反応拡散方程式の数値計算並列処理

- 陽的差分法を用いた反応拡散方程式の数値解
  - 1次元の場合、空間の分割数 N に比例した計算量
  - 2次元の場合、N^2 に比例した計算量
  - 空間を分割して複数ノードを用いた並列処理は効果的か？

1次元反応拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u,v)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(u,v)$$

Schnakenberg kinetics

$$f(u,v) = k_1 - k_2 u + k_3 u^2 v$$

$$g(u,v) = k_4 - k_3 u^2 v$$

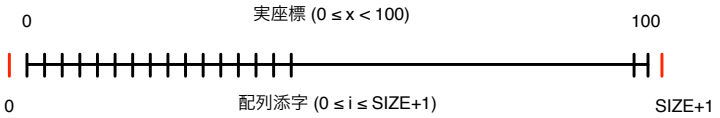
区間 0≤ x ≤ 100 を

1）N = 1,001 で分割して 1ノードで計算

2）2ノードを用いて（N = 501）並列計算

陽的差分法

1ノードで実行する場合（これまでのやり方）




```
double u[SIZE+2], v[SIZE+2];
```

u[0], u[SIZE+1] は境界条件用のダミー

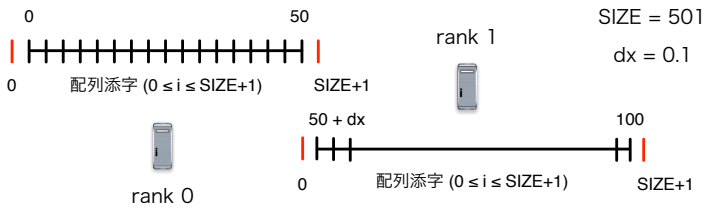
```
void go_ahead() /* 時刻を dt だけ進める */
{

  for(i=1; i<SIZE+1; i++){
    ud[i] = u[i] + .....

  }
}
```

SIZE = 1001

dx = 0.1

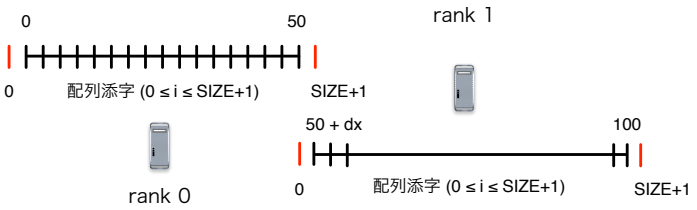
2ノードによる並列処理

2ノードで実行する場合（空間を2つに分割）



2つに分割した空間をうまく接続する必要がある
（rank 0 と 1 の間の通信）

2ノードによる並列処理実装




```
double u[SIZE+2], v[SIZE+2];

void go_ahead(int rank)
{
  MPI により必要な境界条件を取得（send/receive）
  for(i=1; i<SIZE+1; i++){
    ud[i] = u[i] + .....

  }
}
```


2ノードによる並列処理実装

- 時刻を dt 進める関数 process(int rank) を定義
- rank 0 は左半分の区画、rank 1は右半分の区画を担当

```
void go_ahead(int rank)
{

  if( rank == 0 ) {
    MPI により右端の境界条件を取得（send/receive）
    陽的差分
  }
  if( rank == 1 ){
    MPI により左端の境界条件を取得（send/receive）
    陽的差分
  }
}
```


2ノードによる並列処理実装

- それぞれのノードの計算結果を、個別のファイル（ファイル名は異なる！）に書き出す。座標に注意！
- Mathematica で2つのファイルを連結して図示。

並列処理の効果

- 時刻を dt 進めるために必要な計算量は分割数 N に比例
- ノード間通信に要する時間 Tc（通信には時間がかかる）
- 陽的差分の処理時間＋通信時間が実時間

1ノード処理	2ノード処理
$T \propto 2N$	$T \propto N + Tc$

分割数 N が大きいほど 2ノード並列処理が効果的

課題

- Schnakenberg kinetics による1次元反応拡散方程式を 2 つのノードを用いて並列計算するプログラムを作成せよ。
- 処理速度（実行時間）を測定し、並列化の効果（2ノードを用いると2倍速くなるのか？）について調べよ。分割数 N を変化させ得ると並列化の効果はどうなるか？
- パラメータは次の値を用いること。

$$k_1 = 0.2, k_2 = 1.0, k_3 = 1.0, k_4 = 0.5$$

$$D_u = 1.0, D_v = 14.0$$

$$0 \leq x \leq 100$$