

南昌大学超算俱乐部考核题（Python）的实验报告

FROM 回归天空
QQ: 903928770
微信: night-helianthus

考核要求:

▼ 超算选拔考核题

在本考核中，您需要在虚拟机环境中完成以下任务，任务涉及安装操作系统、配置并行计算环境、实现并优化 Python 并行任务，并撰写实验报告。

▼ 任务要求

1. 安装虚拟机:

- 在虚拟机中安装 Ubuntu 22.04 LTS 操作系统。
- 配置虚拟机的网络连接，确保可以正常联网。

2. 安装 Python 并配置 HPC 环境:

- 安装 Python 3.x。
- 安装并配置并行计算相关库（如 `mpi4py` 和 `multiprocessing`），确保环境能够支持并行。

3. 实现并行计算任务：

- 使用 `mpi4py` 实现一个大规模矩阵的乘法。
- 使用 `multiprocessing` 实现多进

3. 实现并行计算任务：

- 使用 `mpi4py` 实现一个大规模矩阵的乘法。
- 使用 `multiprocessing` 实现多进程计算完成同样的任务，对比其与 `mpi4py` 的性能差异。
- 确保程序可以处理至少 10,000 x 10,000 的矩阵运算。

4. 优化与加速：

- 优化 Python 代码，使用不同的并行策略提高计算效率。
- 测试不同进程数对任务执行时间的影响，记录不同并行度下的性能表现。
- 结合 NumPy 或 SciPy 等高效库，进一步提升计算速度。

5. 性能测试与对比：

- 对比 `mpi4py` 和 `multiprocessing` 在不同数据规模和并行度下的性能表现。
- 分别测试在不同规模下的执行时间，收集每种方案的资源使用情况（如 CPU 使用率和内存占用）。

6. 数据记录与可视化：

- 收集不同并行策略和并行度的运行结果和性能数据。
- 将数据记录到 CSV 文件中。
- 使用 Python 绘制矢量图，展示不同并行策略在不同任务规模下的性能差异。

7. 报告撰写：

- 撰写一份详细报告，内容应包括：
 - 实验环境的搭建过程（虚拟机安装、环境配置等）。
 - 不同并行策略的性能对比及其对大规模矩阵运算的加速效果。
 - 优化方案及其带来的性能提升。
 - 数据可视化部分（附图表）。
 - 实验过程中遇到的问题及解决方案。

- 报告必须采用 LaTeX 或 Markdown 格式撰写。

▼ 提交要求

- 将完整的实验报告和源代码上传至个人 GitHub 仓库。
- 提交报告的 PDF 文件及仓库链接。

实验完成部分可以使用 AI 工具，但是报告书写部分请亲自完成！

一.环境搭建

1.配置虚拟机：在虚拟机中安装 Ubuntu 22.04 LTS 操作系统。

使用VMware Workstation，首先在镜像站（如清华源）中下载ubuntu镜像文件，根据安装指南完成vm安装，创建ubuntu64位虚拟机，由于要进行多进程测试，将处理器部分的处理器数量设置为4，每个处理器内核数为4，网络设置为最方便使用的NAT模式，安装ubuntu系统，在Software&updates中换源（如阿里云），完成基本配置。

2.安装IDE: pycharm

第一种最容易理解的办法是到类似应用商店的 ubuntu software 中下载，只需搜索+点击下载即可。首先确保更新，然后搜索pycharm community edition，终端更新指令如下。

```
sudo apt update
```

第二种则是通过snap包管理器，终端进行安装

```
sudo apt update  
sudo apt install snapd  
sudo snap install pycharm-communiy --classic
```

完成后终端输入来启动并检查pycharm的安装

```
pycharm-community
```

如果想要更新pycharm,终端指令如下

```
sudo snap refresh pycharm-community
```

3.pycharm虚拟环境中必要的环境配置

pip包管理器安装 创建一个新项目后，打开终端，进行pip包管理器安装

```
sudo apt update  
sudo apt install python3-pip
```

安装必要的库 打开项目终端，输入安装指令(这里只以numpy为例)

```
pip install numpy
```

安装MPI 终端安装mpich

```
sudo apt-get update  
sudo apt-get install mpich
```

检查是否安装mpich

```
mpicc -v
```

再安装mpi4py库

```
pip install mpi4py
```

4.git的环境搭建

github与git的配置，登录github，配置Ubuntu的.ssh文件，将公钥上传github，方便后期git上传与拉取 终端命令生成ssh对：

```
ssh-keygen -t rsa -b 4096 -C "邮箱地址"
```

配置完ssh后测试与github的连接情况

```
ssh -T git@github.com
```

生成项目并克隆仓库到本地

```
cd ~/PycharmProjects/pythonProject
git clone git@github.com:SXP-Simon/the-repo-for-NCUSCC.git
```

若要实现ubuntu无障碍连接到www.github.com,推荐使用金钱方面无痛但是需要配置一点证书的watt tooltik。至此，已经基本搭建测试所需要的环境了。

二.考核部分的multiprocessing与mpi4py的比较

在此声明，我的本次实验中选择的矩阵乘法计算方法为最原始的手撕矩阵方法，使用for循环的嵌套，时间复杂度为 $O(n^3)$,至于原因我在后文实验过程中遇到的问题部分会做出回答。由于时间复杂度过大，我选择采取numba的njit装饰器对python语法进行c类语言转译加速，将尽量进行控制变量比较。分析部分不会将比较两者的柱状图呈现，只比较不同规模的进程数效果。多方案比较将在分析部分后呈现。

1.multiprocessing库的分析

multiprocessing中使用简洁的语法来调用多核编程方法，简化了实现多进程编程的复杂性，适合单机玩家享受。这里我选择比较有效的进程池方法与异步方法来进行并行计算，采用with方法来自动管理资源。

```
import numpy as np
from multiprocessing import Pool
import time
from numba import njit

@njit
def matrix_multiply(A_block, B_block):
    # 初始化结果矩阵块
    result_block = np.zeros((A_block.shape[0], B_block.shape[1]))
    # 使用基本的矩阵乘法实现
    for i in range(A_block.shape[0]):
        for j in range(B_block.shape[1]):
            for k in range(A_block.shape[1]):
```

```

        result_block[i, j] += A_block[i, k] * B_block[k, j]
    return result_block
@jit()
def split_matrix(A, B, num_splits):
    # 计算每个子块的大小
    split_size_A = A.shape[0] // num_splits
    split_size_B = B.shape[1] // num_splits
    # 分割矩阵 A 和 B
    A_splits = [A[i*split_size_A:(i+1)*split_size_A] for i in range(num_splits)]
    B_splits = [B[:, i*split_size_B:(i+1)*split_size_B] for i in
range(num_splits)]
    return A_splits, B_splits

def parallel_matrix_multiply(A, B, num_splits):
    A_splits, B_splits = split_matrix(A, B, num_splits)

    # 创建进程池
    with Pool(processes=num_splits) as pool:
        # 使用 starmap 进行并行计算
        results = pool.starmap(matrix_multiply, [(A_splits[i], B_splits[j]) for i
in range(num_splits) for j in range(num_splits)])

    # 初始化结果矩阵
    final_result = np.zeros((A.shape[0], B.shape[1]))

    # 将子块结果合并到最终结果矩阵中
    split_size_A = A.shape[0] // num_splits
    split_size_B = B.shape[1] // num_splits
    for idx, (i, j) in enumerate([(i, j) for i in range(num_splits) for j in
range(num_splits)]):
        final_result[i*split_size_A:(i+1)*split_size_A, j*split_size_B:
(j+1)*split_size_B] = results[idx]

    return final_result

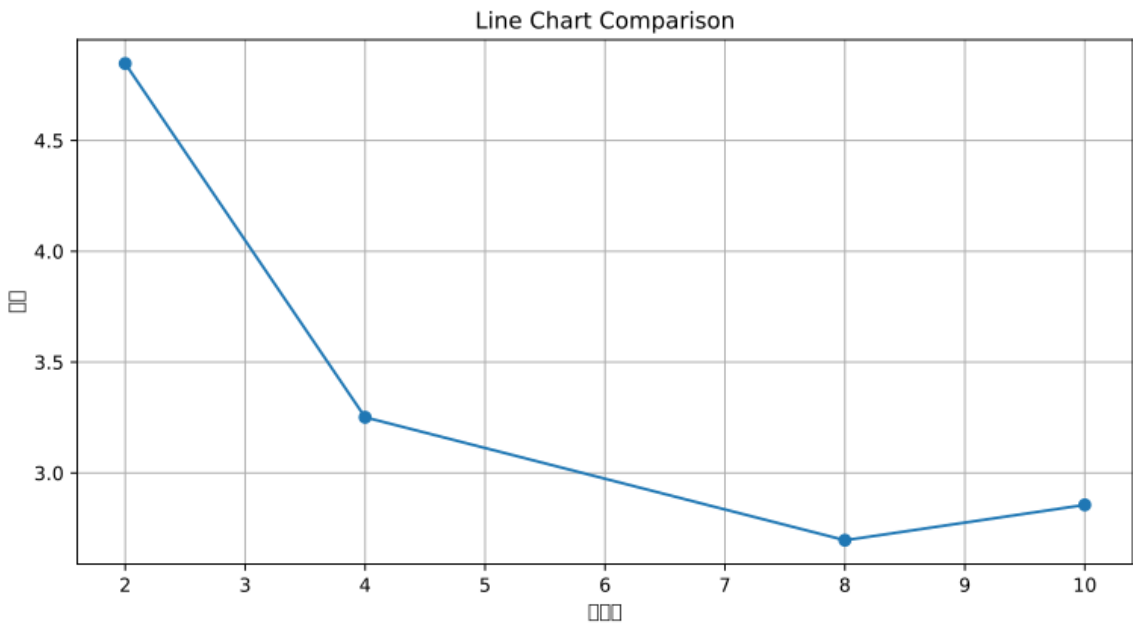
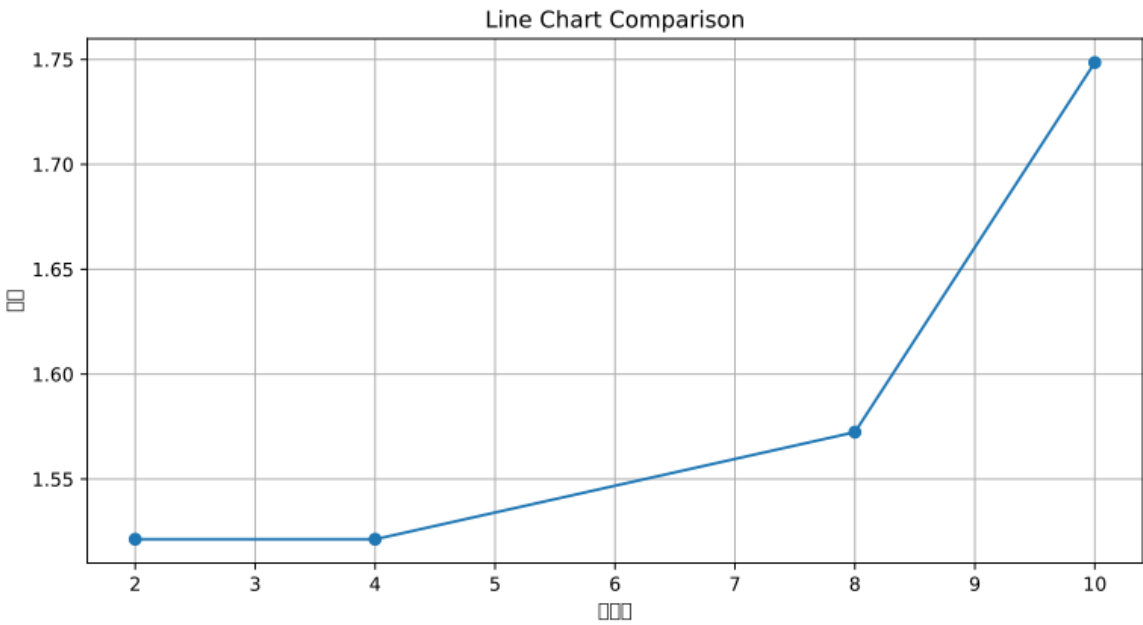
if __name__ == "__main__":
    n = 10000
    #矩阵大小声明
    A = np.random.rand(n, n)
    B = np.random.rand(n, n)
    num_splits = 8
    #进程数声明

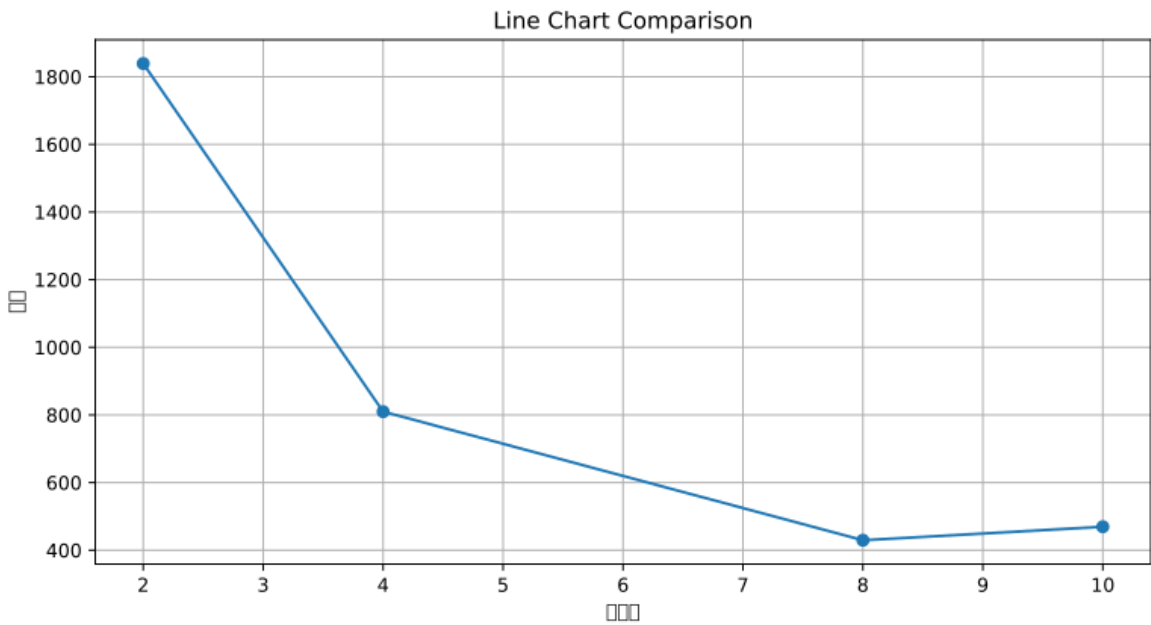
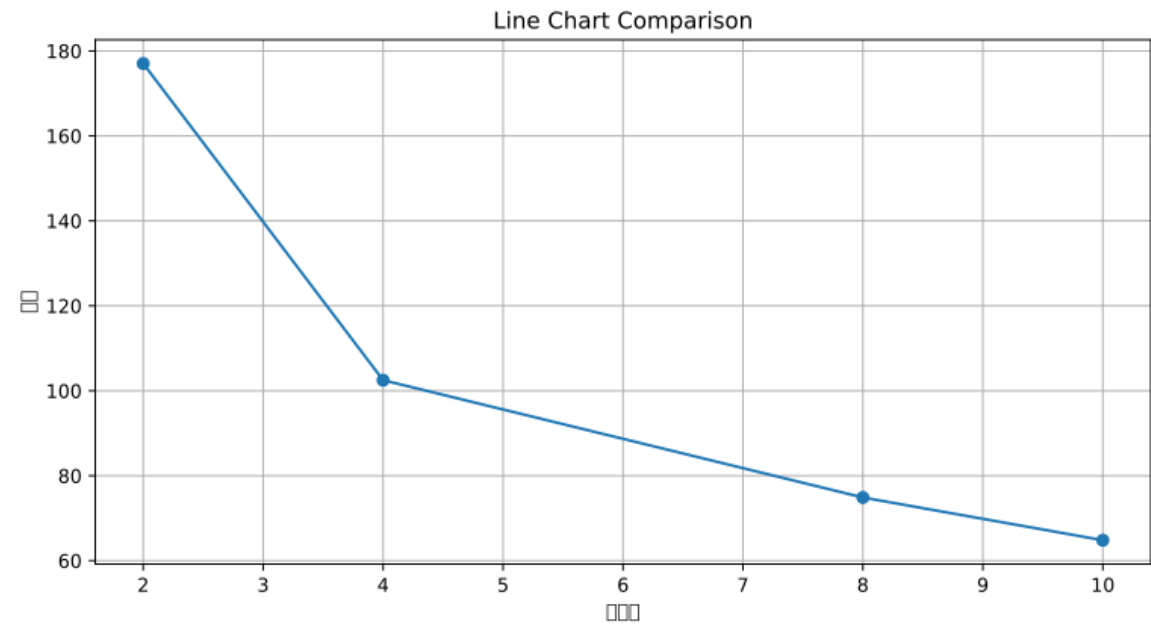
    starttime = time.time()
    result = parallel_matrix_multiply(A, B, num_splits)
    print("Time taken for parallel matrix multiply with numba:", time.time() -
starttime)

    print(result.shape)
    #验证矩阵形状
    np.testing.assert_allclose(result, np.dot(A, B))
    #验证计算结果

```


multiprocessing结果 (出了点小问题但是没有修改, 下面图的横轴为进程数, 纵轴为时间 (s), 依次为 1000, 2000, 5000和10000规模的矩阵乘法)





经分析：
在数据规模较小时，并行引起的资源开销占主导地位，进程越多，时间越长，并行效率越低。
在数据规模较大时，并行运算带来的加速效果明显，总体上进程越多，时间缩短，效率提高。

2.mpi4py库分析

mpi4py是一个在python中实现MPI标准的库，提供面向对象接口使得python程序可以利用多处理器进行并行运算，但是比较适合联机玩家（多机跨节点，服务器层面），单机玩家使用时优势不明显。我在实验过程中使用了进程间集体通信和 非阻塞通信等方法进行了测试。

```
import numpy as np
from mpi4py import MPI
```

```

import time
from numba import njit

@njit()
def matrix_multiply(A_block, B_block):
    # 初始化结果矩阵块
    result_block = np.zeros((A_block.shape[0], B_block.shape[1]))
    # 使用基本的矩阵乘法实现
    for i in range(A_block.shape[0]):
        for j in range(B_block.shape[1]):
            for k in range(A_block.shape[1]):
                result_block[i, j] += A_block[i, k] * B_block[k, j]
    return result_block

@njit()
def split_matrix(A, B, num_splits):
    # 计算每个子块的大小
    split_size_A = A.shape[0] // num_splits
    split_size_B = B.shape[1] // num_splits
    # 分割矩阵 A 和 B
    A_splits = [np.ascontiguousarray(A[i*split_size_A:(i+1)*split_size_A]) for i
in range(num_splits)]
    B_splits = [np.ascontiguousarray(B[:, i*split_size_B:(i+1)*split_size_B]) for
i in range(num_splits)]
    return A_splits, B_splits

def parallel_matrix_multiply(A, B, num_splits):
    comm = MPI.COMM_WORLD
    rank = comm.Get_rank()
    size = comm.Get_size()

    # 计算每个进程的块索引
    block_per_process = (num_splits * num_splits) // size
    start_block = rank * block_per_process
    end_block = (rank + 1) * block_per_process

    # 分割矩阵
    A_splits, B_splits = split_matrix(A, B, num_splits)

    # 初始化结果矩阵
    final_result = np.zeros((A.shape[0], B.shape[1]))

    # 每个进程计算自己的块
    requests = []
    for block_idx in range(start_block, end_block):
        i = block_idx // num_splits
        j = block_idx % num_splits
        result_block = matrix_multiply(A_splits[i], B_splits[j])

        # 使用非阻塞发送将结果发送给根进程
        req = comm.Isend(result_block, dest=0, tag=block_idx)
        requests.append(req)

    # 根进程收集所有结果
    if rank == 0:

```

```

split_size_A = A.shape[0] // num_splits
split_size_B = B.shape[1] // num_splits
for block_idx in range(num_splits * num_splits):
    i = block_idx // num_splits
    j = block_idx % num_splits
    result_block = np.zeros((split_size_A, split_size_B))
    req = comm.Irecv(result_block, source=MPI.ANY_SOURCE, tag=block_idx)
    req.Wait()
    final_result[i*split_size_A:(i+1)*split_size_A, j*split_size_B:
(j+1)*split_size_B] = result_block

# 等待所有非阻塞发送完成
MPI.Request.Waitall(requests)

return final_result

if __name__ == "__main__":
    n = 10000
    A = np.random.rand(n, n)
    B = np.random.rand(n, n)
    num_splits = 10

    comm = MPI.COMM_WORLD
    rank = comm.Get_rank()

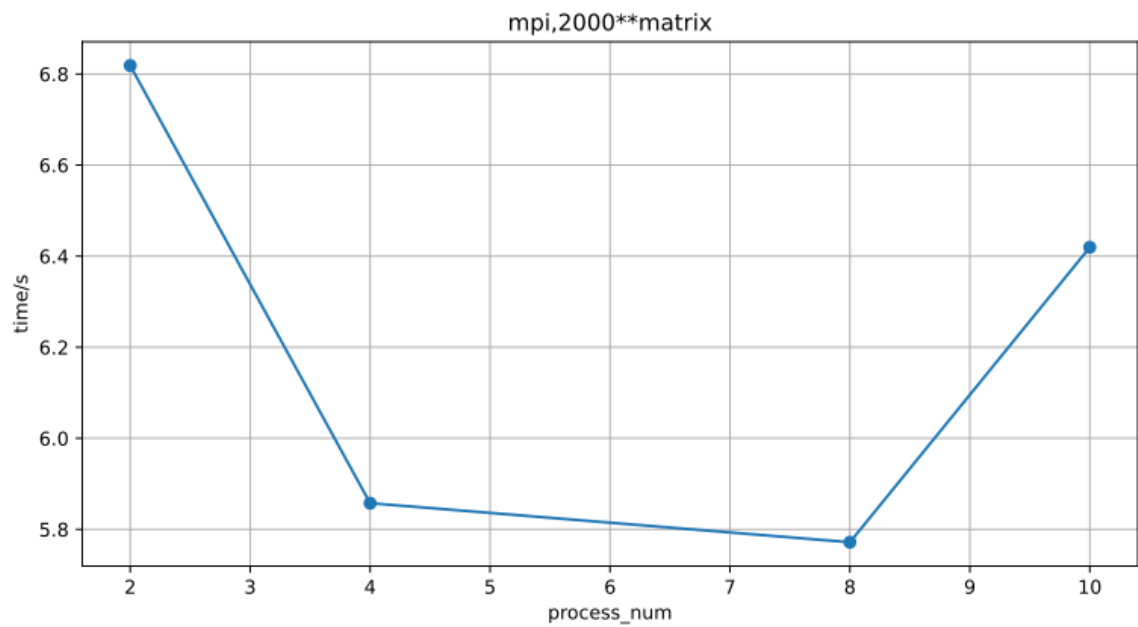
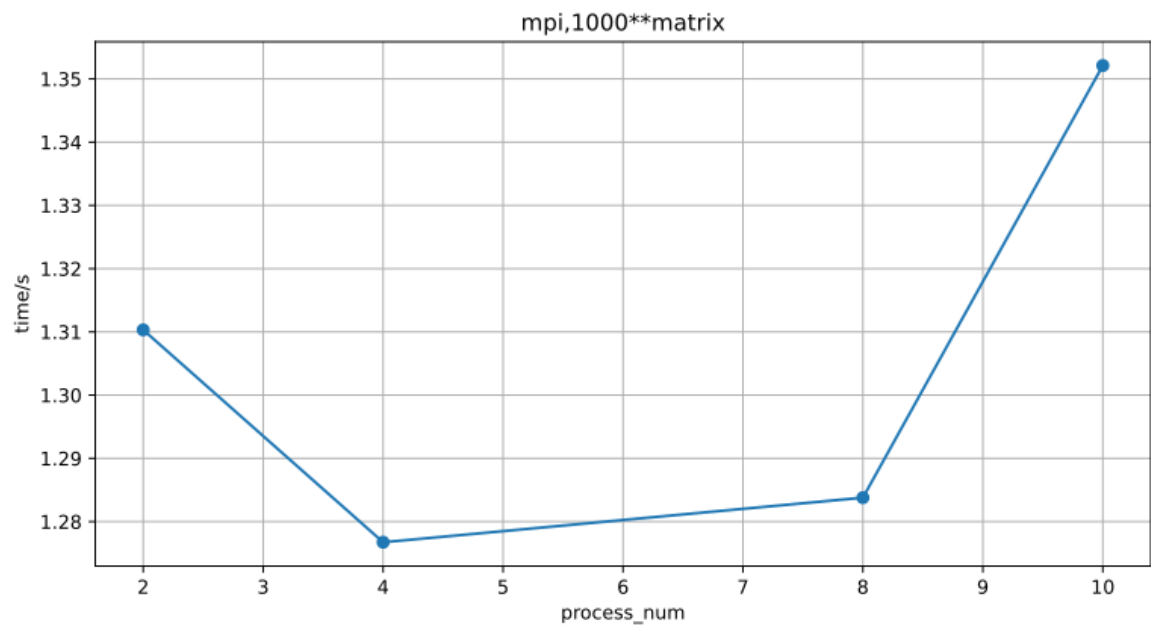
    if rank == 0:
        starttime = time.time()
        result = parallel_matrix_multiply(A, B, num_splits)
        print("Time taken for parallel matrix multiply with MPI (non-blocking):",
time.time() - starttime)

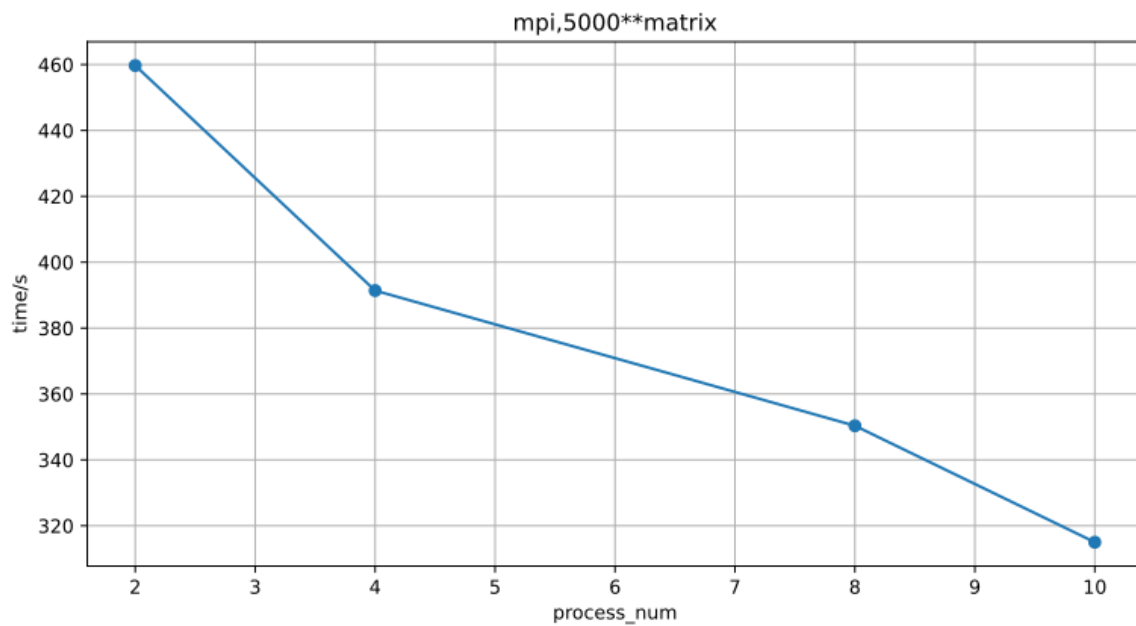
        starttime = time.time()
        np.dot(A, B)
        print("Time taken for numpy dot product:", time.time() - starttime)

        print(result.shape)
        np.testing.assert_allclose(result, np.dot(A, B))

```

mpi4py结果（由于10000规模时mpi方法时间太长，不方便计量，所以没有成功收集，10进程下mpi方法时间超过了1800s,2进程下超过了5400s,效果较差。）





经分析：

在数据规模较小时，并行引起的资源开销占主导地位，进程越多，时间越长，并行效率越低。

在数据规模较大时，并行运算带来的加速效果明显，总体上进程越多，时间缩短，效率提高。

拓展一个多进程库: joblib

joblib是一个基于multiprocessing库的并行实现，特别优化了在数组处理和磁盘缓存发方面，语法简洁，容易上手。在服务启动后，第一次运行可能会比后续运行多耗时一些，因为需要分配进程。但一旦初始化完成，后续的并行计算将更加高效。

安装joblib

```
pip install joblib
```

joblib并行框架例子

```
import numpy as np
from joblib import Parallel, delayed
import time
from numba import njit

@njit()
def matrix_multiply(A_block, B_block):
    # 初始化结果矩阵块
    result_block = np.zeros((A_block.shape[0], B_block.shape[1]))
    # 使用基本的矩阵乘法实现
    for i in range(A_block.shape[0]):
```

```

        for j in range(B_block.shape[1]):
            for k in range(A_block.shape[1]):
                result_block[i, j] += A_block[i, k] * B_block[k, j]
    return result_block

@njit()
def split_matrix(A, B, num_splits):
    # 计算每个子块的大小
    split_size_A = A.shape[0] // num_splits
    split_size_B = B.shape[1] // num_splits
    # 分割矩阵 A 和 B
    A_splits = [np.ascontiguousarray(A[i*split_size_A:(i+1)*split_size_A]) for i
in range(num_splits)]
    B_splits = [np.ascontiguousarray(B[:, i*split_size_B:(i+1)*split_size_B]) for
i in range(num_splits)]
    return A_splits, B_splits

def parallel_matrix_multiply(A, B, num_splits):
    A_splits, B_splits = split_matrix(A, B, num_splits)

    # 使用 joblib 进行并行计算
    results = Parallel(n_jobs=num_splits)(
        delayed(matrix_multiply)(A_splits[i], B_splits[j])
        for i in range(num_splits)
        for j in range(num_splits)
    )

    # 初始化结果矩阵
    final_result = np.zeros((A.shape[0], B.shape[1]))

    # 将子块结果合并到最终结果矩阵中
    split_size_A = A.shape[0] // num_splits
    split_size_B = B.shape[1] // num_splits
    for idx, (i, j) in enumerate([(i, j) for i in range(num_splits) for j in
range(num_splits)]):
        final_result[i*split_size_A:(i+1)*split_size_A, j*split_size_B:
(j+1)*split_size_B] = results[idx]

    return final_result

if __name__ == "__main__":
    n = 2000
    A = np.random.rand(n, n)
    B = np.random.rand(n, n)
    num_splits = 8

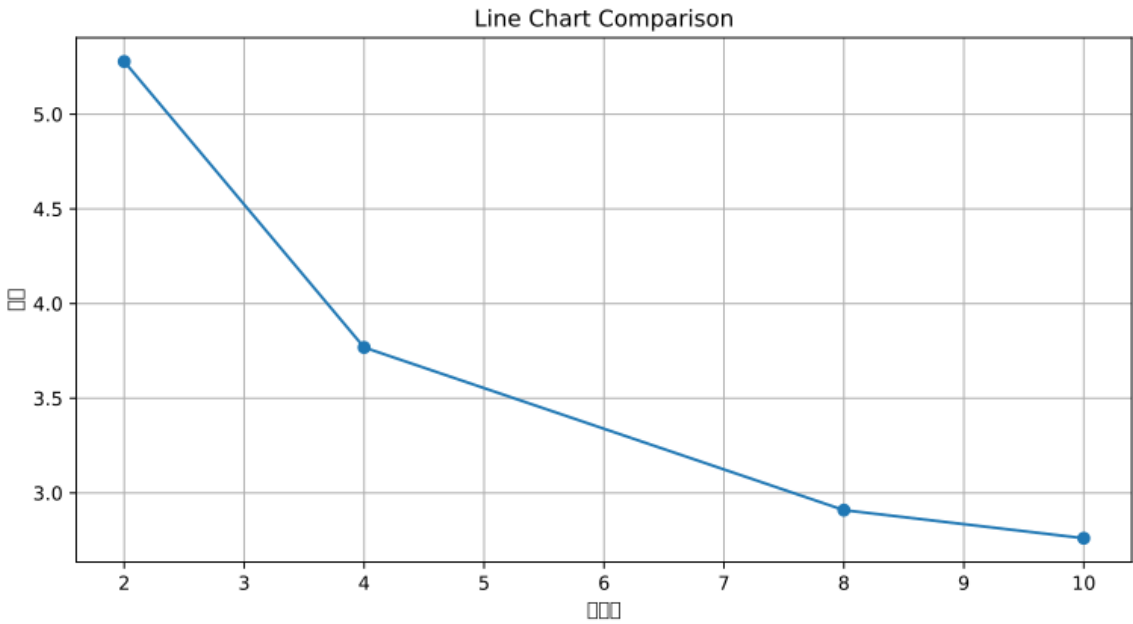
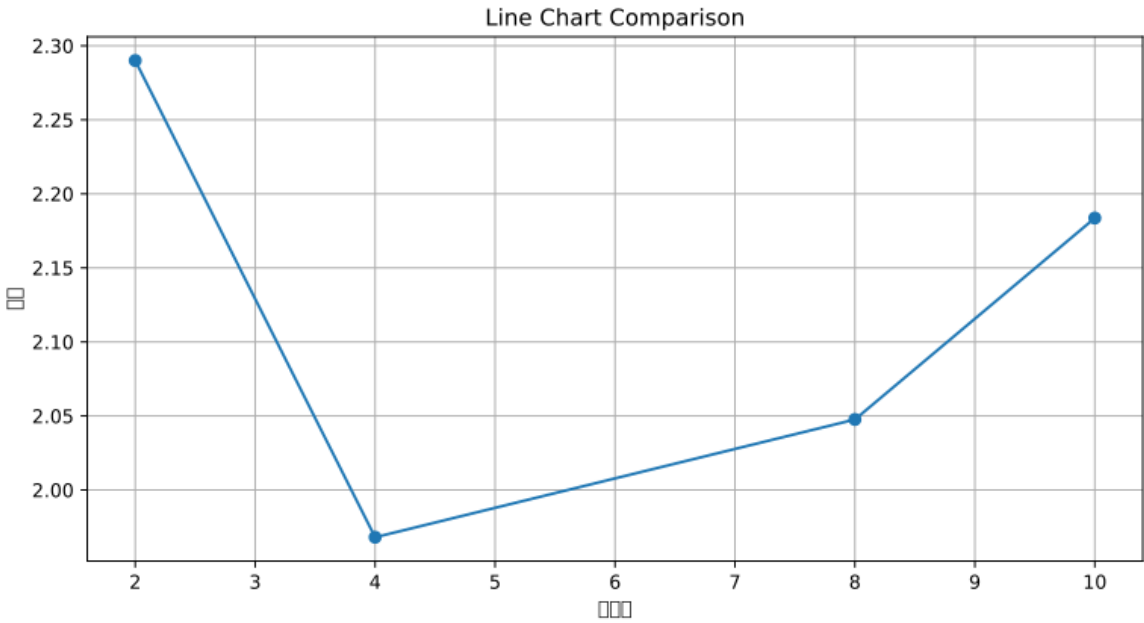
    starttime = time.time()
    result = parallel_matrix_multiply(A, B, num_splits)
    print("Time taken for parallel matrix multiply with joblib:", time.time() -
starttime)

    starttime = time.time()
    np.dot(A, B)
    print("Time taken for numpy dot product:", time.time() - starttime)

```

```
print(result.shape)
np.testing.assert_allclose(result, np.dot(A, B))
```

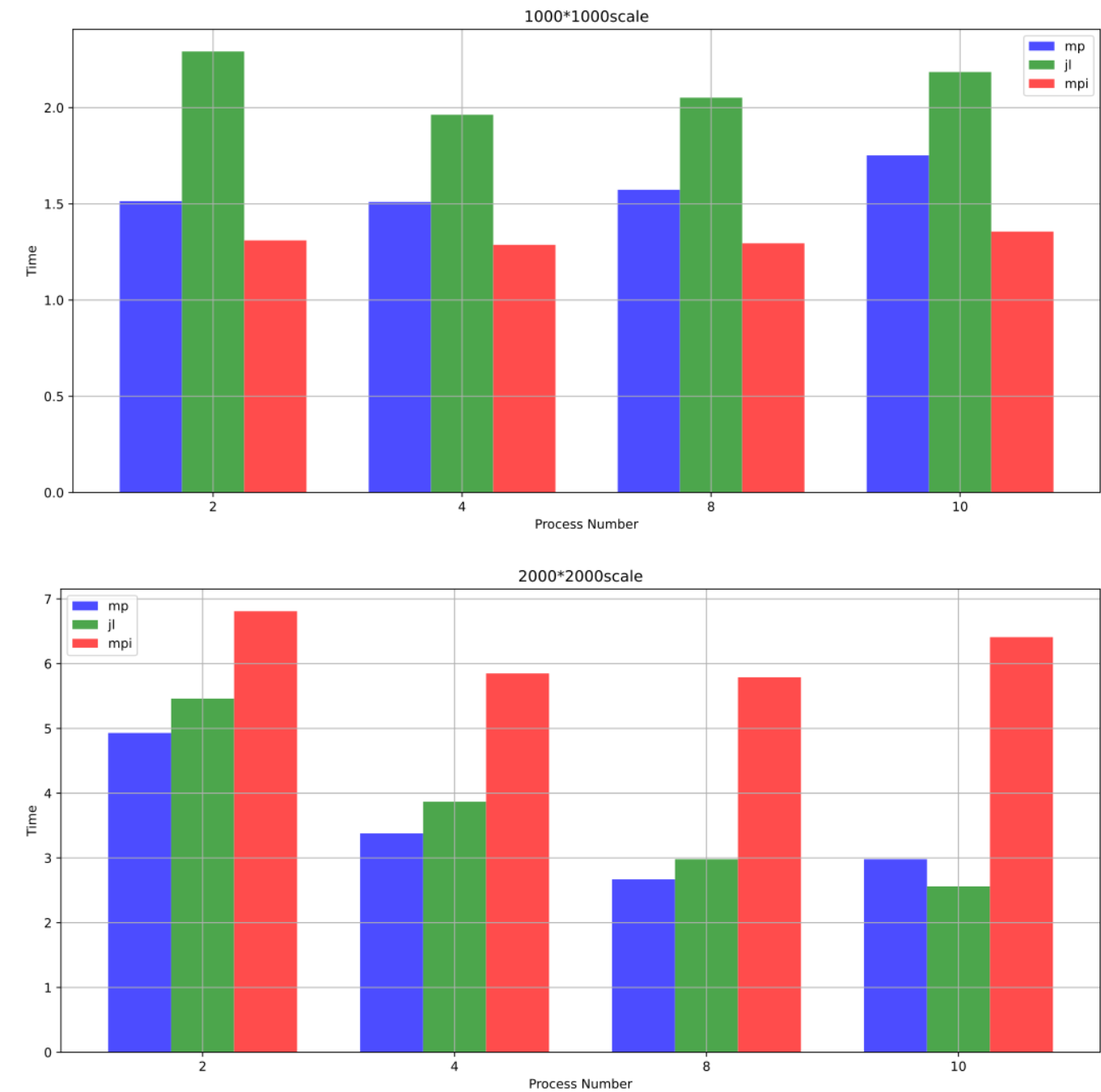
joblib结果 (这里不做详细介绍, 分别为1000, 2000规模的矩阵乘法)

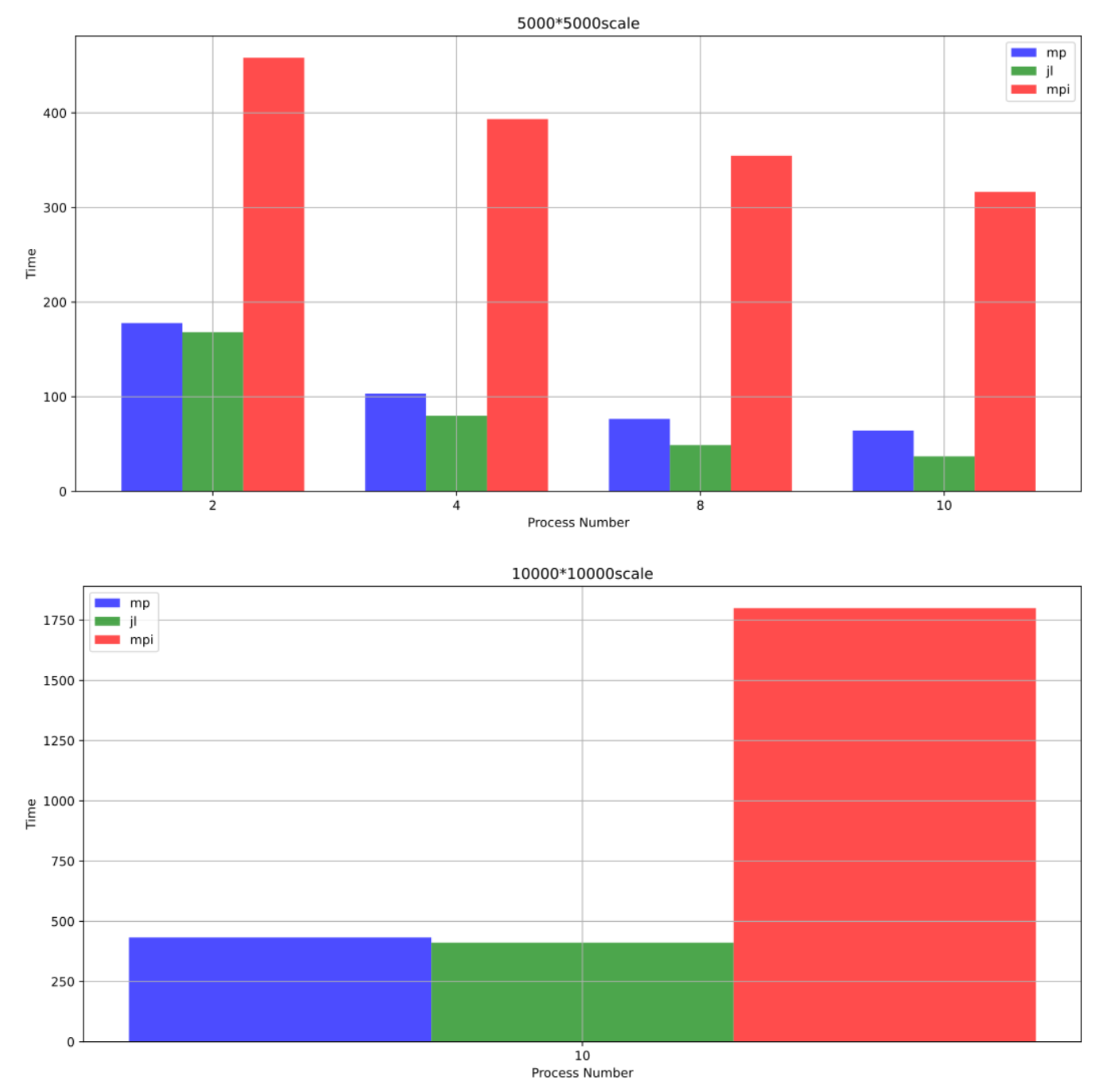


joblib数据量小时无优势, 数据量大时优势明显, 而且在多进程资源优化方面优势明显, 后文将用图像直观呈现。

3.多方案的比较

(赛博斗蛐蛐环节)





分析：
数据规模小时，mpi进程间非阻塞通讯提高了效率，良好利用了并行资源，速度较快；
数据规模大时，mpi方法由于单机局限，造成根进程瓶颈，主进程负担过大，并行效率下降明显。
multiprocessing库在数据规模大时效率明显高于mpi4py库，但是joblib还是比单纯的multiprocessing高效。但是这并不表明mpi在大数据量时计算完全比不上multiprocessing。

网上查询结果获取的结论如下：

“如果你的应用主要在单机上运行，且不需要跨节点的分布式计算，multiprocessing 可能是一个更简单、更易上手的选择。
如果你的应用需要在多节点的集群上运行（如服务器层面），或者需要更高效的进程间通信和更好的可扩展性，mpi4py 可能是更好的选择。”

三.实验过程中遇到的问题

I.优化方案优化了速度，却没有优化我的效率

使用numpy.dot()方法计算矩阵乘法确实很快，不要任何处理，可以达到10000*10000规模的矩阵乘法5秒内结束，SciPy库里的dgemm方法也是差不多，但是如果我想参考它们并行的效率，那么所有多进程方法将跑不过单进程。最后，我选择最原始的办法，时间复杂度为 $O(n^3)$ ，但是由于时间过长，采用numba的njit装饰器加速。

```
#numpy内置方法完成矩阵乘法

import numpy as np
from multiprocessing import Pool
import time

def matrix_multiply(A, B):
    return A @ B

def split_matrix(A, B, num_splits):
    # 计算每个子块的大小
    split_size_A = A.shape[0] // num_splits
    split_size_B = B.shape[1] // num_splits
    # 分割矩阵 A 和 B
    A_splits = [np.ascontiguousarray(A[i*split_size_A:(i+1)*split_size_A]) for i
in range(num_splits)]
    B_splits = [np.ascontiguousarray(B[:, i*split_size_B:(i+1)*split_size_B]) for
i in range(num_splits)]
    return A_splits, B_splits

def parallel_matrix_multiply(A, B, num_splits):
    # 使用 with 语句管理进程池
    with Pool(processes=num_splits) as pool:
        A_splits, B_splits = split_matrix(A, B, num_splits)
        results = []

        for i in range(num_splits):
            for j in range(num_splits):
                # 并行计算矩阵块的乘法
                result = pool.apply_async(matrix_multiply, (A_splits[i],
B_splits[j]))
                results.append((i, j, result))

        # 初始化结果矩阵
        final_result = np.zeros((A.shape[0], B.shape[1]))

        # 将子块结果合并到最终结果矩阵中
        split_size_A = A.shape[0] // num_splits
        split_size_B = B.shape[1] // num_splits
        for i, j, result in results:
            final_result[i*split_size_A:(i+1)*split_size_A, j*split_size_B:
(j+1)*split_size_B] = result.get()
```

```

        return final_result

if __name__ == "__main__":
    n = 10000
    A = np.random.rand(n, n)
    B = np.random.rand(n, n)
    num_splits = 8

    starttime = time.time()
    result = parallel_matrix_multiply(A, B, num_splits)
    print("Time taken:", time.time() - starttime)

    starttime = time.time()
    np.dot(A, B)
    print("Time taken:", time.time() - starttime)
    print(result.shape)
    np.testing.assert_allclose(result, np.dot(A, B))

```

```

#scipy中的矩阵乘法方法
import numpy as np
from scipy.linalg.blas import dgemm
import time

import numpy as np
from multiprocessing import Pool
import time
from scipy.linalg.blas import dgemm

def matrix_multiply(A, B):
    result = dgemm(alpha=1.0, a=A, b=B)
    return result

def split_matrix(A, B, num_splits):
    # 计算每个子块的大小
    split_size_A = A.shape[0] // num_splits
    split_size_B = B.shape[1] // num_splits
    # 分割矩阵 A 和 B
    A_splits = [np.ascontiguousarray(A[i*split_size_A:(i+1)*split_size_A]) for i
in range(num_splits)]
    B_splits = [np.ascontiguousarray(B[:, i*split_size_B:(i+1)*split_size_B]) for
i in range(num_splits)]
    return A_splits, B_splits

def parallel_matrix_multiply(A, B, num_splits):
    # 使用 with 语句管理进程池
    with Pool(processes=num_splits) as pool:
        A_splits, B_splits = split_matrix(A, B, num_splits)
        results = []

```

```

        for i in range(num_splits):
            for j in range(num_splits):
                # 并行计算矩阵块的乘法
                result = pool.apply_async(matrix_multiply, (A_splits[i],
B_splits[j]))
                results.append((i, j, result))

# 初始化结果矩阵
final_result = np.zeros((A.shape[0], B.shape[1]))

# 将子块结果合并到最终结果矩阵中
split_size_A = A.shape[0] // num_splits
split_size_B = B.shape[1] // num_splits
for i, j, result in results:
    final_result[i*split_size_A:(i+1)*split_size_A, j*split_size_B:
(j+1)*split_size_B] = result.get()

    return final_result

if __name__ == "__main__":
    n = 10000
    A = np.random.rand(n, n)
    B = np.random.rand(n, n)
    num_splits = 8

    starttime = time.time()
    result = parallel_matrix_multiply(A, B, num_splits)
    print("Time taken:", time.time() - starttime)

    starttime = time.time()
    np.dot(A, B)
    print("Time taken:", time.time() - starttime)
    print(result.shape)
    np.testing.assert_allclose(result, np.dot(A, B))

```

由于并行效率分析结果不佳，两个方法都被废弃。但是当要进行大规模矩阵乘法时，这两个都是很好的方法。

2.OpenMPI安装困难

采用一堆方法安装最后没有成功，报错一直是'no module named mpi4py'，最后换用简单易用的MPICH解决。具体实现见前面MPICH的安装。

3.ubuntu系统中安装的matplotlib进行数据可视化时调用plt.show()方法报错。

警告信息表明Matplotlib 当前使用的是 agg后端，这是一个非GUI后端，通常用于生成图形文件而不是在屏幕上显示图形。如果你想要显示图形，你需要确保Matplotlib 使用的是一个 GUI后端，比如 TkAgg 、 Qt5Agg等。可以通过在代码中显式设置后端来解决这个问题，如:import matplotlib matplotlib.use('TkAgg')。 import matplotlib.pyplot as plt确保这个设置在导入 pyplot之前进行。

其实也没有必要这样，只要不调用plt.show()就行，我们只需要将svg矢量图保存即可。

```
plt.savefig('文件名.svg', format='svg')
```

最后的保留节目

特别鸣谢

- ~~太阳王子~~THINKER-ONLY<https://github.com/THINKER-ONLY>
- ~~浩神~~Howxu<https://github.com/HowXu>
- ~~orchid~~<https://github.com/orchiddell0>
- ~~longtitle~~仙贝<https://github.com/tinymonster123>
- ~~客服小祥~~<https://github.com/hangone>