1 Описание

В качестве алгоритма для распараллеливания был выбран метод вращений для нахождения собственных значений симметричных матриц.

Для реализации параллелизма был выбран модуль mpi4py, который является оберткой над MPI — API для передачи сообщений между процессами, выполняющими одну задачу.

Есть два способа параллелить эту задачу: первый — распараллелить вспомогательные функции (нахождение максимального элемента матрицы, перемножение матриц, транспонирование матрицы), второй — разделить задачу на подзадачи, каждая из которых будет вычисляться независимо от другой. Мной был выбран второй способ.

Сначала опишем сам метод, потом использованные технологии распараллеливания (MPI), а затем рассмотрим получившуюся реализацию.

1 Метод

Суть метода заключается в том, чтобы для заданной симметрической матрицы $A = A^{(0)}$ построить последовательность ортогонально подобных матриц $A^{(1)}, A^{(2)}, \ldots, A^{(m)}$, сходящуюся к диагональной матрице, на диагонали которой стоят собственные значения A. Для построения этой последовательности применяется специально подобранная матрица вращения U, такая что норма наддиагональной части $||A^{(i)}|| = \sqrt{\sum_{1 \le j < k \le n} (a_{jk}^{(i)})^2}$ уменьшается при каждом двустороннем вращении матрицы $A^{(i+1)} = U_i^T A^{(i)} U_i$.

Это достигается выбором максимального по абсолютной величине элемента матрицы $A^{(i)}$ и его обнулением в матрице $A^{(i+1)}$. Если он расположен в j-й строке и k-м столбце, то

$$U_i = \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ j \\ \\ k \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & & & & \\ & & & \cos(\theta) & & -\sin(\theta) & & & & & \\ & & & & \ddots & & & & & & \\ & & & \sin(\theta) & & \cos(\theta) & & & & & \\ & & & & & & \ddots & & & & \\ & & & & & & & 1 & & & \\ & & & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & & & 1 & \end{bmatrix}$$

Если обозначить $s = \sin\theta$ и $c = \cos\theta$, то матрица $A^{(i+1)}$ состоит из следующих элементов, отличающихся от элементов $A^{(i)}$:

$$a_{jj}^{(i+1)} = c^2\, a_{jj}^{(i)} - 2\, sc\, a_{jk}^{(i)} + s^2\, a_{kk}^{(i)} \tag{1}$$
$$a_{kk}^{(i+1)} = s^2\, a_{jj}^{(i)} + 2sc\, a_{jk}^{(i)} + c^2\, a_{kk}^{(i)} \tag{2}$$
$$a_{jk}^{(i+1)} = a_{kj}^{(i+1)} = (c^2 - s^2)\, a_{jk}^{(i)} + sc\,(a_{kk}^{(i)} - a_{jj}^{(i)}) \tag{3}$$
$$a_{jm}^{(i+1)} = a_{mj}^{(i+1)} = c\, a_{jm}^{(i)} - s\, a_{km}^{(i)} \qquad m \neq j, k \tag{4}$$
$$a_{km}^{(i+1)} = a_{mk}^{(i+1)} = s\, a_{jm}^{(i)} + c\, a_{km}^{(i)} \qquad m \neq j, k \tag{5}$$
$$a_{ml}^{(i+1)} = a_{ml}^{(i)} \qquad m, l \neq j, k \tag{6}$$

Если $a_{jj}^{(i)} = a_{kk}^{(i)}$, то выбирается $\theta = \frac{\pi}{4}$, в противном случае вводится $t = \frac{s}{c} = \mathrm{tg}(\theta)$ и тогда $t^2 - 2t\tau + 1 = 0$. Решение квадратного уравнения даёт $t = \frac{\mathrm{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1+\tau^2}}, c = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}, s = tc.$

Вычисление останавливается, когда выполняются критерии близости к диагональной матрице. Это малость максимального по абсолютной величине внедиагонального элемента матрицы.

2 MPI

MPI расшифровывается как "Message passing interface"("Взаимодействие через передачу сообщений"). MPI предоставляет программисту единый механизм взаимодействия ветвей внутри параллельного приложения независимо от машинной архитектуры (однопроцессорные/многопроцессорные с общей/раздельной памятью), взаимного расположения ветвей (на одном процессоре/на разных) и API операционной системы.

Программа, использующая MPI, легче отлаживается (сужается простор для совершения стереотипных ошибок параллельного программирования) и быстрее переносится на другие платформы (в идеале, простой перекомпиляцией).

Параллельное приложение состоит из нескольких ветвей, или процессов, или задач, выполняющихся одновременно. Разные процессы могут выполняться как на разных процессорах, так и на одном и том же — для программы это роли не играет, поскольку в обоих случаях механизм обмена данными одинаков. Процессы обмениваются друг с другом данными в виде сообщений. Сообщения проходят под идентификаторами, которые позволяют программе и библиотеке связи отличать их друг от друга. Для совместного проведения тех или иных расчетов процессы внутри приложения объединяются в группы. Каждый процесс может узнать у библиотеки связи свой

номер внутри группы, и, в зависимости от номера приступает к выполнению соответствующей части расчетов.

Термин «процесс» используется также в Unix: в MPI ветвь запускается и работает как обычный процесс Unix, связанный через MPI с остальными процессами, входящими в приложение. В остальном процессы следует считать изолированными друг от друга: у них разные области кода, стека и данных, процессы имеют раздельную память.

3 Реализация

Как было сказано ранее, я попыталась разбить задачу на подзадачи и вычислять их отдельно друг от друга. Алгоритм реализован следующим образом: в нулевом процессе вычисляются значения матрицы поворота и аккумулируются данные из других процессов, оставшиеся процессы разбиваются на две группы (с четными и нечетными номерами), группа нечетных процессов считает строку j, а группа четных процессов – строку k. На каждой итерации изначально нулевой процесс считает значения косинуса и синуса для поворота, и отправляет другим процессам эти значения, индексы наибольшего элемента и соответствующие им строки. Все процессы, кроме нулевого, разбиваются на две группы. Группы разбивают j-ую и k-ую строки на блоки по количеству процессов в группе. Каждый процесс пересчитывает свой блок. После пересчета все блоки объединяются и получается новая строка, которая отправляется нулевому процессу. Нулевой процесс получает эти данные и помещает их в матрицу A. Каждая итерация заканчивается пересчетом параметра t, который считает нулевой процесс и рассылает по другим процессам.

2 Исходный код

```
import argparse
import json

from utils import save_to_file

from mpi4py import MPI
import numpy as np


def read_data(filename, need_args):
    init_dict = {}
    with open(filename, 'r') as json_data:
        data = json.load(json_data)[0] # !

        for arg in need_args:
            if arg not in data:
                raise ValueError('No "{0}" in given data'.format(arg))

            if arg == 'matrix':
                init_dict[arg] = np.array(data[arg], dtype=np.float64)
            else:
                init_dict[arg] = data[arg]

    return init_dict


def sign(n):
    return 1 if n > 0 else -1


def t(A):
    return np.sqrt(sum([A[i, j] ** 2 for i in range(A.shape[0])
        for j in range(i + 1, A.shape[0])]))


def indexes_max_elem(A):
    i_max = j_max = 0
    a_max = A[0, 0]
    for i in range(A.shape[0]):
        for j in range(i + 1, A.shape[0]):
            if abs(A[i, j]) > a_max:
                a_max = abs(A[i, j])
                i_max, j_max = i, j
    return i_max, j_max


def parallel_jacobi_rotate(comm, A, ind_j, ind_k):
```

```
48      sz = A.shape[0]
49      rank = comm.Get_rank()
50      pool_size = comm.Get_size()
51      c = s = 0.0
52      j = k = 0
53      row_j, row_k = np.zeros(sz), np.zeros(sz)
54      if rank == 0:
55          j, k = ind_j, ind_k
56
57          if A[j, j] == A[k, k]:
58              c = np.cos(np.pi / 4)
59              s = np.sin(np.pi / 4)
60          else:
61              tau = (A[j, j] - A[k, k]) / (2 * A[j, k])
62              t = sign(tau) / (abs(tau) + np.sqrt(1 + tau ** 2))
63              c = 1 / np.sqrt(1 + t ** 2)
64              s = c * t
65
66          for i in range(sz):
67              row_j[i] = A[j, i]
68              row_k[i] = A[k, i]
69
70      j = comm.bcast(j, root=0)
71      k = comm.bcast(k, root=0)
72      c = comm.bcast(c, root=0)
73      s = comm.bcast(s, root=0)
74      comm.Bcast(row_j, root=0)
75      comm.Bcast(row_k, root=0)
76
77      row_j_comm = comm.Create_group(comm.group.Incl([i for i in range(1, pool_size) if i
            % 2 == 1]))
78      row_k_comm = comm.Create_group(comm.group.Incl([i for i in range(1, pool_size) if i
            % 2 == 0]))
79
80      row_j_rank = row_j_size = -1
81      row_j_new = np.zeros(sz)
82      if MPI.COMM_NULL != row_j_comm:
83          row_j_rank = row_j_comm.Get_rank()
84          row_j_size = row_j_comm.Get_size()
85          size = int(sz / row_j_size)
86          row_j_part = np.zeros(size)
87          row_k_part = np.zeros(size)
88          row_j_new_part = np.zeros(size)
89
90          row_j_comm.Scatter(row_j, row_j_part, root=0)
91          row_j_comm.Scatter(row_k, row_k_part, root=0)
92
93          for i in range(size):
94              row_j_new_part[i] = c * row_j_part[i] + s * row_k_part[i]
```

```
95
96          row_j_comm.Gather(row_j_new_part, row_j_new, root=0)
97          if row_j_rank == 0:
98              comm.Send([row_j_new, sz, MPI.FLOAT], dest=0, tag=0)
99          row_j_comm.Free()
100
101     row_k_rank = row_k_size = -1
102     row_k_new = np.zeros(sz)
103     if MPI.COMM_NULL != row_k_comm:
104         row_k_rank = row_k_comm.Get_rank()
105         row_k_size = row_k_comm.Get_size()
106         size = int(sz / row_k_size)
107         row_j_part = np.zeros(size)
108         row_k_part = np.zeros(size)
109         row_k_new_part = np.zeros(size)
110
111         row_k_comm.Scatter(row_j, row_j_part, root=0)
112         row_k_comm.Scatter(row_k, row_k_part, root=0)
113
114         for i in range(size):
115             row_k_new_part[i] = s * row_j_part[i] - c * row_k_part[i]
116
117         row_k_comm.Gather(row_k_new_part, row_k_new, root=0)
118         if row_k_rank == 0:
119             comm.Send([row_k_new, sz, MPI.FLOAT], dest=0, tag=0)
120         row_k_comm.Free()
121
122     if rank == 0:
123         status = MPI.Status()
124         comm.Recv([row_j_new, sz, MPI.FLOAT], source=1, tag=0, status=status)
125         comm.Recv([row_k_new, sz, MPI.FLOAT], source=2, tag=0, status=status)
126
127         A[j, k] = A[k, j] = (c ** 2 - s ** 2) * row_j[k] + s * c * (row_k[k] - row_j[j
                ])
128         A[j, j] = c ** 2 * row_j[j] + 2 * s * c * row_j[k] + s ** 2 * row_k[k]
129         A[k, k] = s ** 2 * row_j[j] - 2 * s * c * row_j[k] + c ** 2 * row_k[k]
130
131
132         for i in range(sz):
133             if i != j and i != k:
134                 A[j, i] = A[i, j] = row_j_new[i]
135                 A[k, i] = A[i, k] = row_k_new[i]
136
137     return A
138
139
140 def jacobi_parallel(comm, A, eps):
141     elapsed_time = 0
142     i, j = indexes_max_elem(A)
```

```
143     norm = t(A)
144     rank = comm.Get_rank()
145     eps = comm.bcast(eps, root=0)
146     norm = comm.bcast(norm, root=0)
147 
148     k = 1
149     while norm > eps:
150         elapsed_time -= MPI.Wtime()
151         A = parallel_jacobi_rotate(comm, A, j, i)
152         if rank == 0:
153             norm = t(A)
154         elapsed_time += MPI.Wtime()
155         norm = comm.bcast(norm, root=0)
156         i, j = indexes_max_elem(A)
157         k += 1
158 
159     return np.diag(A).tolist()
160 
161 
162 if __name__ == "__main__":
163     parser = argparse.ArgumentParser()
164     parser.add_argument('--input', required=True, help='Input file')
165     parser.add_argument('--output', required=True, help='Output file')
166     args = parser.parse_args()
167 
168     elapsed_time = 0
169     need_args = ('matrix', 'eps')
170     init_dict = read_data(args.input, need_args)
171     A, eps = init_dict['matrix'], init_dict['eps']
172 
173     comm = MPI.COMM_WORLD
174     rank = comm.Get_rank()
175 
176     elapsed_time -= MPI.Wtime()
177     eig = jacobi_parallel(comm, A, eps)
178     elapsed_time += MPI.Wtime()
179 
180     if rank == 0:
181         save_to_file(args.output, eigenvalues=eig)
182         print("Dimension {0}, time elapsed {1}\n".format(A.shape[0], elapsed_time))
183 
184     MPI.Finalize()
```

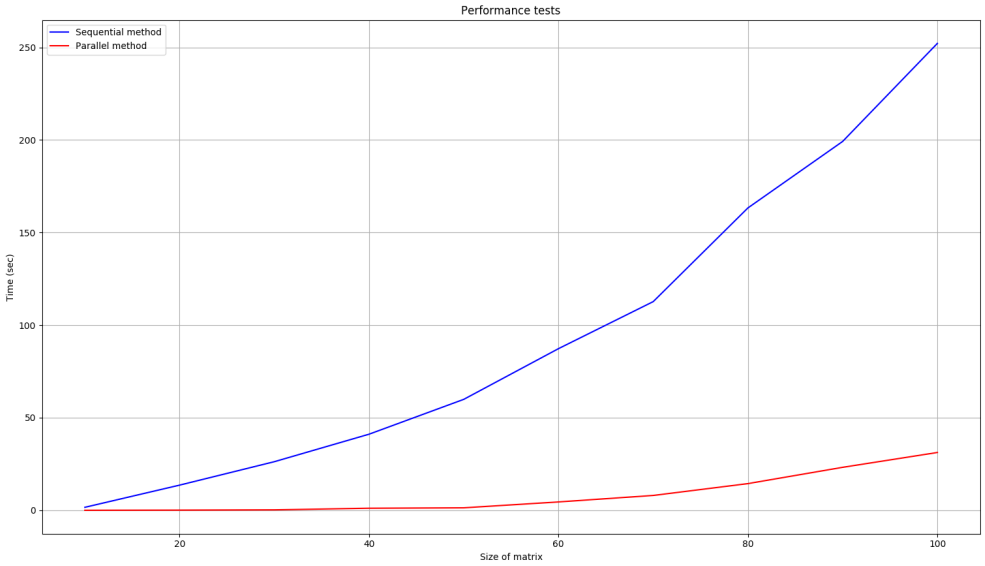
3 Тест производительности

Для бенчмарка было выбрано два кейса: тесты производительности и тесты с разным количеством процессов.

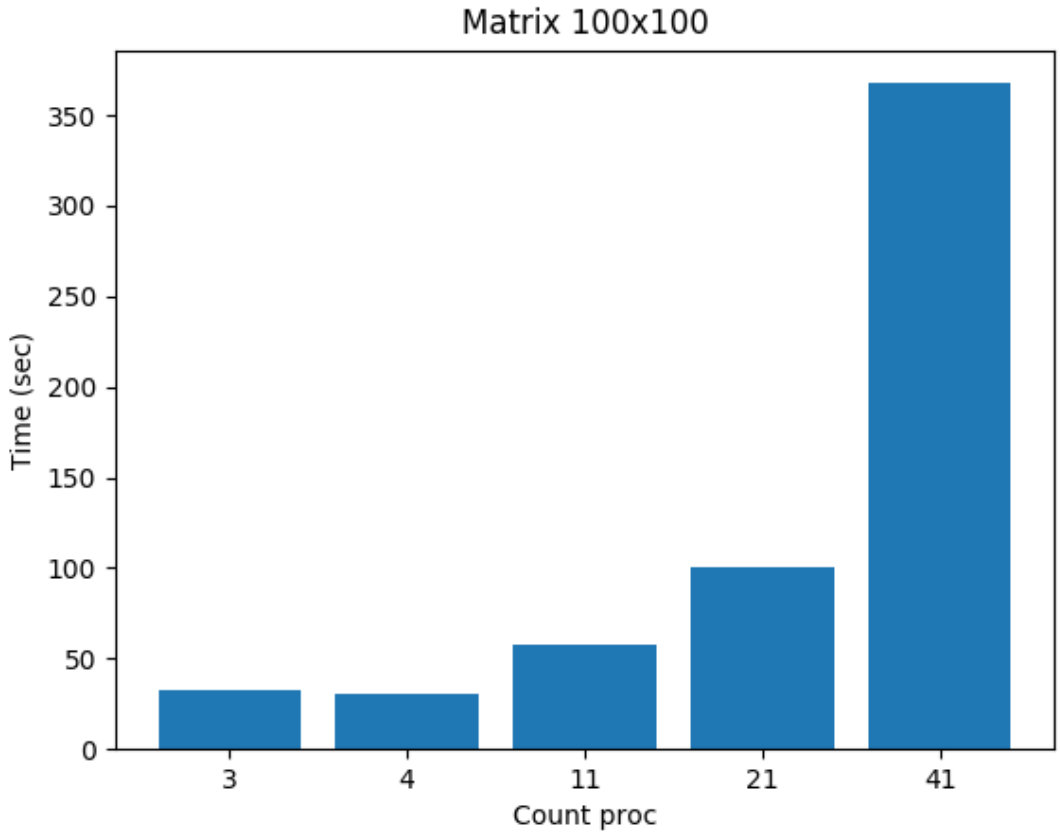
Тесты производительности представляют собой 10 матриц размерами от 10 до 100 с шагом 10, все заначения матриц лежат в отрезке $[-2000, 2000]$. Сначала тесты были запущены на однопоточной версии программы, а затем на многопроцессорной.

Тесты с разным количеством процессов представляют собой один тестовый файл с матрицой размерами 10 на 10, для которой вычисление собственных значений запускается на 3, 4, 11, 21 и 41 процессах.

Полученные результаты отражены на графиках.



Как видно, распараллеливание сильно ускорило работу программы. Но также стоит отметить, что однопоточная версия была написана на чистом Python, без использования numpy, тогда как многопроцессорная версия использует обертку над MPI, который реализован на Fortran и C, языках которые значительно превосходят Python по скорости вычислений.



Количество процессов напрямую влияет на скорость работы распараллеленного алгоритма. При 4 процессах время имеет наименьшее значение. Это связано с тем, что на моей машине 4 ядра, то есть в один момент времени могут выполняться максимум 4 процесса. С ростом количества процессов растет и время, потому что, во-первых, тратится время на переключение контекста между процессами, во-вторых, процессы дольше разбивают данные на блоки и синхронизируют полученные результаты.

4 Выводы

Метод Якоби является самым медленным из имеющихся алгоритмов вычисления собственных значений симметричной матрицы. Кроме того, он не детерминирован, так как является итерационным алгоритмом с выходом по точности: число итераций зависит от входных данных и значения точности. Метод Якоби практически не применяется в библиотеках для параллельных вычислительных систем.
Недостаток моей реализации в том, что количество процессов – подбираемый параметр, зависящий от размера матрицы. Так как создаются две группы процессов, которые пересчитывают строки, длина строки должна делиться на количество процессов (n) в одной группе, потому что строка будет разбита на n равных блоков.
В этом курсовом проекте я познакомилась с технологией распараллеливания MPI, с которой мне придется работать на 4 курсе. Хорошо, что я ее «потрогала» уже сейчас.

Список литературы

[1] *Методические материалы, Раздел 1. Численные методы линейной алгебры.* URL: `https://mainfodotru.files.wordpress.com/2017/09/numeric-methods-part1.pdf` (дата обращения: 05.06.2019).

[2] *Классический метод Якоби (вращений) для симметричных матриц с выбором по всей матрице — AlgoWiki.* URL: `https://algowiki-project.org/ru/Классический_метод_Якоби_(вращений)_для_симметричных_матриц_с_выбором_по_всей_матрице` (дата обращения: 07.06.2019).