Paralleles Höchstleistungsrechnen
—
Algorithmen für vollbesetzte Matrizen II

Stefan Lang

Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen
Universität Heidelberg
INF 368, Raum 425
D-69120 Heidelberg
phone: 06221/54-8264
email: `Stefan.Lang@iwr.uni-heidelberg.de`

7. Dezember 2009

Themen

Datenparallele Algorithmen für vollbesetzte Matrizen

- Matrix-Vektor Multiplikation
- Matrix-Matrix Multiplikation

Matrix-Vektor Multiplikation

Berechne $y = Ax$, Matrix $A \in \mathcal{R}^{N \times M}$ und Vektor $x \in \mathcal{R}^M$

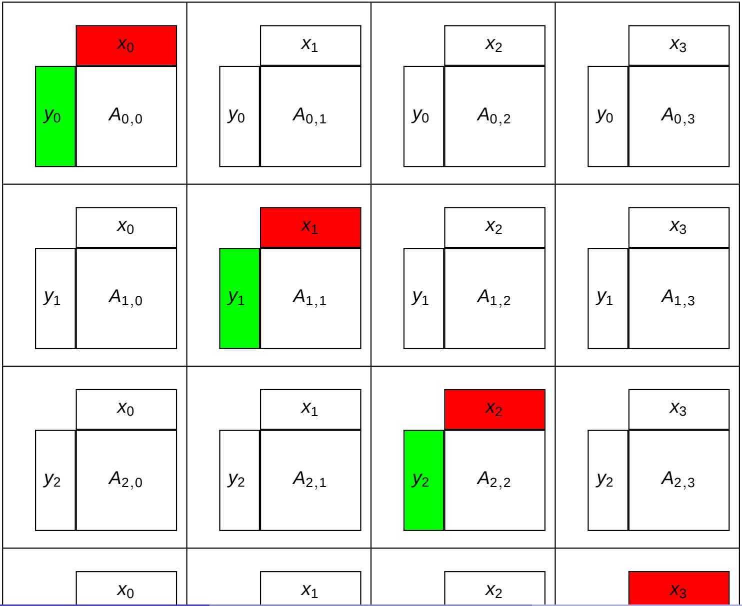
- Unterschiedliche Möglichkeiten zur Datenaufteilung.
- Verteilung der Matrix und des Vektors müssen aufeinander abgestimmt sein
- Verteilung des Ergebnisvektor $y \in \mathcal{R}^N$ wie bei Eingabevektor x

Beispiel:

- Matrix sei blockweise auf eine Feldtopologie verteilt
- Eingabevektor x entsprechend blockweise über die Diagonalprozessoren verteilt
- das Prozessorfeld ist quadratisch
- Vektorsegment x_q wird in jeder Prozessorspalte benötigt und ist somit in jeder Spalte zu kopieren (einer-an-alle).
- lokale Berechnung des Produkts $y_{p,q} = A_{p,q} x_q$.
- komplettes Segment y_p ergibt sich erst duch die Summation $y_p = \sum_q y_{p,q}$. (weitere alle-an-einen Kommunikation)
- Resultat kann unmittelbar für weitere Matrix-Vektor-Multiplikation benutzt werden

Matrix-Vektor Multiplikation: Aufteilung

Aufteilung für das Matrix-Vektor-Produkt



Matrix-Vektor Multiplikation: Parallele Laufzeit

Parallele Laufzeit für eine $N \times N$-Matrix und $\sqrt{P} \times \sqrt{P}$ Prozessoren mit cut-through Kommunikationsnetzwerk:

$$
\begin{aligned}
T_P(N,P) &= \underbrace{\left(t_s + t_h + t_w \overbrace{\frac{N}{\sqrt{P}}}^{\text{Vektor}} \right) \operatorname{ld} \sqrt{P}}_{\substack{\text{Austeilen von } x \\ \text{über Spalte}}} + \underbrace{\left(\frac{N}{\sqrt{P}} \right)^2 2t_f}_{\substack{\text{lokale Matrix-} \\ \text{Vektor-Mult.}}} \\
&\quad + \underbrace{\left(t_s + t_h + t_w \frac{N}{\sqrt{P}} \right) \operatorname{ld} \sqrt{P}}_{\substack{\text{Reduktion} \\ (t_f \ll t_w)}} = \\
&= \operatorname{ld} \sqrt{P} (t_s + t_h) 2 + \frac{N}{\sqrt{P}} \operatorname{ld} \sqrt{P} 2 t_w + \frac{N^2}{P} 2 t_f
\end{aligned}
$$

Für festes P und $N \to \infty$ wird der Kommunikationsanteil beliebig klein, es existiert also eine Isoeffizienzfunktion, der Algorithmus ist skalierbar.

Matrix-Vektor Multiplikation: Arbeit/Overhead

Berechnen wir Arbeit und Overhead:

Umrechnen auf die Arbeit W:

$$
\begin{aligned}
W &= N^2 2t_f \text{ (seq. Laufzeit)} \\
&\Rightarrow \quad N = \frac{\sqrt{W}}{\sqrt{2t_f}} \\
T_P(W,P) &= \operatorname{ld}\sqrt{P}(t_s + t_h)2 + \frac{\sqrt{W}}{\sqrt{P}} \operatorname{ld}\sqrt{P} \frac{2t_w}{\sqrt{2t_f}} + \frac{W}{P}
\end{aligned}
$$

Overhead:

$$T_O(W,P) = PT_P(W,P) - W =$$

$$= \sqrt{W}\sqrt{P} \operatorname{ld}\sqrt{P} \frac{2t_w}{\sqrt{2t_f}} + P \operatorname{ld}\sqrt{P}(t_s + t_h)2$$

Matrix-Vektor Multiplikation: Isoeffizienz

und nun die Isoeffizienzfunktion:

Isoeffizienz $(T_O(W,P) \stackrel{!}{=} KW)$: T_O hat zwei Terme. Für den ersten erhalten wir

$$\begin{aligned} & \sqrt{W}\sqrt{P}\,\mathrm{ld}\sqrt{P}\frac{2t_w}{\sqrt{2t_f}} = KW \\ \iff \quad & W = P(\mathrm{ld}\sqrt{P})^2\frac{4t_w^2}{2t_f K^2} \end{aligned}$$

und für den zweiten

$$\begin{aligned} & P\,\mathrm{ld}\sqrt{P}(t_s+t_h)2 = KW \\ \iff \quad & W = P\,\mathrm{ld}\sqrt{P}\frac{(t_s+t_h)2}{K}; \end{aligned}$$

somit ist $W = \Theta(P(\mathrm{ld}\sqrt{P})^2)$ die gesuchte Isoeffizienzfunktion.

Matrix-Matrix-Multiplikation

Algorithmus von Cannon

Es ist $C = A \cdot B$ zu berechnen.

- Zu multiplizierende $N \times N$-Matrizen A und B sind blockweise auf eine 2D-Feldtopologie ($\sqrt{P} \times \sqrt{P}$) verteilt
- Praktischerweise soll das Ergebnis C wieder in derselben Verteilung vorliegen.
- Prozess (p, q) muss somit

$$C_{p,q} = \sum_k A_{p,k} \cdot B_{k,q}$$

berechnen, benötigt also Blockzeile p von A und Blockspalte q von B.

Matrix-Matrix-Multiplikation

Die zwei Phasen des Algorithmus von Cannon:

1. *Alignment-Phase:* Die Blöcke von A werden in jeder Zeile zyklisch nach links geschoben, bis der Diagonalblock in der ersten Spalte zu liegen kommt. Entsprechend schiebt man die Blöcke von B in den Spalten nach oben, bis alle Diagonalblöcke in der ersten Zeile liegen.
   Nach der Alignment-Phase hat Prozessor (p, q) die Blöcke

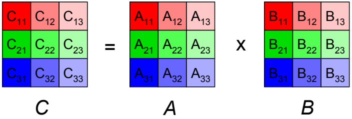
$$A_{p,\underbrace{(q+p)\,\%\,\sqrt{P}}} \qquad \text{(Zeile } p \text{ schiebt } p \text{ mal nach links)}$$

$$B_{\underbrace{(p+q)\,\%\,\sqrt{P}},q} \qquad \text{(Spalte } q \text{ schiebt } q \text{ mal nach oben).}$$

2. *Rechenphase:* Offensichtlich verfügt nun jeder Prozess über zwei passende Blöcke, die er multiplizieren kann. Schiebt man die Blöcke von A in jeder Zeile von A zyklisch um eine Position nach links und die von B in jeder Spalte nach oben, so erhält jeder wieder zwei passende Blöcke. Nach $\sqrt{P}$ Schritten ist man fertig.

Cannon's Algorithmus

- basiert auf blockweise Partitionierung der Matrizen
- Setup-Phase
  - Rotation der Matrizen A und B
- Iteration über $\sqrt{p}$
  - Berechne lokales Block-Matrix-Produkt
  - Shift A horizontal und B vertikal



Cannon’s Algorithmus - Rotation

- Anfangszustand:

A_{11}	A_{12}	A_{13}
A_{21}	A_{22}	A_{23}
A_{31}	A_{32}	A_{33}

B_{11}	B_{12}	B_{13}
B_{21}	B_{22}	B_{23}
B_{31}	B_{32}	B_{33}

- Verdrehen: Rotieren der i. Zeile (Spalte) von A (B) um i-Schritte:

A_{11}	A_{12}	A_{13}
A_{22}	A_{23}	A_{21}
A_{33}	A_{31}	A_{32}

B_{11}	B_{22}	B_{33}
B_{21}	B_{32}	B_{13}
B_{31}	B_{12}	B_{23}

Cannon's Algorithmus - Iteration

1.

$$\underset{C}{\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{bmatrix}} = \underset{A}{\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{22} & A_{23} & A_{21} \\ A_{33} & A_{31} & A_{32} \end{bmatrix}} \times \underset{B}{\begin{bmatrix} B_{11} & B_{22} & B_{33} \\ B_{21} & B_{32} & B_{13} \\ B_{31} & B_{12} & B_{23} \end{bmatrix}}$$

$$C_{11} = A_{11}B_{11}$$

2.

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{bmatrix} = \overset{\longleftarrow}{\begin{bmatrix} A_{12} & A_{13} & A_{11} \\ A_{23} & A_{21} & A_{22} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}} \times \begin{bmatrix} B_{21} & B_{32} & B_{13} \\ B_{31} & B_{12} & B_{23} \\ B_{11} & B_{22} & B_{33} \end{bmatrix} \uparrow$$

$$C_{11} = A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21}$$

3.

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{bmatrix} = \overset{\longleftarrow}{\begin{bmatrix} A_{13} & A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{32} & A_{33} & A_{31} \end{bmatrix}} \times \begin{bmatrix} B_{31} & B_{12} & B_{23} \\ B_{11} & B_{22} & B_{33} \\ B_{21} & B_{32} & B_{13} \end{bmatrix} \uparrow$$

$$C_{11} = A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} + A_{13}B_{31}$$

Cannon's Algorithm - Performance Analysis

- A, B verdrehen: $2 * s * (t_{startup} + t_{word} N^2/p)$
- Iteration (s-mal):
  - dgemm: $2 * t_{flop} * (n/s)^3 = 2 * t_{flop} * n^3/p^{1,5}$
  - A, B rollen: $2 * (t_{startup} + t_{word} N^2/p)$
- Gesamt: $t_{cannon}(p) = 4t_{startup} * s + 4t_{word} * N^2/s + 2t_{flop} * N^3/p$

- Effizienz $= 2\, t_{flop} * N^3 / (p * t_{cannon}(p))$

  $= 1 / (2t_{startup} * (s/N)^3 + 2t_{word} * s/N + t_{flop})$

  $\approx 1 / O(1 + \mathrm{sqrt}(p) / N))$
- Effizienz $\rightarrow$ 1, wenn $(N/s) \rightarrow \infty$
  - $N / s = N / \mathrm{sqrt}(p)$ = sqrt(Daten pro Prozessor)

Cannon mit MPI (Init)

```
/* Baue Gitter und hole Koordinaten */
int   dims[2], periods[2] = {1, 1};
int   mycoords[2];

dims[0] = sqrt(num_procs);
dims[1] = num_procs / dims[0];

MPI_Cart_create(MPI_COMM_WORLD,  /* kollektiv */
                2, dims, periods,
                0, &comm_2d);
MPI_Comm_rank(comm_2d, &my2drank);
MPI_Cart_coords(comm_2d, my2drank, 2, mycoords);

/* Lokale Blöcke der Matrizen */
double      *a, *b, *c;

/* Lade a, b  und c entsprechend der Koordinaten */
 ...
```

Cannon mit MPI (Rotate)

```
/* Matrix-Verdrehung A */
MPI_Cart_shift(comm_2d, 0, -mycoords[0],
               &shiftsource, &shiftdest);
MPI_Sendrecv_replace(a, nlocal*nlocal, MPI_DOUBLE,
                     shiftdest, 77, shiftsource, 77,
                     comm_2d, &status);

/* Matrix-Verdrehung B */
MPI_Cart_shift(comm_2d, 1, -mycoords[1],
               &shiftsource, &shiftdest);
MPI_Sendrecv_replace(b, nlocal*nlocal, MPI_DOUBLE,
                     shiftdest, 77, shiftsource, 77,
                     comm_2d, &status);
```

Cannon mit MPI (Iteration)

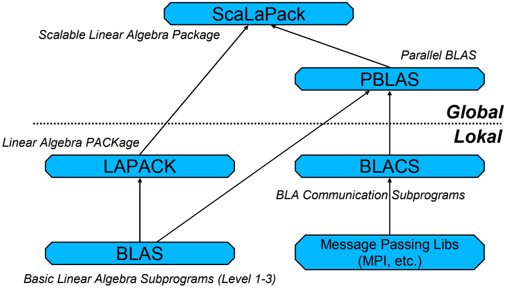
```
/* Finde linken und oberen Nachbarn */
MPI_Cart_shift(comm_2d, 0, -1, &rightrank, &leftrank);
MPI_Cart_shift(comm_2d, 1, -1, &downrank, &uprank);

for (i=0; i<dims[0]; i++)
{
 dgemm(nlocal, a, b, c); /* c= c + a * b */

 /* Matrix A nach links rollen */
 MPI_Sendrecv_replace(a, nlocal*nlocal, MPI_DOUBLE,
                      leftrank, 77, rightrank, 77,
                      comm_2d, &status);

 /* Matrix B nach oben rollen */
 MPI_Sendrecv_replace(b, nlocal*nlocal, MPI_DOUBLE,
                      uprank, 77, downrank, 77,
                      comm_2d, &status);
}

/* A und B zurück in Ursprungs-Zustand */
 ...
```

Cannon - Praktische Aspekte

- effiziente, aber nicht einfache Verallgemeinerung, falls
  - Matrizen nicht quadratisch sind
  - Dimensionen sind nicht ohne Rest durch p teilbar
  - andere Matrix Paritionierungen gebraucht werden
- Isoeffizenzfunktion von Cannon's Algorithmus: $O(P^{3/2})$, $N/\sqrt{P} = const \rightarrow$ Effizienz bleibt konstant für feste Blockgrößen pro Prozessor und anwachsender Prozessorzahl
- Dekel-Nassimi-Salmi-Algorithmus erlaubt die Nutzung von N^3 Prozessoren (Cannon N^2) mit besserer Isoeffizienz Funktion.

Standard Bibliotheken für Lineare Algebra

ATLAS, BLITZ (expression templates), ISTL (generic programming), ScaLaPack (klassisches Paket), Trilinos (Riesige Code Familie), `http://www.netlib.org`



Matrix-Matrix-Multiplikation: Isoeffizienzanalyse

Betrachten wir die zugehörige Isoeffizienzfunktion.

Sequentielle Laufzeit (siehe Bem. unten):

$$W = T_S(N) = N^3 2t_f$$
$$\Rightarrow N = \left(\frac{W}{2t_f}\right)^{\frac{1}{3}}$$

parallele Laufzeit:

$$\begin{aligned}
T_P(N,P) &= \underbrace{\left(\sqrt{P}-1\right)\left(t_s + t_h + t_w\frac{N^2}{P}\right)}_{\text{alignment}} \quad \overbrace{4}^{\textbf{send/recv } A/B} \\
&\quad + \sqrt{P}\left(\underbrace{\left(\frac{N}{\sqrt{P}}\right)^3 2t_f}_{\text{Multiplik. eines Blockes}} + \left(t_s + t_h + t_w\frac{N^2}{P}\right) 4 \right) \approx \\
&\approx \sqrt{P}(t_s + t_h)8 + \frac{N^2}{\sqrt{P}} t_w 8 + \frac{N^3}{P} 2t_f \\
T_P(W,P) &= \sqrt{P}(t_s + t_h)8 + \frac{W^{\frac{2}{3}}}{\sqrt{P}} \frac{8t_w}{(2t_f)^{\frac{1}{3}}} + \frac{W}{P}
\end{aligned}$$

Matrix-Matrix-Multiplikation: Isoeffizienzanalyse

Overhead:

$$T_O(W,P) = PT_P(W,P) - W = P^{\frac{2}{3}}(t_s + t_h)8 + \sqrt{P}W^{\frac{2}{3}}\frac{8t_w}{(2t_f)^{\frac{1}{3}}}$$

Ergebnis:

- Somit ist $W = \Theta(P^{3/2})$.
- Wegen $N = \left(\frac{W}{2t_f}\right)^{1/3}$ gilt $N/\sqrt{P} = const$
- Somit ist bei *fester* Grösse der Blöcke in jedem Prozessor und wachsender Prozessorzahl bleibt die Effizienz konstant.
- Beschränken wir uns beim Algorithmus von Cannon auf 1×1-Blöcke pro Prozessor, also $\sqrt{P} = N$, so können wir für die erforderlichen N^3 Multiplikationen nur N^2 Prozessoren nutzen.
- Dies ist der Grund für die Isoeffizienzfunktion der Ordnung $P^{3/2}$.

Dekel-Nassimi-Salmi-Algorithmus

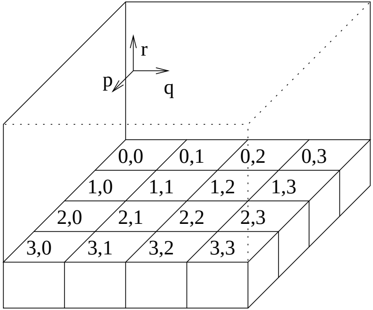
- Nun betrachten wir einen Algorithmus der den Einsatz von bis zu N^3 Prozessoren bei einer $N \times N$-Matrix erlaubt.
- Gegeben seien also $N \times N$-Matrizen A und B sowie ein 3D-Feld von Prozessoren der Dimension $P^{1/3} \times P^{1/3} \times P^{1/3}$.
- Die Prozessoren werden über die Koordinaten (p, q, r) adressiert.
- Um den Block $C_{p,q}$ der Ergebnismatrix C mittels

$$C_{p,q} = \sum_{r=0}^{P^{\frac{1}{3}}-1} A_{p,r} \cdot B_{r,q} \tag{1}$$

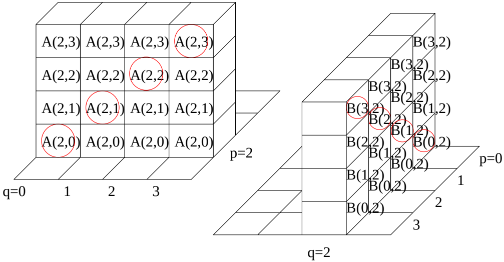
  zu berechnen, setzen wir $P^{1/3}$ Prozessoren ein, und zwar ist Prozessor (p, q, r) genau für das Produkt $A_{p,r} \cdot B_{r,q}$ zuständig.
- Nun ist noch zu klären, wie Eingabe- und Ergebnismatrizen verteilt sein sollen.
- Sowohl A als auch B sind in $P^{1/3} \times P^{1/3}$-Blöcke der Größe $\frac{N}{P^{1/3}} \times \frac{N}{P^{1/3}}$ zerlegt.
- $A_{p,q}$ und $B_{p,q}$ wird zu Beginn in Prozessor $(p, q, 0)$ gespeichert, auch das Ergebnis $C_{p,q}$ soll dort liegen.
- Die Prozessoren (p, q, r) für $r > 0$ werden nur zwischenzeitlich benutzt.

Matrix-Matrix-Multiplikation: Dekel-Nassimi-Salmi-Alg.

Verteilung von A, B, C für $P^{1/3} = 4$ (P=64).



Verteilung der Blöcke von A und B (zu Beginn) und C (am Ende)



Verteilung von A und B für die Multiplikation

Matrix-Matrix-Multiplikation: Dekel-Nassimi-Salmi-Alg.

- Damit nun jeder Prozessor (p, q, r) „seine“ Multiplikation $A_{p,r} \cdot B_{r,q}$ durchführen kann, sind die beteiligten Blöcke von A und B erst an ihre richtige Position zu befördern.
- Alle Prozessoren benötigen $(p, *, r)$ den Block $A_{p,r}$ und alle Prozessoren $(*, q, r)$ den Block $B_{r,q}$.
- Sie wird folgendermaßen hergestellt:

  Prozessor $(p, q, 0)$ sendet $A_{p,q}$ an Prozessor (p, q, q) und dann sendet (p, q, q) das $A_{p,q}$ an alle $(p, *, q)$ mittels einer einer-an-alle Kommunikation auf $P^{1/3}$ Prozessoren. Entsprechend schickt $(p, q, 0)$ das $B_{p,q}$ an Prozessor (p, q, p), und dieser verteilt dann an $(*, q, p)$.

- Nach der Multiplikation in jedem (p, q, r) sind die Ergebnisse aller $(p, q, *)$ noch in $(p, q, 0)$ mittels einer alle-an-einen Kommunikation auf $P^{1/3}$ Prozessoren zu sammeln.

Matrix-Matrix-Multiplikation: Dekel-Nassimi-Salmi-Alg.

Analysieren wir das Verfahren im Detail (3D-cut-through Netzwerk):

$$
\begin{aligned}
W &= T_S(N) = N^3 2t_f \quad \Rightarrow N = \left(\frac{N}{2t_f}\right)^{\frac{1}{3}} \\
T_P(N,P) &= \underbrace{\left(t_s + t_h + t_w \left(\frac{N}{P^{\frac{1}{3}}}\right)^2\right)}_{(p,q,0)\longrightarrow(p,q,q),(p,q,p)} \overbrace{2}^{\substack{A_{p,q} \text{ u.} \\ B_{p,q}}} + \underbrace{\left(t_s + t_h + t_w \left(\frac{N}{P^{\frac{1}{3}}}\right)^2\right) \operatorname{ld} P^{\frac{1}{3}} \overbrace{2}^{A,B}}_{\text{einer-an-alle}} \\
&+ \underbrace{\left(\frac{N}{P^{\frac{1}{3}}}\right)^3 2t_f}_{\text{Multiplikation}} + \underbrace{\left(t_s + t_h + t_w \left(\frac{N}{P^{\frac{1}{3}}}\right)^2\right) \operatorname{ld} P^{\frac{1}{3}}}_{\substack{\text{alle-an-einen} \\ (t_f \ll t_w)}} \approx \\
&\approx 3 \operatorname{ld} P^{\frac{1}{3}} (t_s + t_h) + \frac{N^2}{P^{\frac{2}{3}}} 3 \operatorname{ld} P^{\frac{1}{3}} t_w + \frac{N^3}{P} 2t_f \\
T_P(W,P) &= 3 \operatorname{ld} P^{\frac{1}{3}} (t_s + t_h) + \frac{W^{\frac{2}{3}}}{P^{\frac{2}{3}}} 3 \operatorname{ld} P^{\frac{1}{3}} \frac{t_w}{(2t_f)^{\frac{2}{3}}} + \frac{W}{P} \\
T_O(W,P) &= P \operatorname{ld} P^{\frac{1}{3}} 3(t_s + t_h) + W^{\frac{2}{3}} P^{\frac{1}{3}} \operatorname{ld} P^{\frac{1}{3}} \frac{3t_w}{(2t_f)^{\frac{2}{3}}}
\end{aligned}
$$

Matrix-Matrix-Multiplikation: Dekel-Nassimi-Salmi-Alg.

- Aus dem zweiten Term von $T_O(W, P)$ nähern wir die Isoeffizienzfunktion an:

$$
\begin{aligned}
& W^{\frac{2}{3}} P^{\frac{1}{3}} \operatorname{ld} P^{\frac{1}{3}} \frac{3t_w}{(2t_f)^{\frac{2}{3}}} = KW \\
\iff \quad & W^{\frac{1}{3}} = P^{\frac{1}{3}} \operatorname{ld} P^{\frac{1}{3}} \frac{3t_w}{(2t_f)^{\frac{2}{3}} K} \\
\iff \quad & \boxed{W = P \left(\operatorname{ld} P^{\frac{1}{3}} \right)^3 \frac{27 {t_w}^3}{4 {t_f}^2 K^3}.}
\end{aligned}
$$

- Also erhalten wir die Isoeffizienzfunktion $O(P (\operatorname{ld} P)^3)$ und somit eine bessere Skalierbarkeit als für den Cannon'schen Algorithmus.
- Wir haben immer angenommen, dass die optimale sequentielle Komplexität der Matrixmultiplikation N^3 ist. Der Algorithmus von Strassen hat jedoch eine Komplexität von $O(N^{2.87})$.
- Für eine effiziente Implementierung der Multiplikation zweier Matrixblöcke auf einem Prozessor muß auf Cacheeffizienz geachtet werden.