

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？

プログラムの骨格 (1次元)

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

main()
{
    initialize(); // 初期条件の設定、ファイルのオープンなど
    process();    // 処理
    finish();     // ファイルのクローズなど、後始末
}

void process()
{
    int step;

    for(step=0; step<STEP; step++){
        if( step%INTV == 0 ) write_data();
        go_ahead(); // 時刻を dt 進める関数呼び出し
    }
}
```

処理を関数毎にまとめる

```
void go_ahead()  
{  
    double ud[SIZE+2], vd[SIZE+2];  
    int i;  
  
    /* 陽的差分法 */  
    for(i=1; i<SIZE+1; i++){  
        ud[i]=u[i]+cu*(u[i-1]-2*u[i]+u[i+1])+fn(u[i], v[i])*DT;  
        vd[i]=v[i]+cv*(v[i-1]-2*v[i]+v[i+1])+gn(u[i], v[i])*DT;  
    }  
  
    /* 境界条件の設定 */  
    ud[0] = ud[1]; ud[SIZE+1] = ud[SIZE];  
    vd[0] = vd[1]; vd[SIZE+1] = vd[SIZE];  
  
    // ud[], vd[] と u[], v[] の入れ替え (無駄な処理)  
    // ud, vd, u, v を入れ替えて計算。  
    // go_aheadを呼び出すと時間は 2*DT だけ進む  
}
```

1次元反応拡散方程式

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

Schnakenberg kinetics

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

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

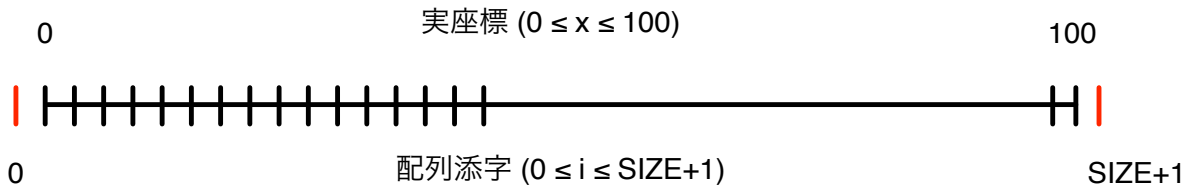
$$g(u, v) = k_4 - k_3 u^2 v$$

区間 $0 \leq x \leq 100$ を

- 1) $N = 1,001$ ($DX = 0.1$)で分割して 1ノードで計算
- 2) 2ノードを用いて ($N = 501, DX = 0.1$) 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）

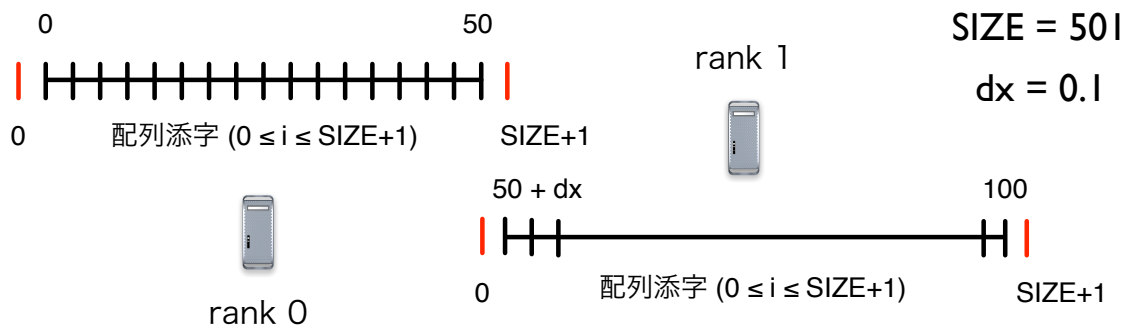


`double u[SIZE+2], v[SIZE+2];` 配列の添字 0, SIZE+1 は境界条件用のダミー

```
void go_ahead() /* 時刻を dt だけ進める */           SIZE = 1001
{                                                       DX = 0.1
  for(i=1; i<SIZE+1; i++){
    ud[i] = u[i] + ..... // 領域内部状態の更新
  }
  ud[0]=ud[1]; ... 境界条件の設定
}
```

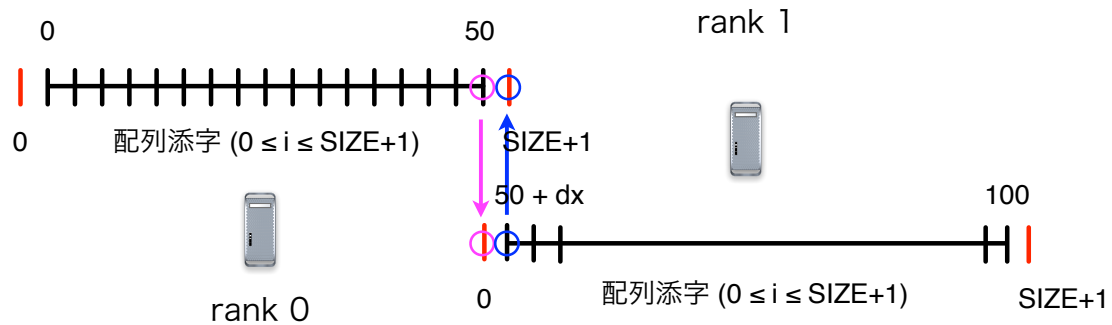
2ノードによる並列処理

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 の間の通信が必要)

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2つに分割した空間を接続する (send/receive)  
    for(i=1; i<SIZE+1; i++){  
        ud[i] = u[i] + .....  
    }  
    ud[0]=ud[1]; ...  
}
```

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  $u[SIZE+1]$ ,  $v[SIZE+1]$  を取得  
        陽的差分
```

```
    }
```

```
    if( rank == 1 ){  
        MPIにより左端の境界条件  $u[0]$ ,  $v[0]$  を取得  
        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（別資料を参照）。

```
void write_data(int rank)
{
    int i;
    if( rank == 0){
        for(i=1; i<=SIZE; i+=INTV_THIN){
            fprintf(fp_u, "%f %f ", (i-1)*DX, u[i]);
            fprintf(fp_v, "%f %f ", (i-1)*DX, v[i]);
        }
        fprintf(fp_u, "\n"); fprintf(fp_v, "\n");
    }
    if( rank == 1 ){
        for(i=1; i<=SIZE; i+=INTV_THIN){
            fprintf(fp_u, "%f %f ", SIZE*DX + (i-1)*DX, u[i]);
            fprintf(fp_v, "%f %f ", SIZE*DX + (i-1)*DX, v[i]);
        }
        fprintf(fp_u, "\n"); fprintf(fp_v, "\n");
    }
}
```

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 T_c （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

$$T \propto N$$

2ノード処理

$$T \propto N/2 + T_c$$

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。

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

$$D_u = 1.0, D_v = 14.0$$

$$0 \leq x \leq 100$$