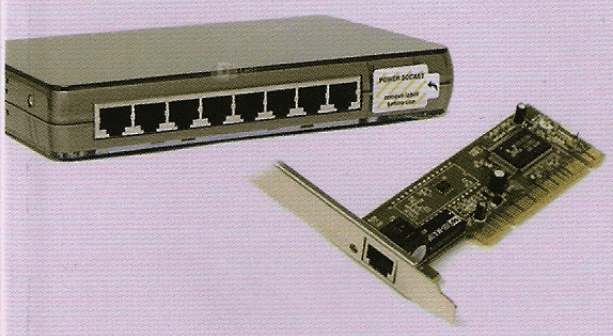
PC CLUSTER

BUILDING & PARALLEL COMPUTING

PC 클러스터 구축 및 병렬계산

김성기 · 이동선 · 정다래 · 김준석 지음



KYOWOOSA 教友社

PC 클러스터 구축 및 병렬계산

(PC Cluster Building and Parallel Computing)

김성기 ◦ 이동선 ◦ 정다래 ◦ 김준석

2011년 3월 30일

머리말

컴퓨터로 많은 양의 계산을 하게 될 때 그 계산의 양이 컴퓨터의 성능을 넘어설 경우 컴퓨터가 제대로 계산하지 못하는 경우가 있을 것입니다. 혹은, 여러 대의 컴퓨터로 계산을 한다면 시물레이션하는 데에 걸리는 시간을 훨씬 줄일 수 있을 것이라고 생각해 본 적이 있을 것 입니다. 그렇다고 복잡한 컴퓨터 구조를 공부해가면서 병렬 컴퓨터를 직접 만들 엄두는 안 나셨을 것입니다. 이 책은 누구나 어렵지 않게 PC 클러스터 구축 및 병렬계산을 할 수 있게 만들었습니다. 효과적인 연구를 위해 병렬 계산이 필요한 공학자나 병렬 컴퓨팅을 처음으로 공부하려는 학생들을 위해 실용적인 면과 학문적인 면 모두를 담기 위해 노력했습니다. 설치에는 도움을 주고자 최대한 그림을 넣어가면서 과정을 설명하였기 때문에 차근차근 따라하면 순서를 진행하는데 막힘이 없을 것입니다. 처음 1장에서는 클러스터로 구축하는 데에 필요한 부품과 시스템 설치 및 병렬계산 프로그램을 알아보고, 2장에서는 구축된 클러스터로 계산하는 과정과 그 수치적 방법에 대해 다루었습니다.

제 1장은 두 개의 PC에 병렬 계산을 할 수 있는 시스템 구축을 다루었습니다. 일반적인 PC를 이용하여 수퍼 컴퓨팅이 가능한 클러스터 제작 방법을 누구나 쉽게 따라 할 수 있도록 소개 합니다.

제 2장은 구축된 클러스터로 병렬 계산을 하는 방법을 소개합니다. 병렬 프로그램 모델 MPI(Message Passing Interface)로 점대점, 집합 통신을 할 수 있어 대용량 계산을 빠르고 효율적으로 계산할 수 있습니다.

차 례

제 1 장

PC 클러스터 구축

제 1 절 PC 클러스터 구축

클러스터(Cluster)란 네트워크를 통해 여러 대의 컴퓨터를 연결하여 하나의 단일 컴퓨터처럼 작동하도록 제작한 컴퓨터를 말한다.

Cluster 구축 과정 요약 [1]

1. 병렬 컴퓨터를 만들기 위해 부품들을 준비한다.
2. 관리(Master)컴퓨터에 리눅스를 설치한 후 MPI(Message Passing Interface) 라이브러리를 설치한다.
3. 계산(Slave)컴퓨터에 리눅스를 설치 후 MPI 라이브러리를 설치한다.
4. 완성된 클러스터를 테스트한다.

1.1 클러스터를 만들기 위한 준비

♠ 본체 2 대

본 서에서는 본체 두 대를 가지고 PC 클러스터를 구축하는 과정을 설명할 것이다. 그림 1.1은 클러스터 구축을 위해서 사용할 두 대의 컴퓨터(모델명 삼성 DB-Z70)이다. 이 중 하나는 관리 컴퓨터로, 다른 하나는 계산 컴

[1] 본 서에서는 • Master 컴퓨터 ⟶를 관리 컴퓨터로 • Slave 컴퓨터를 ⟶ 계산 컴퓨터라 한다.

♠ **스위칭 허브(Switching Hub)**

스위칭 허브(그림 1.3)는 근거리통신망(LAN)을 구성할 때 단말기간 집선 장치로 스위칭 기능을 가진 장치를 가리킨다.

그림 1.3: Route

♠ **KVM 스위치**

클러스터를 사용할 때에는 모니터, 마우스, 그리고 키보드를 사용하지 않고 네트워크를 이용하여 프로그램을 실행하게 된다. 하지만 처음에 클러스터를 구축할 때에는 모니터를 보고 마우스와 키보드를 사용하여 운영체제와 필요한 라이브러리를 설치한다. 따라서 하나의 키보드, 모니터, 마우스를 공유하면 비용절감의 효과가 있다. 이 때 쓰이는 장비를 KVM(Keyboard, Video, Mouse) 스위치라고 한다.

그림 1.4: Switch

그림 1.7: 연결 방법 : 좌측부터 모니터, 키보드, 마우스를 콘솔 포트 커넥터로 연결

다음 단계로 ②번 위치(그림 1.8 참조)에 PC에 연결할 케이블에 대해서 알아보자. 그림 1.9 처럼 마우스, 키보드, 그리고 모니터 케이블을 연결한다. 다른쪽 케이블은 각각 PC에 연결한다. 이단계를 반복해서 두대의 PC에 케이블을 연결한다.

그림 1.8: ②번 포트 정면

그림 1.10은 각각의 KVM스위치와 연결된 PC를 보여준다.

③ 버튼을 누르면 컴퓨터와 연결된 케이블을 변경할 수 있게된다. 해당 포트의 붉은색의 LED 빛은 현재 연결된 PC를 알려준다.

♠ **공유기 연결**

LAN선은 컴퓨터마다 하나씩 필요하는데 관리 컴퓨터는 클러스터 통신할 랜카드와 외부에 접속할 랜카드가 있으므로 2개의 LAN선이 있어야한다.

그림 1.11: LAN선을 이용한 공유기 연결

♠ **설치 완료**

그림 1.12: 클러스터 장치 연결이 완성된 모습

rsh-server

rlogin, rsh 관련 서비스를 구동하기 위해서는 rsh, rsh-server 두 개의 패키지가 설치되어 있어야 한다. 그런데 이미 rsh는 설치되어 있기 때문에 rsh-server만 설치 해주면 된다. rlogin, rsh 는 MPI 와 같은 병렬 프로그램이 프로세스간 통신을 할 때 사용되는 주요 프로토콜이다.

lam-mpi

LAM/MPI는 지금은 The Laboratory for Scientific Computing(LSC) at the University of Notre Dame에서 개발되어 제공되고 있는 MPI표준을 따르는 병렬 인터페이스다. MPI-2표준에 따라 만들어졌고 대체로 MPICH2와 비슷하다. LAM/MPI는 MPICH, MPICH2와 비교할 때 좀 더 안정적이고 작은 크기의 메시지 전달이 자주 일어나는 작업에서 더 우수한 성능을 보인다고 평가되고 있고 LAM/MPI는 PVM처럼 다른 종류의 시스템을 하나의 가상 기계로 사용에 더 적합하게 만들어졌다.

Fedora Download 방법

1. KAIST FTP Server에서 Download : 주소 입력란에 ftp://ftp.kaist.ac.kr/fedora/linux/releases/11/Fedora/i386/iso/를 입력하고 Fedora-11-i386-DVD.iso를 다운받는다.

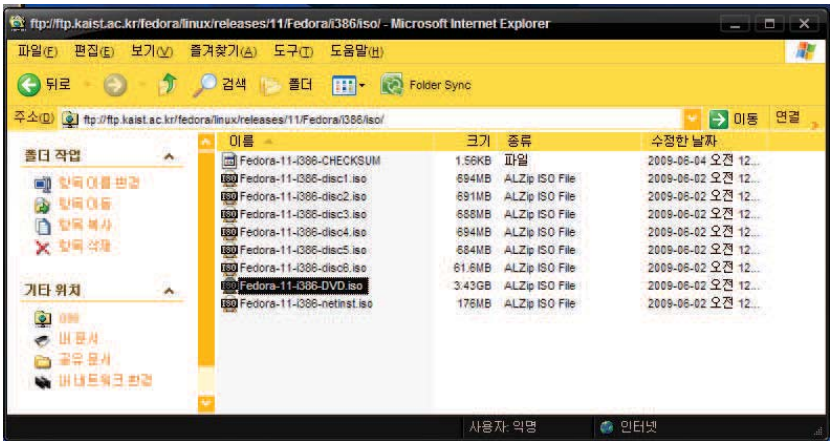


그림 1.14: KAIST FTP Server

- 11 Directroy로 이동

그림 1.17: 11 Directroy

- Fedora Directroy로 이동

그림 1.18: Fedora Directroy

- Fedora-11-i386-DVD.iso 를 다운받는다.

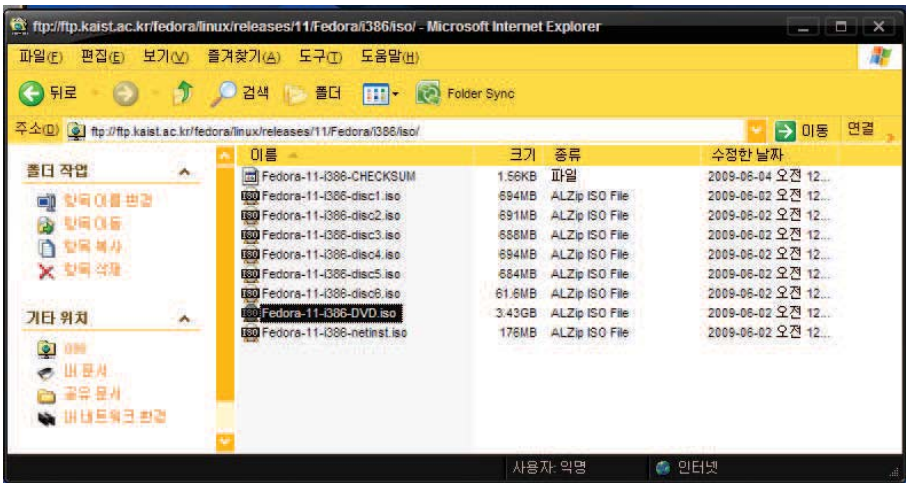


그림 1.21: Fedora iso Download

제 2 절 관리 컴퓨터(Master computer) Linux 설치

*본 절의 내용들은 **Fedora 11**을 기준으로 작성되었다.

두 개의 랜카드를 구비한 컴퓨터에 설치한다.

♠ **BIOS 설정**

Fedora11 DVD를 CDROM에 넣고 재부팅을 한다. CDROM로 부팅해야 하기 문에 BIOS에서 부팅순서를 CDROM이 첫 순서로 되도록 해 놓는다. BIOS로 들어가는 방법은 부팅 하는 화면에서 F2키를 누르면 된다. CDROM이 가장 부팅 우선순위로 되면 F10키를 눌러 저장하고 BIOS화면에서 나간다.

♠ **Media Test**

부팅을 하면 CD 매체를 검사할지 물어보는데 Tab 키를 사용하여 [Skip]을 선택한 후 Enter 키를 누른다. 이후에 Next 클릭한다.

그림 1.23: Media Test

♠ **Language**

리눅스 상에서 쓰일 언어를 선택한다. English(English)를 선택 후 Next 클릭

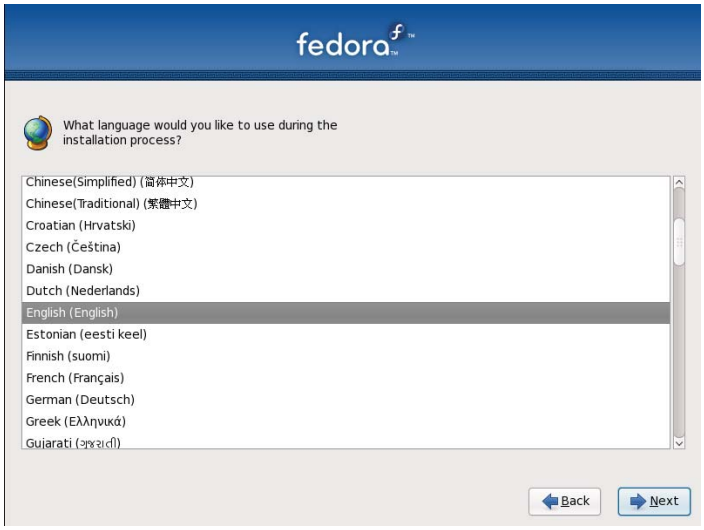


그림 1.24: Language

그림 1.26: 관리 컴퓨터

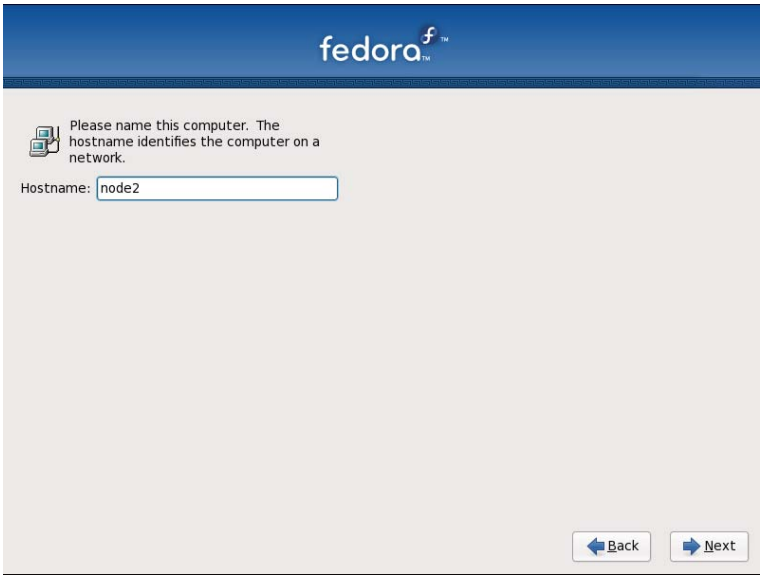


그림 1.27: 계산 컴퓨터

♠ **Partition Hard**

Partition Hard는 Create custom layout을 선택한다. 그 다음 Next를 누른다.

그림 1.30: Partition Hard

그 다음 New를 클릭하여 Partition을 할당한다. Mount Point는 /으로 선택하고 File System Type는 ext3으로 Additional Size Options항목에서 Fill to maximum allowable size를 체크한다. 그 다음 OK를 누른다. 이제 Next를 클릭한다.

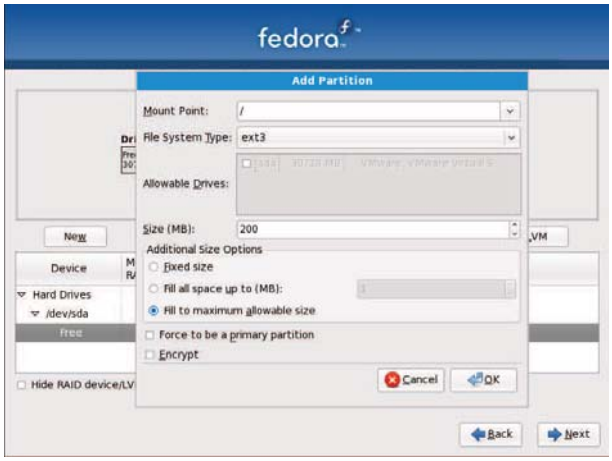


그림 1.32: Partition Add

경고창은 무시하고 Yes를 클릭한다.

그림 1.33: Partition Warning

♠ **Include Application**

Office and Productivity외에 Software Development를 추가로 체크한다. 이는 병렬 프로그램인 LAM-MPI를 설치시 필요한 라이브러리가 Software Development안에 있기 때문에 반드시 해주어야 한다. Next를 누르면 설치가 진행된다. (보통 15분에서 20분정도 걸린다.)

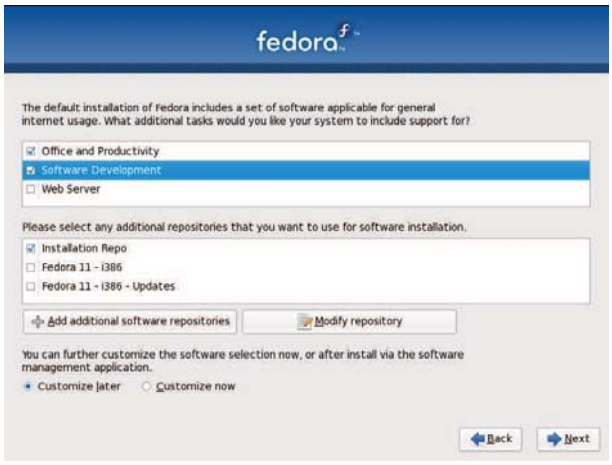


그림 1.36: Include Application

(a) (b)

그림 1.37: (a) Install (b) Reboot

설치가 완료되면 Reboot을 클릭하고 나서 Fedora 11DVD를 CDROM에서 꺼낸다.

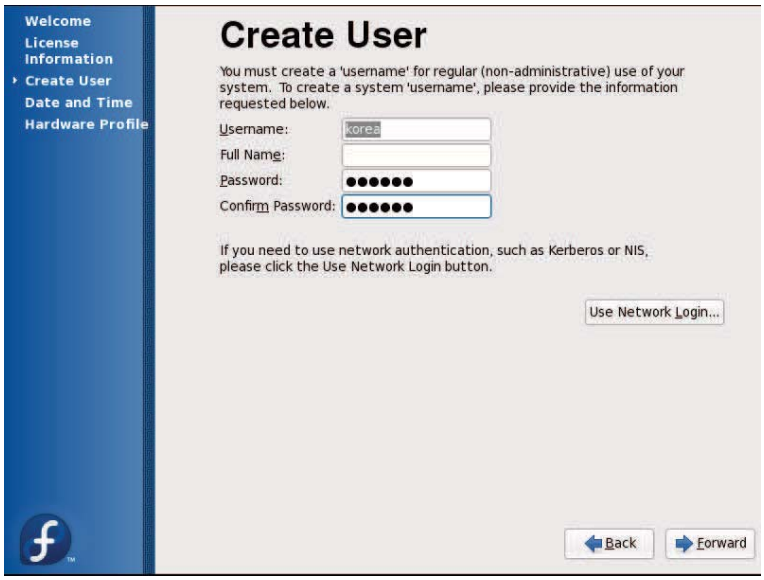


그림 1.39: Create User

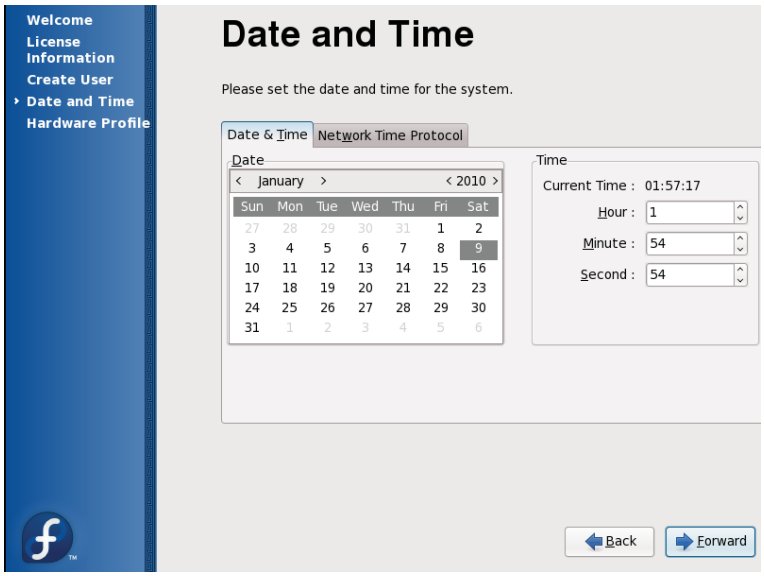


그림 1.40: Date And Time

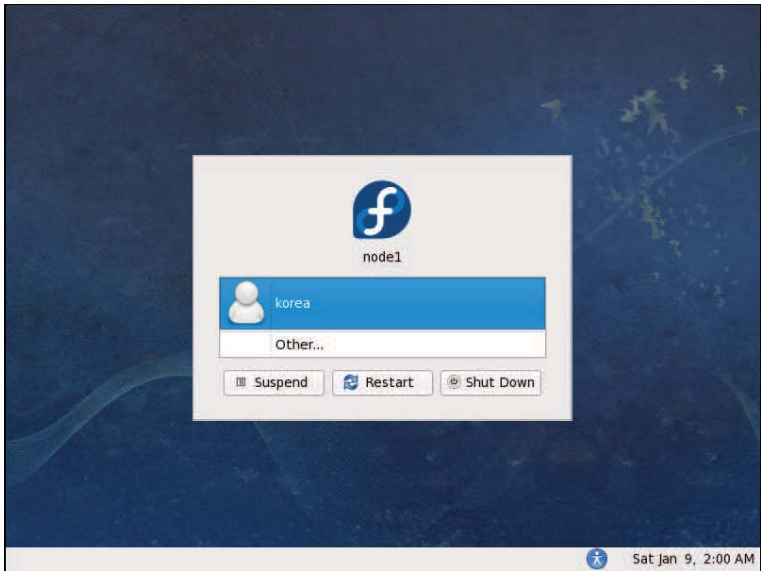


그림 1.42: Login

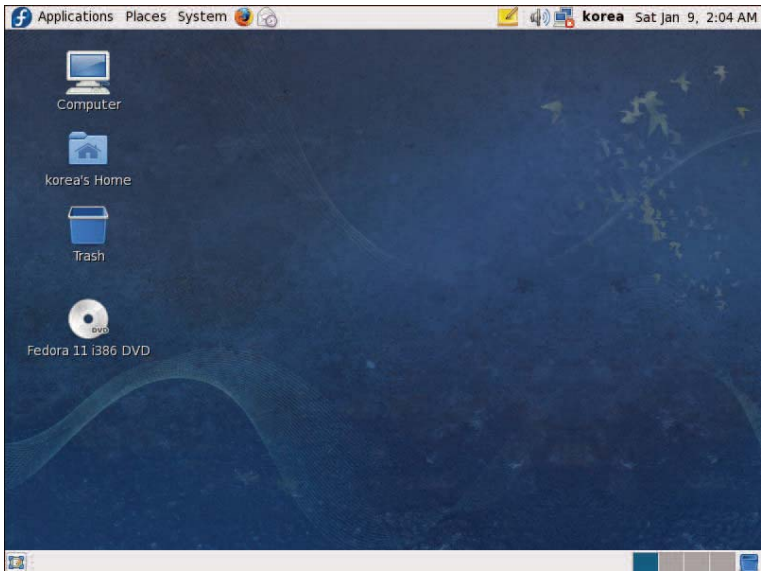


그림 1.43: Main

♠ 외부로 연결된 네크워크 장치 설정

(본 책에서는 eth1이 외부로 연결되어 있다. 확인을 위해서는 Network configuration에서 Hardware를 보면 외부 랜카드 Description을 보면 알수있다. 계산 컴퓨터인 경우 설치하지 않는다.)

- Terminal로 들어가 `system-config-network`를 입력한다.
- 그 다음 외부로 연결된 장치(eth1)를 더블 클릭
- Controlled by NetworkManager와 Activate device when computer starts를 체크하고
- Statically set IP address항목을 선택하여 Address, Subnet mask, Default gateway address, Primary DNS, 그리고 secondary DNS를 입력한다. 반드시 공인 IP이여야한다. OK를 클릭하고 File > Save를 클릭한다. 그리고 Quit를 하고 나온다.

본 예제에서는
Address : 163.152.197.67
Subnet mask : 255.255.255.0
Default gateway address : 163.152.62.1
Primary DNS : 163.152.1.1
Secondary DNS : 163.152.11.6
으로 한다.

♠ **내부로 연결된 네크워크 장치 설정**
(본 책에서는 eth0이 내부로 연결되어 있다.)

- Terminal로 들어가 `system-config-network`를 입력한다.
- 그 다음 내부로 연결된 장치(et0)를 더블클릭
- Controlled by NetworkManager와 Activate device when computer starts를 체크하고
- Statically set IP address항목을 선택하여 Address, Subnet mask를 입력한다. 내부로 연결된 컴퓨터만 통신을 하기 때문에 어떤 IP를 주소를 입력해도 된다. 단 다른 계산 컴퓨터와 같은 IP는 불가능하다. OK를 클릭하고 File > Save를 클릭한다. 그리고 Quit를 하고 나온다.

본 예제에서는
- 관리 컴퓨터인 경우(그림 1.46)

Address : 192.168.111.111
Subnet mask : 192.168.0.100

- 계산 컴퓨터인 경우(그림 1.47)

Address : 192.168.111.222
Subnet mask : 192.168.0.100
으로 한다.

♠ **Network 환경 적용**
앞서 설정해놓은 network 환경을 적용하기 위해

- Terminal로 들어가 `service network restart`를 입력한다.

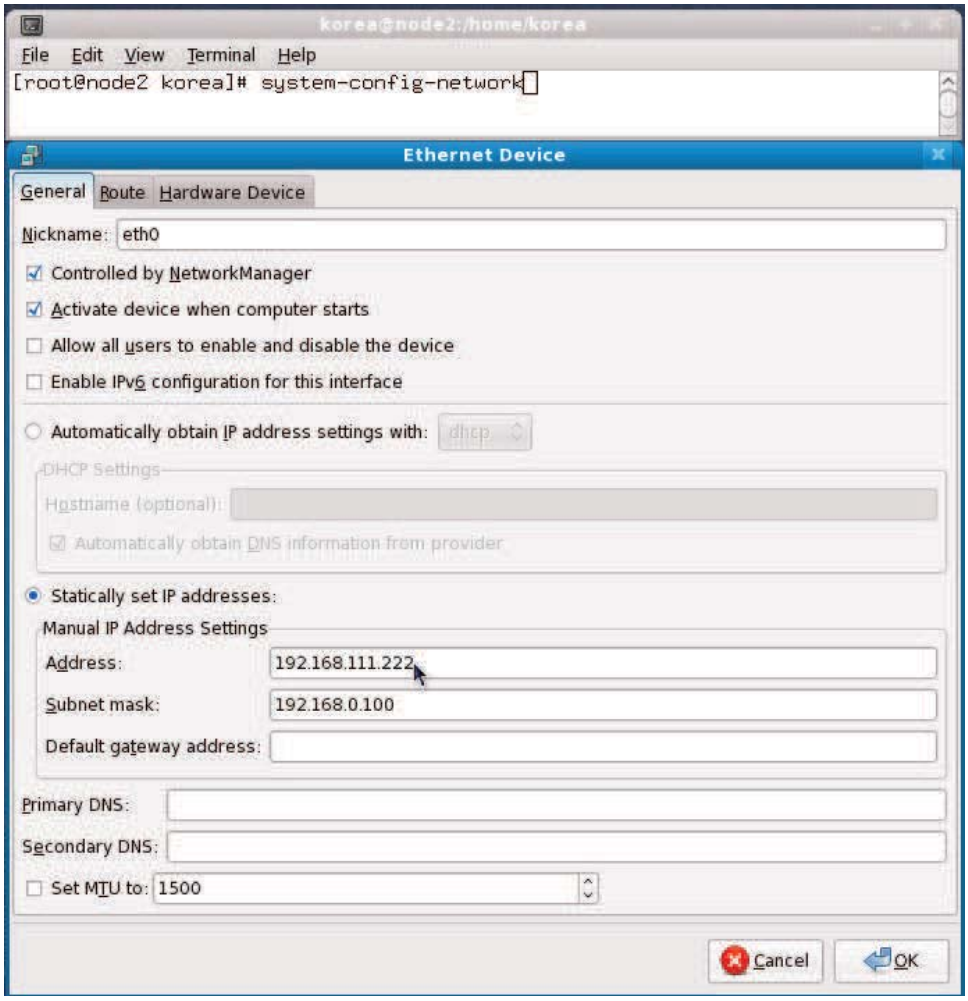


그림 1.47: 계산 컴퓨터 내부로 통신 할 Network 장치 설정

♠ **xinetd-2.3.14-21.fc10.i386.rpm 설치**

`rpm -ivh xinetd-2.3.14-21.fc10.i386.rpm`를 입력하고 엔터키를 친다.

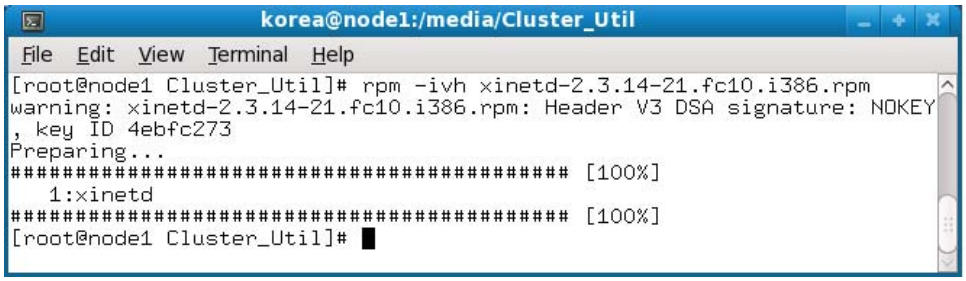


그림 1.49: Rpm Xinetd 설치

♠ **rsh-server-0.17-51.fc10.i386.rpm 설치**

`rpm -ivh rsh-server-0.17-51.fc10.i386.rpm`을 입력하고 엔터키를 친다.

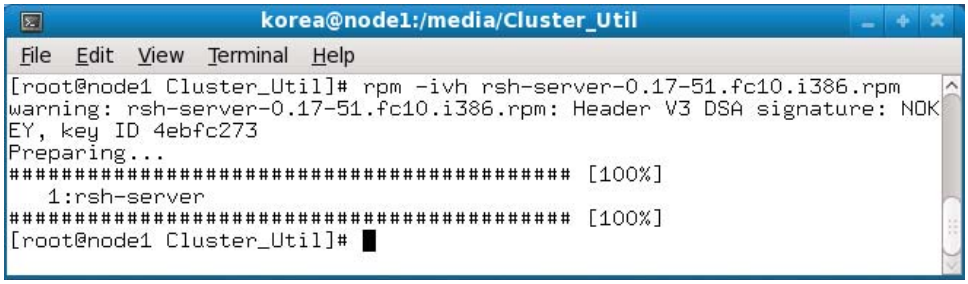


그림 1.50: Rpm Rsh-Server 설치

♠ **LAM-MPI 설치 및 설정**

`tar -C /home/korea/Download -zxvf lam-7.1.5b2.tar.gz` 을 입력한다. -C 옵션은 압축을 풀 장소를 지정하는 옵션이다. korea는 계정이름이므로 만든 계정에 따라 달라질수 있다.

- 압축을 푼 곳 `lam-7.1.5b2` 폴더로 이동한다.

  본 책에서는 `cd /home/korea/Download/lam-7.1.5b2/`를 입력하면 된다.

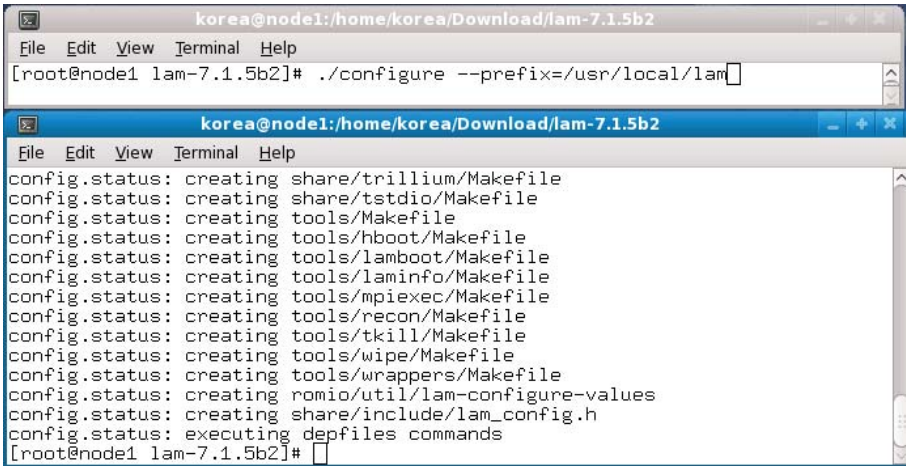


그림 1.53: configure

♠ **make**

make 명령어는 LAMMPI를 Build한다.

- Terminal에서 `make`를 입력한다.

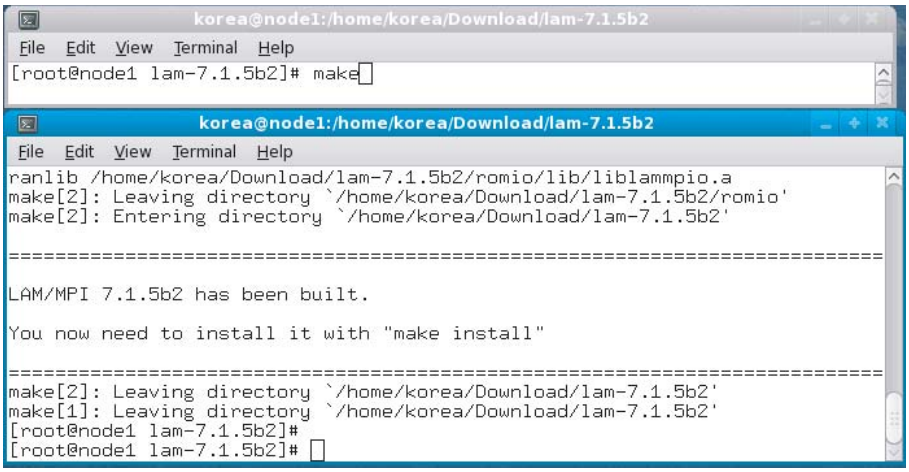


그림 1.54: make

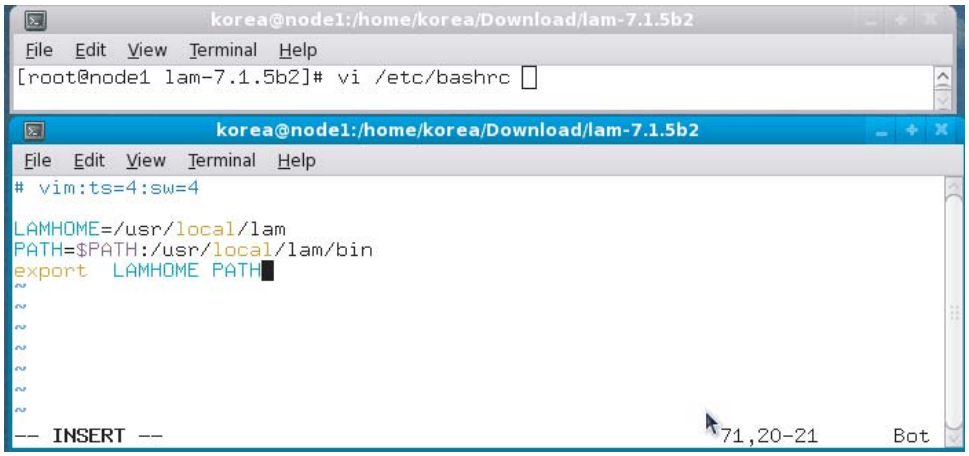


그림 1.56: LAMMPI 환경 설정

bashrc파일을 적용하기 위해

- Terminal에서 `source ~/.bahsrc`를 입력한다.

그림 1.57: 수정한 bashrc 파일 적용

♠ ntsysv 설정

- Terminal 에서 `ntsysv`을 입력한다. 그러면 부팅시 데몬을 자동으로 실행 할 수 있는 항목들이 나온다. **nfs, rexec, rlogin, rpcbind, rsh**가 체크되었는지 확인하고, 체크표시가 없다면스페이스바를 이용하여 체크한다. 이동은 Tab키이다. 체크를 한 후 Tab키를 이용하여 Enter를 누르면 된다.

여기서, 체크되었는지 확인한 항목들을 간단히 설명하면 다음과 같다.

NFS(Network File System)

NFS란 Sun Microsystems사에서 개발된 것으로 TCP/IP네트워크 상에서 다른 컴퓨터의 파일시스템을 마운트하고 공유하여 상대방의 파일 시스템일

되어야 한다. rpc데몬은 시스템에서 RPC서비스를 관리한다.
이제, ntsysv로 변경된 내용을 적용하자.

- Terminal 에서 `service xinetd restart`을 입력한다. 그림 1.62에서 볼 수 있듯이 Starting xinetd항목만 OK이면 성공적으로 된 것이다.

그림 1.59: Xinetd Restart

- Exports 설정 (관리 컴퓨터만 설정)

  Terminal에서 `vi /etc/exports`를 입력후 엔터키를 친다.
  /etc/exports파일을 수정하면 파일에 마운트를 허가할 디렉토리와 마운트를 허가할 호스트 목록을 설정할 수 있다.

```
/home  node1(rw,async,no_root_squash)
/home  node2(rw,async,no_root_squash)
```

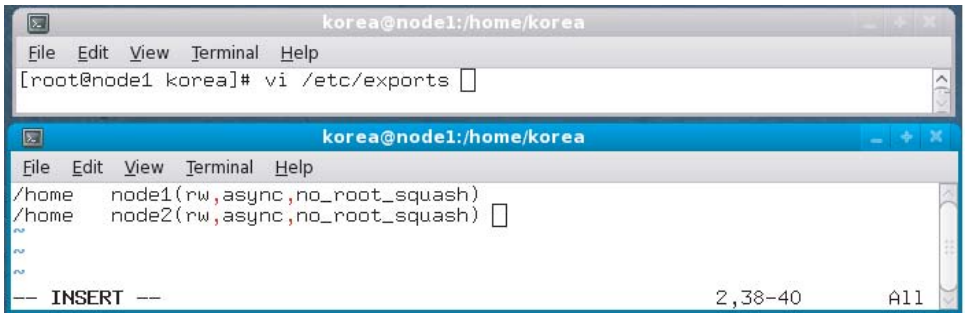


그림 1.61: Exports

Terminal에서 `service nfs restart`를 입력한다. Starting NFS항목들만 OK로 나오면 성공한 것이다.

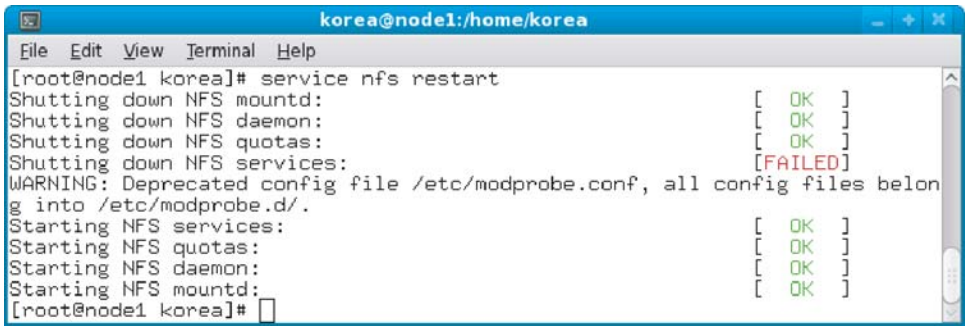


그림 1.62: NFS Restart

portmapper 데몬 확인

RPC portmapper은 RPC 프로그램 번호를 TCP/IP(혹은 UDP/IP) 프로토콜 포트 번호로 변환하는 서버이다. 이것은 머신상의 RPC 서버들을

접근할 Host 등록

서로 접근할 호스트를 /etc/hosts.equiv에 등록한다. 물론 host이름으로 사용하려면 /etc/hosts에 미리 등록해놓아야 한다.

- Terminal에서 `vi /etc/hosts.equiv`를 입력한다.
  본 예제에서는 node컴퓨터 2대 존재하며, host를 node1과 node2로 정의했으므로, 그림 1.65과 같이 **node1, node2**를 입력한 후 저장하자.

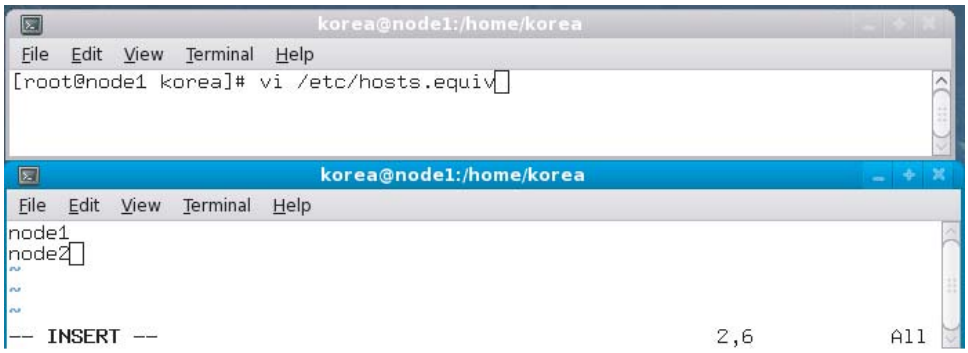


그림 1.65: 접근할 Hosts

♠ 부팅시 자동 mount 설정

- Terminal에서 `vi /etc/rc.local`을 입력한다. 마지막 줄에 다음을 입력하자.

```
sleep 7
mount -a
```

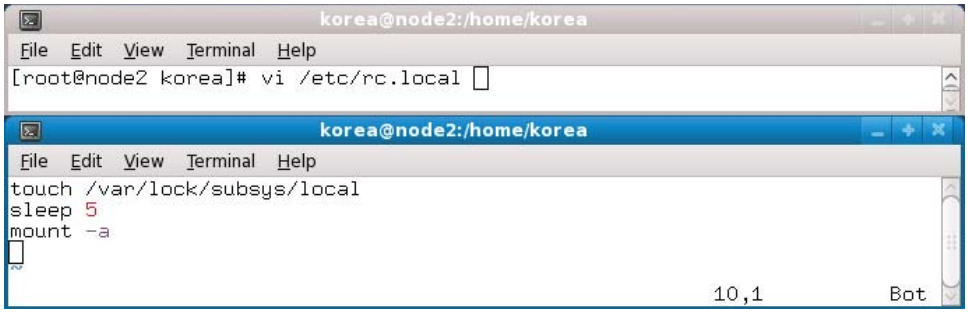


그림 1.67: 부팅시 자동 Mount 설정

♠ 수동 mount 설정

자동 mount 설정이 되지 않을 경우, 수동으로 mount 설정을 해야 한다.

- Terminal에서 `mount -t nfs node1:/home /home`을 입력한다.

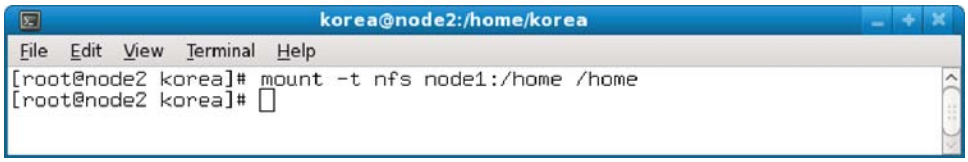


그림 1.68: 수동 Mount 설정

lamboot

LAM/MPI를 이용하여 MPI Job을 실행 시키기 위해서는 계산에 참여하는 모든 Node에 대해 lamd(LAM demon)가 실행되어야 하며, lamboot이라는 명령이 이러한 역할을 한다. 또한 사용할 Cluster Node에 대한 정보가 있어야 한다.

- 관리 컴퓨터 Terminal에서 root계정으로 `vi lamhosts`를 입력한다. 파일이름은 어떠한 이름이어도 상관없다.

  `node1`

  `node2`

  를 입력한다.

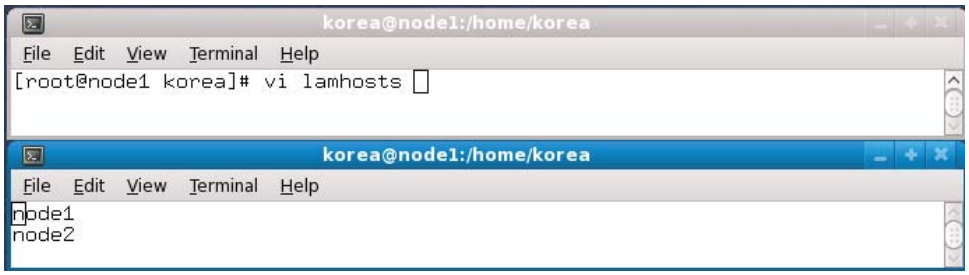


그림 1.71: Cluster Node 정의

그 다음 lamboot명령어로 lamd를 실행시킨다.

- Terminal에서 일반계정으로 `lamboot -v lamhosts`(위에서 생성한 파일)를 입력한다.

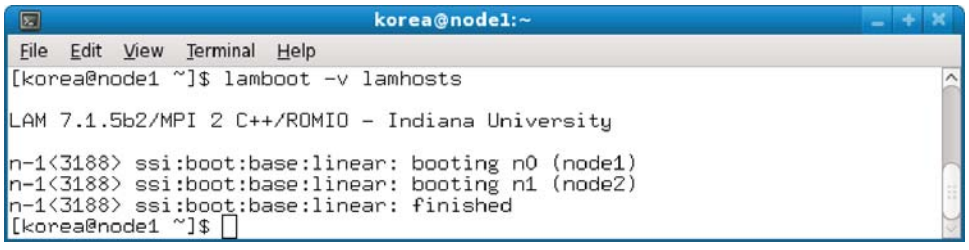


그림 1.72: Node컴퓨터 정의

제 2 장

병렬계산

이제, 병렬 컴퓨터를 사용할 준비가 끝났다고 가정하고 병렬 프로그램을 작동시켜 보자. 이 장에서는 병렬 컴퓨팅의 개념을 이해하고 병렬 함수들의 선언과 기능을 알아보고 병렬화하여 계산된 수치적 해를 GNUPLOT으로 나타내 본다.

제 1 절 Message Passing Interface(MPI)

병렬화 계산을 할 수 있는 언어에는 C언어, C++, FORTRAN 등과 같이 여러 언어가 있다. Message Passing Interface(MPI)는 이런 컴퓨터 언어를 사용하여 프로세서들 사이의 송수신을 위해 호출하는 함수들의 라이버리이다. 일반적으로 알려진 MPI-I 외에도 MPI-II나 공유 메모리 환경에서 프로그램을 병렬화 하는 OpenMP 표준과 같이 여러가지가 있지만 여기에서는 병렬 계산의 가장 기본적인 MPI을 다루어 본다.

제 2 절 병렬 계산에 대해서

2.1 병렬 계산(Parallel Computing) 준비

컴퓨터에서 병렬 계산을 수행할 때에, 컴퓨터 언어로 프로그래밍한 코드를 관리 컴퓨터에서 컴파일(mpicc)한 후 실행(mpirun)을 하면 실행 파일이 계

```
}
```

C compiler인 gcc로 compile한다. `gcc -o hello.exe hello.c`를 입력한다 (그림 2.1).

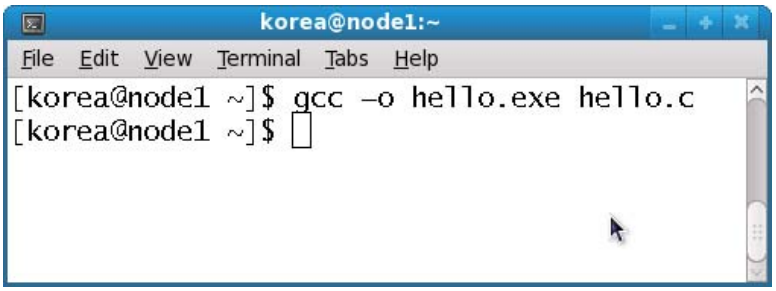


그림 2.1: hello.c Compile 명령문

이제 compile해서 생긴 파일을 실행한다. `./hello.exe`를 입력한다 (그림 2.2). 에러없이 정상적으로 실행이 되는지 확인한다.

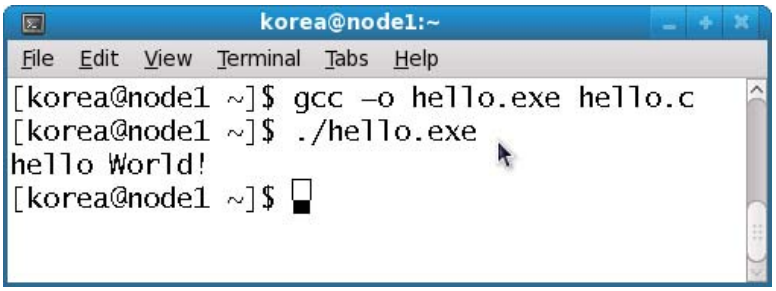


그림 2.2: hello.exe 실행 및 실행결과

다음은 1차원 열방정식을 C 프로그램으로 구현한 것이다. 이 코드에 대한 수학적 설명은 (4.3)절에 설명되어 있으니 참고하기를 바란다.

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
```

```
  for (i=0; i<=n; i++) {
  printf("%f\n", h[i]);}

  free_dvector(h,0,n+1);
  free_dvector(h_new,0,n+1);

  return 0;
}
double *dvector (long nl, long nh)
{
   double *v;
   v=(double *) malloc((nh-nl+1+1)*sizeof(double));
   return v-nl+1;
}
void free_dvector(double *v, long nl, long nh)
{
   free (v+nl-1);
   return;
}
```

제 4 절 병렬 계산

대부분의 병렬 시스템에서 프로그램의 실행을 포함하는 프로세서(CPU)는 0을 포함하는 고유한 양의 정수 값을 갖는다. 프로그램을 실행하는 p개의 프로세서들이 있다면, rank로 $0, 1, \cdots, p-1$을 갖게 될 것이다. 그리고 주로 프로세서 0은 관리 컴퓨터로서 메세지 송수신을 통해 다른 프로세서들과 통신을 시행한다.

병렬 컴퓨팅에서 착각하지 말아야 하는 것은 계산 컴퓨터에게 각각의 프로

고 있는 프로세서의 크기를 알려준다. CPU를 두 개를 사용하면 p값에 전체 컴퓨터에 2가 입력된다. 여기서 my_rank나 p값은 미리 정수로 선언해 둔다. 물론 다른 문자로 입력 해도 상관이 없다. 즉, 이 두 함수에 의해 클러스터의 모든 프로세서는 자신의 고유번호(my_rank)와 전체 프로세서의 수(p)를 알게 되어 `MPI_Send`와 `MPI_Recv`와 같은 병렬 함수를 이용할 때 데이터를 송수신 할 수 있게 된다.

MPI종료

`MPI_Finalize(void);` MPI를 종료시키기 위한 함수이다. 모든 프로세서에서 호출되어 프로그램이 종료된다. 이 함수 뒤에는 MPI의 함수를 쓸 수가 없다.

프로그램의 작성이 끝나면 serial 코드와 유사한 방법으로 컴파일을 해야 한다. 작성된 코드를 관리 컴퓨터에 옮기고 터미널에서 아래와 같이 입력한다. 이 책에서는 앞서 설치된 MPI 컴파일러 mpicc를 이용하였다. -o 뒤의 실행파일은 컴파일 후 생성될 파일의 이름을 사용자가 지정한다.

- Terminal에서 일반 계정으로
  `mpicc -o (실행파일.exe) (컴파일될_파일.c)` 를 입력한다.

코드에 오류가 있다면 관리 컴퓨터에서 컴파일 시 알려 준다. 그러나 프로세서간의 통신이 잘못 되었다면 컴파일 시 알려주지 않으므로 조심해야 한다. 컴파일이 오류없이 되었다면 실행은 mpirun으로 사용될 프로세서의 개수를 입력해 준다. 프로세서의 수는 작성된 프로그램에서 맞게 입력하여야 한다. 사용될 프로세서보다 적거나 많게 입력하면 프로그램은 오류 값을 출력한다.

- Terminal에서 일반 계정으로
  `mpirun -np (양의 정수 값) (실행파일.exe)` 를 입력한다.

-np 뒤에는 프로그램이 실행될 프로세서의 수를 양의 정수를 입력한다. 이 값이 코드에서 p 값으로 들어가게 된다.

from process 1!)이 나오지 않는다면 관리 컴퓨터의 터미널에서 lamboot -v lamhosts를 입력하여 lamboot를 실행 시켜 본다.

```
/******************** hellompi.c **********************/
#include <stdio.h>
#include <string.h>
#include "mpi.h"

void main(int argc, char* argv[])
{
    int my_rank, p, source, dest, tag=0;
    char message[100];
    MPI_Status status;

    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &p);

    if (my_rank != 0) {
        sprintf(message, "Greetings from process %d!",
my_rank);
        dest = 0;
        MPI_Send(message, strlen(message)+1, MPI_CHAR,
             dest, tag, MPI_COMM_WORLD);
    }
    else {
        for (source = 1; source < p; source++) {
            MPI_Recv(message, 100, MPI_CHAR, source, tag,
                MPI_COMM_WORLD, &status);
            printf("%s\n", message);
```

4.3 열방정식

다음은 열방정식을 명시적 유한 차분 법에 따라 계산해 보자. 열방정식은 식(2.2)과 같은 조건을 가진다고 가정하고 미분 방정식을 이산화 시켜 수치적인 해석해를 구하여 해석해와 비교해 보자.

$$\frac{d^2u}{dx^2} = 0, \quad 0 \le x \le 1 \tag{2.1}$$

$$u(0) = 0 \quad \text{and} \quad u(1) = 0 \tag{2.2}$$

전체 정의역 $\Omega = [0,1] \times [0, T = 0.001]$에서 sine 함수의 초기 값을 가지면

$$u(x,0) = \sin(\pi x)$$

1차원 열 방정식의 해석해는 아래와 같고 이 식의 그래프는 그림(2.11)의 곡선처럼 그려진다.

$$w(x,t) = e^{-\pi t} \sin \pi x$$

편미분식을 이산화하기 위해 Taylor 정리를 사용하여 수치해 $u(x+h,t)$를 (x,t)에서의 u의 함수 값으로 표현해 본다.

$$u(x+h,t) = u(x,t) + u_x(x,t)h + \frac{u_{xx}(x,t)}{2!}h^2 + \cdots \tag{2.3}$$

유사하게 수치해 $u(x-h,t)$ 값도 구할 수 있다.

$$u(x-h,t) = u(x,t) - u_x(x,t)h + \frac{u_{xx}(x,t)}{2!}h^2 + \cdots \tag{2.4}$$

식 (2.3)과 (2.4)의 차를 구하면 열방정식에 쓸 수 있는 확산 방정식(2.5)을 얻을 수 있게 된다.

$$u_{xx}(x,t) = \frac{u(x+h,t) - 2u(x,t) + u(x-h,t)}{h^2} + O(h^2) \tag{2.5}$$

시간에 대한 미분 값도 식(2.3)과 같은 방법으로 구한다.

$$u_t(x,t) = \frac{u(x,t+1) - u(x,t)}{h^2} + O(h) \tag{2.6}$$

보내달라고 요청하면 그 값을 메시지로 주고받도록 하였다. 그림 (2.5)와 같이 가장자리의 M과 0의 값이 교환된다.

```
/*****************  heat_mpi.c *********************/

# include <stdlib.h>
# include <stdio.h>
# include <math.h>
# include "mpi.h"

double *dvector (long nl, long nh);
void free_dvector(double *v, long nl, long nh);
int main ( int argc, char *argv[] )
{
  int id, p, i, it, it_max = 10, m = 4, tag;
  double pi, dt, h, *u_old, *u_new, start,etime;


  MPI_Init ( &argc, &argv );
  start = MPI_Wtime();
  MPI_Comm_rank ( MPI_COMM_WORLD, &id );
  MPI_Comm_size ( MPI_COMM_WORLD, &p );

  pi=4.0*atan(1.0);
  dt = 0.001;
  h=1.0/(2.0*m-1.0);
  u_old=dvector(0,m);
  u_new=dvector(0,m);
  for (i=0; i<=m; i++) {
```

```
  for (i=0; i<m; i++) {
  printf("node %d %f\n",id,u_old[i+id]);}

  free_dvector(u_old,0,m);
  free_dvector(u_new,0,m);

  etime = (MPI_Wtime() - start);

  if (id==1){
  printf("tasks took %6.6f seconds\n",etime);
  }
  MPI_Finalize ( );
  return 0;
}

double *dvector (long nl, long nh)
{
   double *v;
   v=(double *) malloc((nh-nl+1+1)*sizeof(double));
   return v-nl+1;
}
void free_dvector(double *v, long nl, long nh)
{
   free (v+nl-1);

}
```

여기서 dvector는 동적 메모리를 할당하고 free_dvector는 그 메모리를 제거하게 된다.

4.4 커뮤니케이션 전달

앞 단락의 메세지 출력과 같이 다른 rank와 데이터를 교환하는 것을 Communication이라 하는데 이런 교환 방식에는 Blocking과 Nonblocking 두 종류가 있다. Blocking Communication은 코드를 수행하는 각 각의 rank가 알고리듬의 교환 점에서 송신 신호를 보내고 다른 반대쪽에서 수신 가능 신호가 오면 데이터를 교환하게 된다. 즉, 하나의 rank가 MPI_Send에 도착하면 송신 가능 신호를 보내고 프로세스를 멈추고 있다가 다른 rank의 MPI_Recv가 송신 신호를 보내면 데이터를 보내고 난 후 프로세스를 진행하게 된다.(그림 (2.9)) 이런 Blocking 방식은 각 각 대응되는 MPI_Send와 MPI_Recv 한 쌍의 명령들을 순차적으로 실행하게 되어 process마다 데이터 양의 차이나 실행 처리 속도 차이에서 나오는 실행 시각 불일치를 사전에 방지할 수 있어 안전한 장점이 있지만 실행이 교착 상태에 빠지거나 실행 값을 교환하는 과정에서 병렬 컴퓨팅의 속도를 저하시킨다는 단점이 있다.

이처럼 MPI_Send와 MPI_Recv을 사용하여 병렬 계산을 할 때 데이터

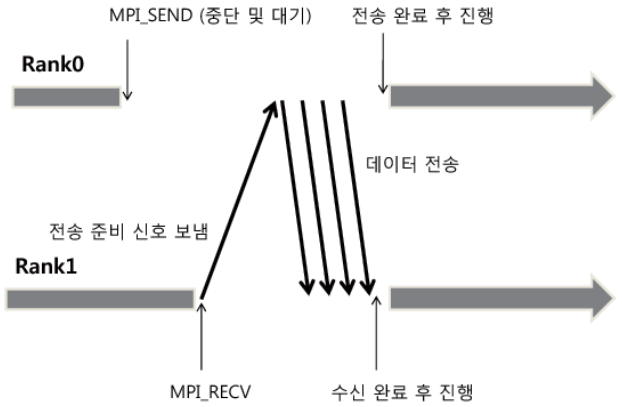


그림 2.8: blocking 데이터 교환

를 송신이나 수신할 준비가 되었다는 다른 프로세서의 허락이 필요한 경

```
/*******************    PART A  ***********************/

 MPI_Request requests[2*p];
 MPI_Status status[2*p];
 for (i=0; i<(2*p); i++) requests[i] = MPI_REQUEST_NULL;

 for (it=1; it<=it_max; it++) {
  if (id==1) {
   tag = 1;
  MPI_Isend(&u_old[1],1,MPI_DOUBLE,0,tag,MPI_COMM_WORLD,
            &requests[0] );}
  if (id==0) {
   tag = 1;
   MPI_Irecv(&u_old[m],1,MPI_DOUBLE,1,tag,MPI_COMM_WORLD,
            &requests[1]);}
  if (id==0) {
   tag = 2;
 MPI_Isend(&u_old[m-1],1,MPI_DOUBLE,1,tag,MPI_COMM_WORLD,
            &requests[2]);}
  if (id==1) {
   tag = 2;
   MPI_Irecv(&u_old[0],1,MPI_DOUBLE,0,tag,MPI_COMM_WORLD,
            &requests[3]);}
  /*************************************************/
```

그림을 그리는 명령문은 아래와 같다.

```
plot "data.dat" using 1:2 title 'a' with lines,\ "data.dat"
using 1:3 title 'b' with lines
```

즉,"data.dat"파일을 1열을 x축으로 2열을 y축 a의 값으로 선으로 그리게 되고 또한"data.dat" 중 1열을 x축으로 3열을 y축 b의 값을 선으로 그리게 된다.

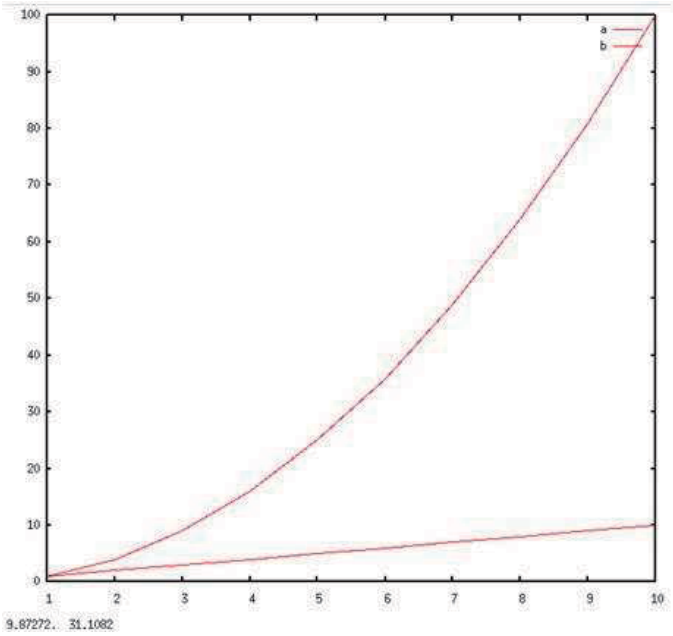


그림 2.10: GNUPLOT 실행

아래의 코드는 1차원 열방정식을 명시적 유한 차분법으로 푼 코드이다. 정의역은 두 개로 나누어 병렬 컴퓨팅을 하였다.

또한 Gather함수를 이용하여 데이터를 모은 후 heat1d.dat파일을 생성하게 하였다.

```
void free_dvector(double *v, long nl, long nh);
int main ( int argc, char *argv[] )
{
  int id, p, i,it, it_max, m = 10, s_tag,r_tag;
  double pi, T, dt,L=1.0, h, *gather,*buffer,*exact_u,
         *x,*xp, *u_old, *u_new, start,etime;

  MPI_Init ( &argc, &argv );
  start = MPI_Wtime();
  MPI_Comm_rank ( MPI_COMM_WORLD, &id );
  MPI_Comm_size ( MPI_COMM_WORLD, &p );

  pi=4.0*atan(1.0);
  dt = 0.001;
  T=0.5;
  it_max=(int)(T/dt);
  h=(double)L/(p*m-1.0);
  x      =dvector(1,m);
  xp     =dvector(1,p*m);
  u_old  =dvector(0,m+1);
  u_new  =dvector(0,m+1);
  buffer =dvector(0,m-1);
  gather =dvector(1,p*m);
  exact_u=dvector(1,p*m);
  for (i=1; i<=m; i++){
  x[i]=(double) 0+((i+m*id)-1)*h;
  }

  for (i=1; i<=p*m; i++){
```

```
   }
   else
   {
    for (i=2; i<=m; i++ ) {
   u_new[i] = u_old[i]+dt*(u_old[i-1]-2.0*u_old[i]
                          +u_old[i+1])/(h*h);}
   }

    for (i=1; i<=m; i++) {
      u_old[i] = u_new[i];}
  }

  for (i=1;i<=m;i++){
      buffer[i-1]=u_old[i];
  }

  MPI_Gather(buffer,m,MPI_DOUBLE,
              gather,m,MPI_DOUBLE,0,MPI_COMM_WORLD);

  etime = (MPI_Wtime() - start);
if (id==0) {
  FILE   *fpp;
  for (i=1;i<=p*m;i++){
  exact_u[i]=sin(pi*h*(i-1))*exp(-1*pow(pi,2)*T);
  }
fpp=fopen("heat1d.dat", "w");
/*파일 이름을 heat1d.dat이라고 합니다.*/
 for (i=1; i<=2*m; i++) {
    /*for문을 돌려 줍니다.*/
```

참고 문헌

[1] 이식, 이홍석, 김정한, 이승우, *MPI 병렬 프로그래밍*, Oxford 어드북스(한솜), 2010

[2] 김민장, *프로그래머가 몰랐던 멀티코어 CPU 이야기*, 2010, 한빛미디어

[3] Petersen W.P., Arbenz P, *An Introduction to Parallel Computing*, Oxford University Press, 2004

[4] Mattson Timonthy G., Sanders Veverly A., Massingill Berna L., *Patterns for Parallel Programming*, Addsison Wesley, 2005

[5] Gropp W., Lusk E., Skellum A. *Using MPI Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface* , 2/E, The MIT Press , 1999

[6] Pacheco P.S.,*Parallel Programming with MPI*,Morgan Kaufmann Publishers, 1997

[7] Quinn Micheal J., *Parallel Programming in C with MPI and OPENMP*, McGraw Hill , 2003