



**Современные технологии программирования
в научных исследованиях
Лабораторная работа 2**

1 Постановка задачи

Задача заключалась в оптимизации алгоритма нахождения максимального по модулю собственного числа заданной, вещественной, симметричной матрицы \mathbf{A} , при помощи метода прямых итераций. При этом, требовалось исследовать зависимость масштабируемости параллельной версии программы от ее вычислительной трудоемкости и проверить закон Амдала, изучив зависимости ускорения от числа потоков.

2 Описание тестового стенда

Вычисления проводились на выданном вычислительном узле, на котором доступно максимум 6 вычислительных потоков. Вычислительный узел:

- Операционная система: Ubuntu 20.04.4 LTS
- Процессор: Intel(R) Xeon(R) E-2136 CPU @ 3.30GHz, 6 ядер
- Доступная оперативная память: 62-63 ГБ
- Компилятор: gcc 10.2.0 (mpic++)

Время работы алгоритмов вычислялось при помощи команды `MPI_Wtime()`. Проводилось по три серии экспериментов, затем полученные значения времен усреднялись. Проверка правильности полученных значений осуществлялась сравнением с вычисленным последовательным методом.

3 Описание алгоритма решения задачи

Алгоритм прямых итераций, поиска максимального по модулю собственного числа матрицы \mathbf{A} заключается в итерационном применении следующей формулы: $v_{k+1} = \frac{Av_k}{\|Av_k\|}$, при которой последовательность векторов v_k сходится к собственному вектору, отвечающему максимальному по модулю собственному числу, а собственным числом является норма $\|Av_k\|$.

Так как итерации необходимо выполнять последовательно, то их нельзя запускать параллельно на разных потоках. Поэтому было принято решение реализовывать параллельное выполнение наиболее ресурсоёмкой операции - умножения матрицы на вектор. Реализовывалось параллельное матрично-векторное умножение при помощи технологии передачи информации между потоками MPI и языка C++. Были исследован способ реализации параллельного умножения матрицы на вектор, который представляет собой распараллеливание по строкам. То есть каждому потоку на выполнение передается часть строк для вычисления. Код функции представлен ниже.

```

1 void RowMatrixVectorMultiply(int dim, double* matrix_data, double* vector_data, double*
  result) {
2     // Initialize variables and get size of communicator
3     int rank, size;
4     MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
5     MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
6     // Initialize local matrix and vector
7     double* localresult = new double[dim / size]{};
8     double* matrix = new double[dim * dim / size]{};    //local matrix
9
10    MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
11    //Scatter the Matrix from master to slaves
12    MPI_Scatter(matrix_data, (dim * dim) / size, MPI_DOUBLE, matrix, (dim * dim) / size,
      MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
13    // Send same vector from master to slaves
14    MPI_Bcast(vector_data, dim, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD); // Broadcast the Vector
15
16    //Calculate the results
17    for (int i = 0; i < (dim / size); i++)
18        for (int j = 0; j < dim; j++)
19            localresult[i] += vector_data[j] * matrix[i * dim + j];
20    // Gather separately calculated parts together
21    MPI_Gather(localresult, (dim) / size, MPI_DOUBLE, result, (dim) / size, MPI_DOUBLE,
      0, MPI_COMM_WORLD); // Gather the results
22 }

```

4 Программный код

Полный код программы, используемый для решения задачи в разных условиях представлен в Приложении 1 в разделе 7.

5 Результаты измерений

На графиках приведена зависимость ускорения от параметров задачи. Ускорение считалось как $K(N) = \frac{t_1}{t_N}$, где t_1 - время затрачиваемое на работу алгоритма в последовательном режиме, t_N - время работы алгоритма, при использовании N потоков.

5.1 Изучение масштабируемости

Для изучения масштабируемости строились графики зависимости ускорения от размерности задачи (размерности матрицы (n)) для разных значений количества потоков, и отвечающих вычислению на предоставленном вычислительном узле. Графики приведены на Рисунках 1 - 4.

5.2 Проверка закона Амдала

Для проверки закона Амдала:

$$K(N) = \frac{N}{S * N + (1 - S)}$$

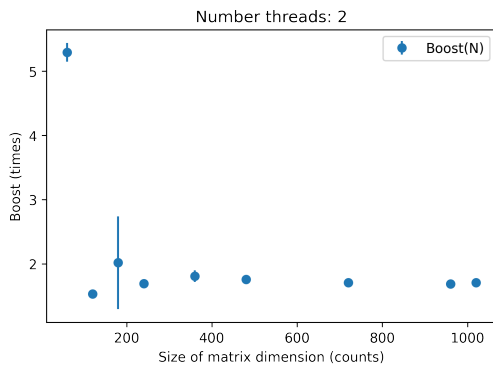


Рис. 1: 2 параллельных потока

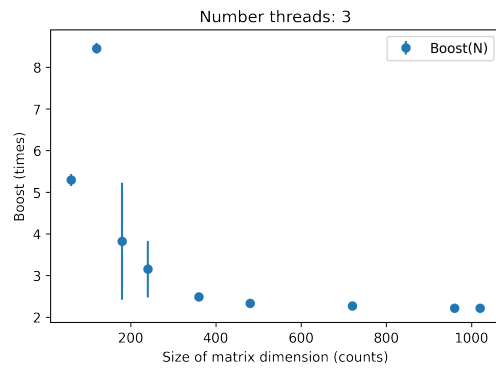


Рис. 2: 3 параллельных потоков

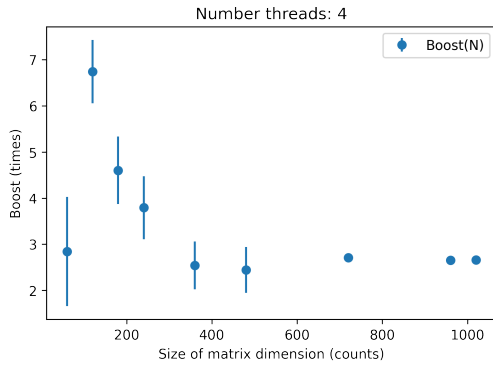


Рис. 3: 4 параллельных потоков

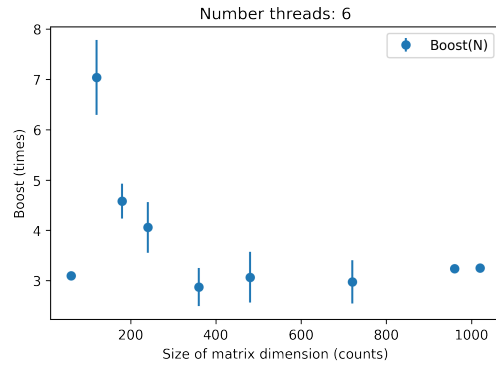


Рис. 4: 6 параллельных потоков

где, K - достигаемое ускорение, N - число потоков, S - доля последовательной части алгоритма, который описывает как должно расти максимально возможное ускорение с ростом числа потоков, исследовалась зависимость ускорения от числа потоков, при фиксированной размерности задачи. Полученные зависимости представлены на рисунках 5 - 8.

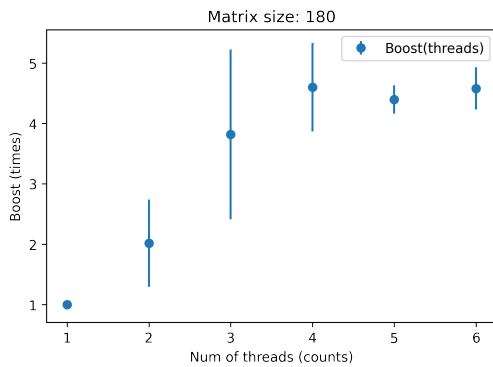


Рис. 5: Матрица размером в 180

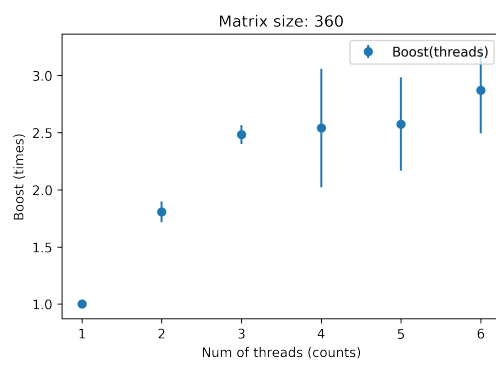


Рис. 6: Матрица размером в 360

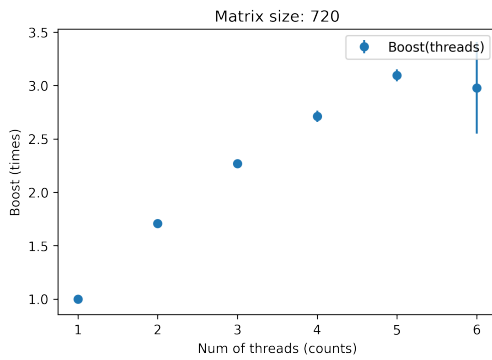


Рис. 7: Матрица размером в 720

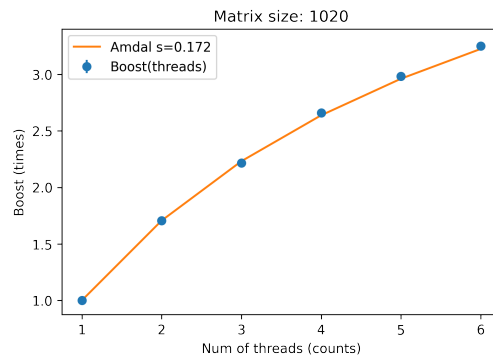


Рис. 8: Матрица размером в 1020

6 Обсуждение результатов и вывод

Были успешно проведены несколько серий экспериментов по оценке масштабируемости алгоритма прямых итераций. По рисункам 1 - 4 можно заметить, что в области матриц малой размерности (до линейного размера в 400) ускорение ведет себя хаотично, в силу того, исследуются матрицы совсем малого размера, где большой вклад вносят случайные факторы, но при увеличении размера матриц, ускорение становится постоянным. Для всех значений количества потоков зависимости имеют схожий характер.

На рисунках 5 - 8 зависимости ускорения от числа потоков, наблюдается рост ускорения при увеличении числа потоков, при этом, чем больше размер матрицы, тем меньше разброс результатов. На Рисунке 8 также приведен график закона Амдала с коэффициентом последовательной части алгоритма $S = 0.172$, который хорошо согласуется с полученной экспериментальной зависимостью.

Подводя итог, были изучены характеристики параллельного алгоритма вычисления максимального по модулю собственного числа матрицы, методом прямых итераций. Успешно проверен закон Амдала, показана его согласованность с экспериментальными данными и исследована масштабируемость параллельной программы.

7 Приложение 1. Код программы

```

1  #include <iostream>
2  #include <vector>
3  #include <cstdlib>
4  #include <cmath>
5  #include <fstream>
6  #include <iomanip>
7  #include "mpi.h"
8
9
10 using namespace std;
11
12 void matrixVectorMult(int dim, double* mat, double* vec, double* result);
13 void RowMatrixVectorMultiply(int dim, double* mat, double* vec, double* result);
14 void read_mat_from_file(const char* s, int n_row, int n_col, double* in_matrix);
15 void vectorNormalize(int dim, double* vec, const double vecNorm);

```

```

16 double vectorNorm(int dim, double* vec);
17
18 int main(int argc, char* argv[]) {
19     const int n = 1020;
20     int rank, size;
21     MPI_Init(&argc, &argv);
22     MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
23     MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
24
25     if (n % size) { //Valid Communicator Size?
26         MPI_Finalize();
27         return(0);
28     }
29
30     double tolerance = 1e-8; // Set acceptable tolerance of iterations
31     srand(static_cast<unsigned> (time(0)));
32     double A[n * n]; //matrix
33
34     // Read matrix from prepared file
35     if (rank == 0) {
36         //cout << "Reading matrix" << endl;
37         read_mat_from_file("matr.txt", n, n, (double*)A);
38         // Print matrix
39         /*
40         for (int i = 0; i < n; i++) {
41             for (int j = 0; j < n; j++) {
42                 cout << A[i][j] << " ";
43             }
44             cout << endl;
45         }
46         */
47         //cout << "Matrix read" << endl;
48     }
49
50     ////////////////////////////////////// iterations
51     //////////////////////////////////////
52     // Preparation
53     double eigVector[n] = { 0.0 }; // Main vector for iterations
54     for (int i = 0; i < n; i++) {
55         eigVector[i] = 1.0;
56     }
57     double residueVector[n] = { 0.0 };
58     double nextVector[n] = { 0.0 };
59
60     double residueValue, eigValue, start_time, total_time, referenceValue;
61
62     // Set initial values for eigvalue and eigvector
63     if (rank == 0) {
64         start_time = MPI_Wtime();
65         residueValue = 100.0;
66         eigValue = vectorNorm(n, eigVector);
67     }

```

```

68     }
69     vectorNormalize(n, eigVector, eigValue);
70     RowMatrixVectorMultiply(n, (double*)A, eigVector, nextVector);
71
72     // While residue: ||Av - lv||, is not less than tolerance, continue iterations
73     bool continueIterations = true;
74     while (continueIterations) {
75         if (rank == 0) {
76             for (int i = 0; i < n; i++) {
77                 eigVector[i] = nextVector[i];
78             }
79             eigValue = vectorNorm(n, eigVector);           // Dont forget to norm iterated
              vector
80             vectorNormalize(n, eigVector, eigValue);
81         }
82         else {
83             residueValue = 0.0;
84         }
85
86         RowMatrixVectorMultiply(n, (double*)A, eigVector, nextVector); // Next vector is
            matrix * current vector
87         if (rank == 0) {
88             // calculate residue vector
89             for (int i = 0; i < n; i++) {
90                 residueVector[i] = nextVector[i] - eigValue * eigVector[i];
91             }
92             // calculate residue value
93             residueValue = vectorNorm(n, residueVector);
94             continueIterations = (residueValue > tolerance);
95         }
96
97         // Send message to slaves if stop or not
98         if (rank == 0) {
99             // send for every slave process
100             for (int i = 0; i < size; i++) {
101                 if (i != rank) {
102                     MPI_Send(&continueIterations, 1, MPI_CXX_BOOL, i, 0, MPI_COMM_WORLD);
103                 }
104             }
105         }
106         else {
107             MPI_Recv(&continueIterations, 1, MPI_CXX_BOOL, 0, 0, MPI_COMM_WORLD,
                MPI_STATUS_IGNORE);
108         }
109     }
110     // Print time and results info
111     if (rank == 0) {
112         total_time = MPI_Wtime() - start_time;
113         cout << "MPI processes: " << size << " Value: " << eigValue << " Time
            taken : " << total_time << endl;
114     }
115
116
117

```

```

118     MPI_Finalize();
119     return 0;
120 }
121
122 // Classic (no MPI) multiplication
123 void matrixVectorMult(int dim, double* mat, double* vec, double* result) {
124     for (int i = 0; i < dim; i++) {
125         result[i] = 0.0;
126         for (int j = 0; j < dim; j++) {
127             result[i] += mat[i * dim + j] * vec[j];
128         }
129     }
130 }
131
132 // MPI matrix-vector multiplication
133 void RowMatrixVectorMultiply(int dim, double* matrix_data, double* vector_data, double*
134     result) {
135     // Initialize variables and get size of communicator
136     int rank, size;
137     MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
138     MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
139     // Initialize local matrix and vector
140     double* localresult = new double[dim / size]{};
141     double* matrix = new double[dim * dim / size]{};    //local matrix
142
143     MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
144     //Scatter the Matrix from master to slaves
145     MPI_Scatter(matrix_data, (dim * dim) / size, MPI_DOUBLE, matrix, (dim * dim) / size,
146         MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD);
147     // Send same vector from master to slaves
148     MPI_Bcast(vector_data, dim, MPI_DOUBLE, 0, MPI_COMM_WORLD); // Broadcast the Vector
149
150     //Calculate the results
151     for (int i = 0; i < (dim / size); i++)
152         for (int j = 0; j < dim; j++)
153             localresult[i] += vector_data[j] * matrix[i * dim + j];
154     // Gather separately calculated parts together
155     MPI_Gather(localresult, (dim) / size, MPI_DOUBLE, result, (dim) / size, MPI_DOUBLE,
156         0, MPI_COMM_WORLD); // Gather the results
157 }
158
159 // Read pre-generated matrix from file
160 void read_mat_from_file(const char* s, int n_row, int n_col, double* in_matrix) {
161     std::ifstream fin(s);
162     std::string line;
163     double data_in;
164
165     //open the input stream
166     if (!fin)
167     {
168         cout << "Unable to open " << s << " for reading.\n";
169         exit(0);
170     }

```

```

169
170 // cout << " for file: " << s << "\n" << endl;
171 for (int i = 0; i < n_row; i++) {
172     std::getline(fin, line);
173     std::stringstream stream(line);
174     for (int j = 0; j < n_col; j++) {
175         stream >> data_in; //now read the whitespace-separated floats
176         *(in_matrix + (i * n_col) + j) = data_in;
177     }
178 }
179 }
180
181 // L2 vector norm
182 double vectorNorm(int dim, double* vec) {
183     double res = 0.0;
184     for (int i = 0; i < dim; i++) {
185         res += vec[i] * vec[i];
186     }
187     return sqrt(res);
188 }
189
190 // Normalize vector to 1
191 void vectorNormalize(int dim, double* vec, const double vecNorm) {
192     for (int i = 0; i < dim; i++) {
193         vec[i] = vec[i] / vecNorm;
194     }
195 }

```

8 Приложение 2. Таблицы результатов для вычислений

n - размерность матрицы, Threads - число потоков, Time - время работы алгоритма (мс).

```

1 Max number of threads is 6
2
3 n = 60
4 Threads  Time_1    Time_2    Time_3
5 1         0.00102  0.00101  0.00104
6 2         0.00019  0.00020  0.00019
7 3         0.00019  0.00020  0.00019
8 4         0.00023  0.00028  0.00057
9 5         0.00047  0.00029  0.00045
10 6        0.00033  0.00034  0.00032
11
12 n = 120
13 Threads  Time_1    Time_2    Time_3
14 1         0.00328  0.00317  0.00319
15 2         0.00212  0.00210  0.00208
16 3         0.00038  0.00038  0.00038
17 4         0.00052  0.00050  0.00041
18 5         0.00045  0.00036  0.00047
19 6         0.00048  0.00050  0.00039
20
21 n = 180

```



```

22 Threads Time_1 Time_2 Time_3
23 1 0.00364 0.00393 0.00347
24 2 0.00091 0.00227 0.00229
25 3 0.00071 0.00146 0.00072
26 4 0.00088 0.00089 0.00063
27 5 0.00082 0.00085 0.00084
28 6 0.00086 0.00075 0.00080
29
30 n = 240
31 Threads Time_1 Time_2 Time_3
32 1 0.00439 0.00435 0.00453
33 2 0.00266 0.00257 0.00260
34 3 0.00183 0.00120 0.00118
35 4 0.00146 0.00105 0.00099
36 5 0.00095 0.00091 0.00092
37 6 0.00119 0.00118 0.00090
38
39 n = 360
40 Threads Time_1 Time_2 Time_3
41 1 0.00557 0.00572 0.00563
42 2 0.00291 0.00318 0.00327
43 3 0.00222 0.00237 0.00222
44 4 0.00286 0.00191 0.00189
45 5 0.00244 0.00243 0.00170
46 6 0.00213 0.00160 0.00216
47
48 n = 480
49 Threads Time_1 Time_2 Time_3
50 1 0.00921 0.00907 0.00931
51 2 0.00518 0.00523 0.00527
52 3 0.00395 0.00396 0.00394
53 4 0.00485 0.00322 0.00323
54 5 0.00297 0.00300 0.00295
55 6 0.00369 0.00265 0.00265
56
57 n = 720
58 Threads Time_1 Time_2 Time_3
59 1 0.01860 0.01807 0.01884
60 2 0.01063 0.01085 0.01101
61 3 0.00816 0.00815 0.00817
62 4 0.00683 0.00675 0.00689
63 5 0.00593 0.00599 0.00601
64 6 0.00560 0.00557 0.00747
65
66 n = 960
67 Threads Time_1 Time_2 Time_3
68 1 0.03318 0.03336 0.03344
69 2 0.01957 0.01980 0.01986
70 3 0.01514 0.01479 0.01515
71 4 0.01238 0.01278 0.01251
72 5 0.01117 0.01128 0.01097
73 6 0.01021 0.01026 0.01040
74
75 n = 1020

```

76	Threads	Time_1	Time_2	Time_3
77	1	0.03835	0.03853	0.03782
78	2	0.02250	0.02235	0.02236
79	3	0.01718	0.01738	0.01716
80	4	0.01447	0.01424	0.01439
81	5	0.01278	0.01282	0.01283
82	6	0.01176	0.01186	0.01165
