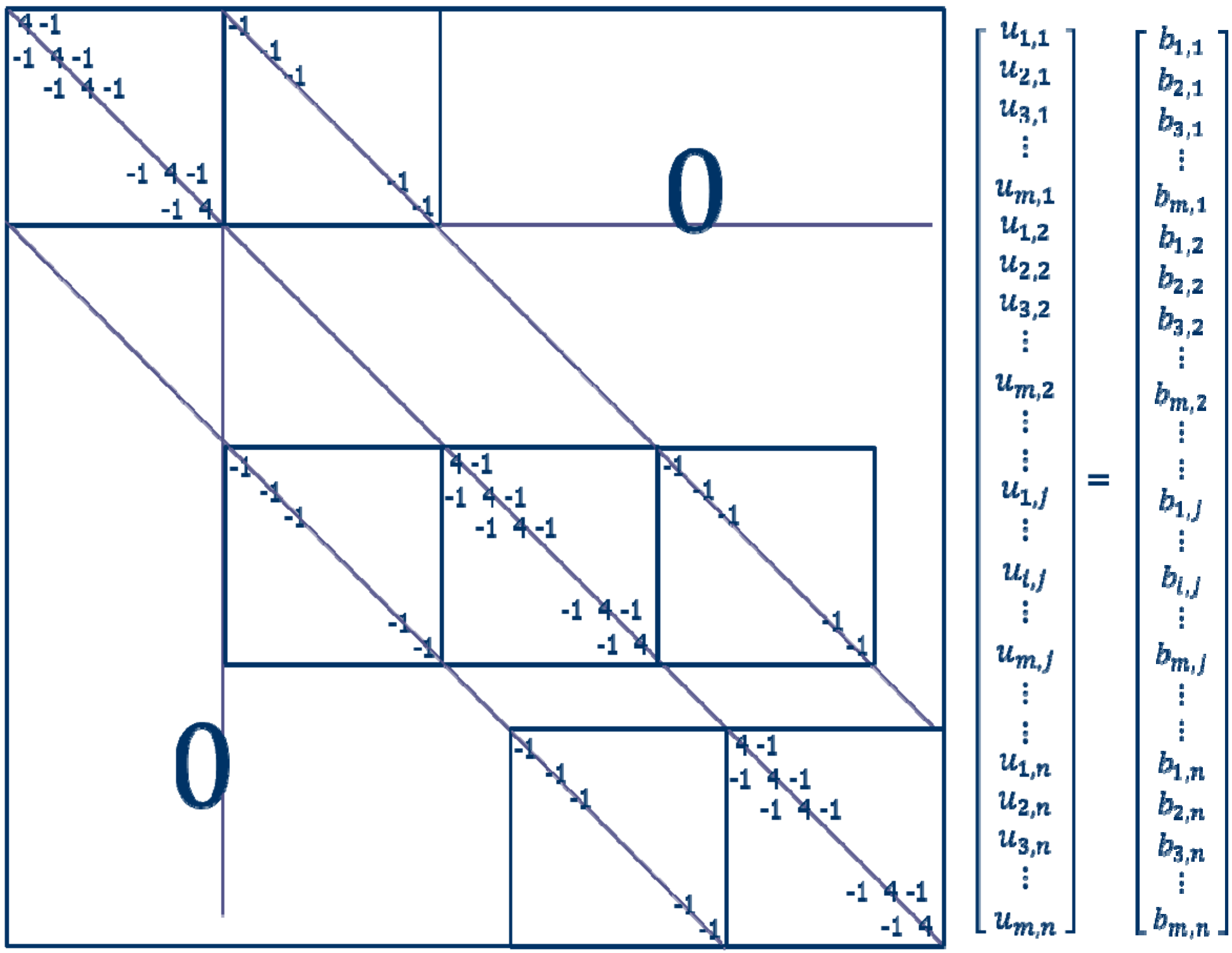
$u_{i,j}$を辞書式順序で並べたベクトルを$\boldsymbol{u}$とすると，点(i,j)に関する離散式は

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

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

$$[0 \ \cdots \ 1 \ \underbrace{\cdots \ 1 \ -4}_{m\text{離れている}} \ \underbrace{1 \ \cdots \ \ 1}_{m\text{離れている}} \ 0 \ \cdots \ 0] \begin{bmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,1} \\ u_{3,1} \\ \vdots \\ u_{m,1} \\ u_{1,2} \\ u_{2,2} \\ u_{3,2} \\ \vdots \\ u_{m,2} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{1,j} \\ \vdots \\ u_{i,j} \\ \vdots \\ u_{m,j} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{1,n} \\ u_{2,n} \\ u_{3,n} \\ \vdots \\ u_{m,n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_{1,1} \\ \boldsymbol{b}_{2,1} \\ \boldsymbol{b}_{3,1} \\ \vdots \\ \boldsymbol{b}_{m,1} \\ \boldsymbol{b}_{1,2} \\ \boldsymbol{b}_{2,2} \\ \boldsymbol{b}_{3,2} \\ \vdots \\ \boldsymbol{b}_{m,2} \\ \vdots \\ \vdots \\ \boldsymbol{b}_{1,j} \\ \vdots \\ \boldsymbol{b}_{i,j} \\ \vdots \\ \boldsymbol{b}_{m,j} \\ \vdots \\ \vdots \\ \boldsymbol{b}_{1,n} \\ \boldsymbol{b}_{2,n} \\ \boldsymbol{b}_{3,n} \\ \vdots \\ \boldsymbol{b}_{m,n} \end{bmatrix}$$

行列を用いた表現



4 -1
-1 4 -1
-1 4 -1
-1 4 -1
-1 4
-1
0
=
$u_{1,1}$ $u_{2,1}$ $u_{3,1}$ ⋮ $u_{m,1}$ $u_{1,2}$ $u_{2,2}$ $u_{3,2}$ ⋮ $u_{m,2}$ ⋮ ⋮ $u_{1,j}$ ⋮ $u_{i,j}$ ⋮ $u_{m,j}$ ⋮ ⋮ $u_{1,n}$ $u_{2,n}$ $u_{3,n}$ ⋮ $u_{m,n}$
$b_{1,1}$ $b_{2,1}$ $b_{3,1}$ ⋮ $b_{m,1}$ $b_{1,2}$ $b_{2,2}$ $b_{3,2}$ ⋮ $b_{m,2}$ ⋮ ⋮ $b_{1,j}$ ⋮ $b_{i,j}$ ⋮ $b_{m,j}$ ⋮ ⋮ $b_{1,n}$ $b_{2,n}$ $b_{3,n}$ ⋮ $b_{m,n}$

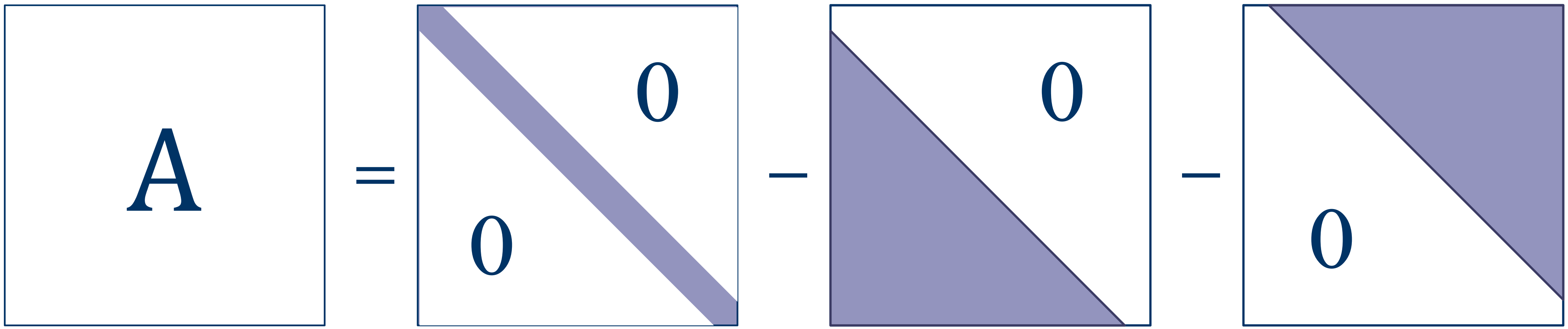
連立一次方程式の反復解法

- 反復解法
  - $\boldsymbol{x}^{(0)}$を真の解$\boldsymbol{x}^{*}$の近似値とし，反復ベクトルの系列 $\boldsymbol{x}^{(0)} \rightarrow \boldsymbol{x}^{(1)} \rightarrow \boldsymbol{x}^{(2)} \rightarrow \cdots \rightarrow \boldsymbol{x}^{(m)}$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



行列分離： $\mathrm{A} = \mathrm{D} - \mathrm{E} - \mathrm{F}$

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

E：狭義下三角行列

F：狭義上三角行列

$$\mathrm{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad (\mathrm{D} - \mathrm{E} - \mathrm{F})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

ヤコビ法（その1）

$$(\mathrm{D}-\mathrm{E}-\mathrm{F})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad \mathrm{D}\boldsymbol{x}=(\mathrm{E}+\mathrm{F})\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{x}^{(m+1)} = \underbrace{\mathrm{D}^{-1}(\mathrm{E}+\mathrm{F})}_{\text{ヤコビ行列}}\,\boldsymbol{x}^{(m)}+\mathrm{D}^{-1}\boldsymbol{b} \quad (m \geq 0)$$

で，反復ベクトル系列を生成する．

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

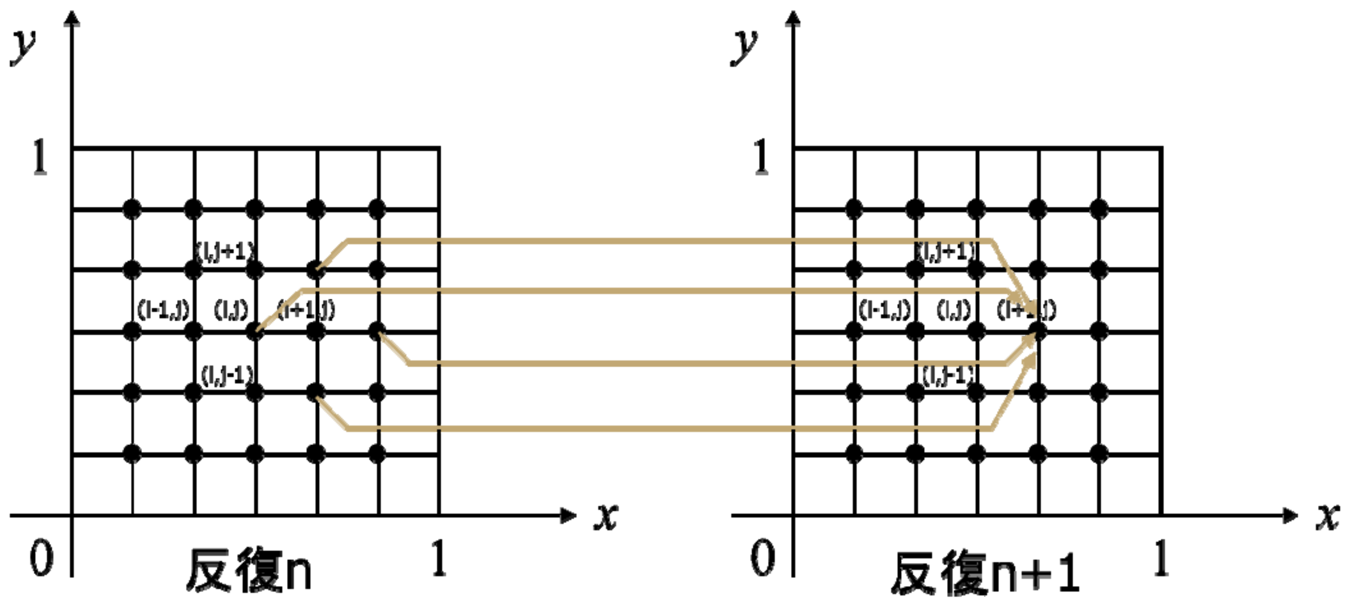
$$(1 \leq i \leq n, m \geq 0)$$

$$\begin{array}{c} x_1^{(m)} \\ x_2^{(m)} \\ x_3^{(m)} \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{n-1}^{(m)} \\ x_n^{(m)} \end{array} \Rightarrow \begin{array}{c} x_1^{(m+1)} \\ x_2^{(m+1)} \\ x_3^{(m+1)} \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{n-1}^{(m+1)} \\ x_n^{(m+1)} \end{array}$$

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

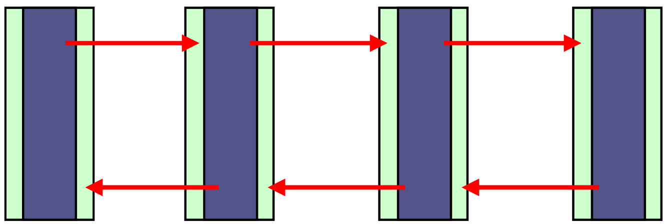
- 2次元定常熱伝導問題の逐次プログラムM-9をコンパイルして実行せよ.

```
$  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，uo をブロック列分割
    - 配列 u は，jstart ～ jend 列の領域を確保
    - 配列 uo は，受信領域を考慮し，jstart-1 ～ jend+1 列の領域を確保
  - u の計算前に，uをuoにコピーし，左のプロセスから uo の jstart-1 列，右のプロセスから uo 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 ～ 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．

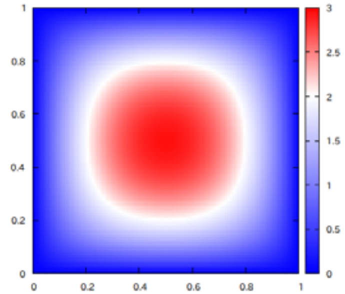
演習M4-3 heat2d.f90の並列化

- 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
  - メールの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