

# Algorithmen für vollbesetzte Matrizen II

Stefan Lang

Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen  
Universität Heidelberg  
INF 368, Raum 532  
D-69120 Heidelberg  
phone: 06221/54-8264  
email: [Stefan.Lang@iwr.uni-heidelberg.de](mailto:Stefan.Lang@iwr.uni-heidelberg.de)

WS 13/14

## 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 durch 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:

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

Für festes  $P$  und  $N \rightarrow \infty$  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  $W$ :

$$W = N^2 2t_f \text{ (seq. Laufzeit)}$$

$$\Rightarrow N = \frac{\sqrt{W}}{\sqrt{2t_f}}$$

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

Overhead:

$$\begin{aligned} T_O(W, P) &= P T_P(W, P) - W = \\ &= \sqrt{W} \sqrt{P} \text{ld} \sqrt{P} \frac{2t_w}{\sqrt{2t_f}} + P \text{ld} \sqrt{P} (t_s + t_h) 2 \end{aligned}$$

# Matrix-Vektor Multiplikation: Isoeffizienz

und nun die Isoeffizienzfunktion:

Isoeffizienz ( $T_0(W, P) \stackrel{!}{=} KW$ ):  $T_0$  hat zwei Terme. Für den ersten erhalten wir

$$\begin{aligned} \sqrt{W}\sqrt{P}\text{Id}\sqrt{P}\frac{2t_w}{\sqrt{2t_f}} &= KW \\ \Leftrightarrow W &= P(\text{Id}\sqrt{P})^2\frac{4t_w^2}{2t_fK^2} \end{aligned}$$

und für den zweiten

$$\begin{aligned} P\text{Id}\sqrt{P}(t_s + t_h)2 &= KW \\ \Leftrightarrow W &= P\text{Id}\sqrt{P}\frac{(t_s + t_h)2}{K}; \end{aligned}$$

somit ist  $W = O(P(\text{Id}\sqrt{P})^2)$  die gesuchte Isoeffizienzfunktion.

## 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

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

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

- 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

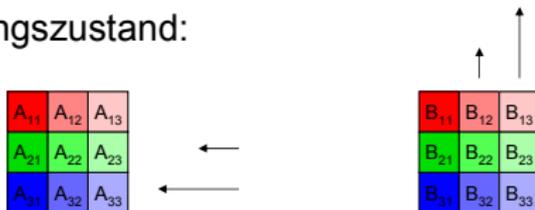
- basiert auf blockweise Partitionierung der Matrizen
- Setup-Phase
  - ▶ Rotation der Matrizen  $A$  und  $B$
- Iteration über  $\sqrt{p}$ 
  - ▶ Berechne lokales Block-Matrix-Produkt
  - ▶ Shift  $A$  horizontal und  $B$  vertikal

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ \hline C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ \hline C_{31} & C_{32} & C_{33} \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ \hline A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ \hline A_{31} & A_{32} & A_{33} \\ \hline \end{array} \times \begin{array}{|c|c|c|} \hline B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ \hline B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ \hline B_{31} & B_{32} & B_{33} \\ \hline \end{array}$$

$C$                        $A$                        $B$

# Cannon's Algorithmus - Rotation

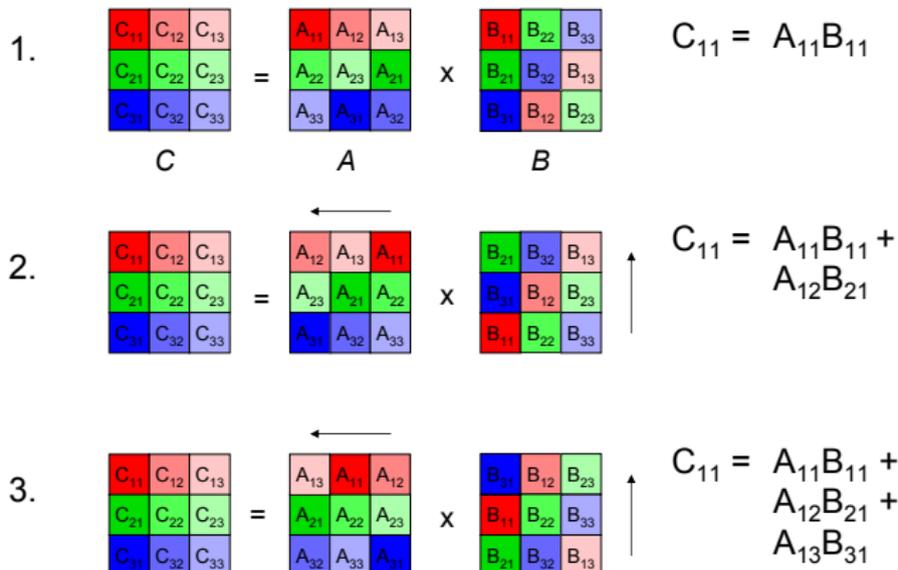
- Anfangszustand:



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



# Cannon's Algorithmus - Iteration



# Cannon's Algorithm - Performance Analysis

- A, B verdrehen:  $2 * s * (t_{\text{startup}} + t_{\text{word}} N^2/p)$
- Iteration (s-mal):
  - dgemm:  $2 * t_{\text{flop}} * (n/s)^3 = 2 * t_{\text{flop}} * n^3/p^{1.5}$
  - A, B rollen:  $2 * (t_{\text{startup}} + t_{\text{word}} N^2/p)$
- Gesamt:  $t_{\text{cannon}}(p) = 4t_{\text{startup}} * s + 4t_{\text{word}} * N^2/s + 2t_{\text{flop}} * N^3/p$
  
- Effizienz =  $2 t_{\text{flop}} * N^3 / (p * t_{\text{cannon}}(p))$   
=  $1 / (2t_{\text{startup}} * (s/N)^3 + 2t_{\text{word}} * s/N + t_{\text{flop}})$   
 $\approx 1 / O(1 + \text{sqrt}(p) / N)$
- Effizienz  $\rightarrow 1$ , wenn  $(N/s) \rightarrow \infty$ 
  - $N / s = N / \text{sqrt}(p) = \text{sqrt}(\text{Daten pro Prozessor})$

# 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++)
{
    dgemv(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 */
...
```

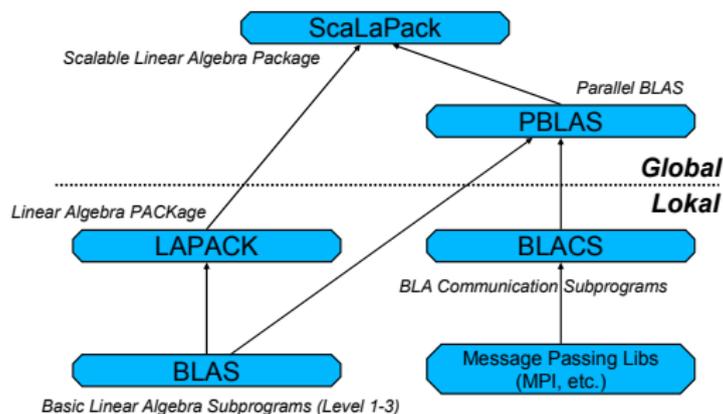
# Cannon - Praktische Aspekte

- effiziente, aber nicht einfache Verallgemeinerung, falls
  - ▶ Matrizen nicht quadratisch sind
  - ▶ Dimensionen sind nicht ohne Rest durch  $p$  teilbar
  - ▶ andere Matrix Partitionierungen gebraucht werden
- Isoeffizienzfunktion von Cannon's Algorithmus:  $O(P^{3/2})$ ,  
 $N/\sqrt{P} = \text{const}$  → 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 :

$$W = T_S(N) = N^3 2t_f$$

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

parallele Laufzeit:

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

# Matrix-Matrix-Multiplikation: Isoeffizienzanalyse

Overhead:

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

Ergebnis:

- Somit ist  $W = O(P^{3/2})$ .
- Wegen  $N = \left(\frac{W}{2t_f}\right)^{1/3}$  gilt  $N/\sqrt{P} = \text{const}$
- Somit ist bei *fester* Grösse der Blöcke in jedem Prozessor und wachsender Prozessorzahl die Effizienz konstant.
- Beschränken wir uns beim Algorithmus von Cannon auf  $1 \times 1$ -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  $P^{3/2}$ .

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

## 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

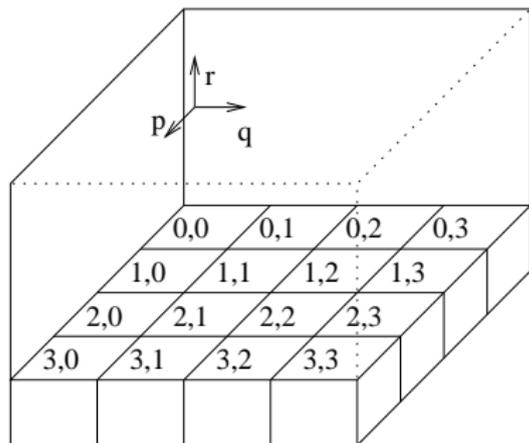
$$C_{p,q} = \sum_{r=0}^{P^{1/3}-1} A_{p,r} \cdot B_{r,q} \quad (1)$$

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.

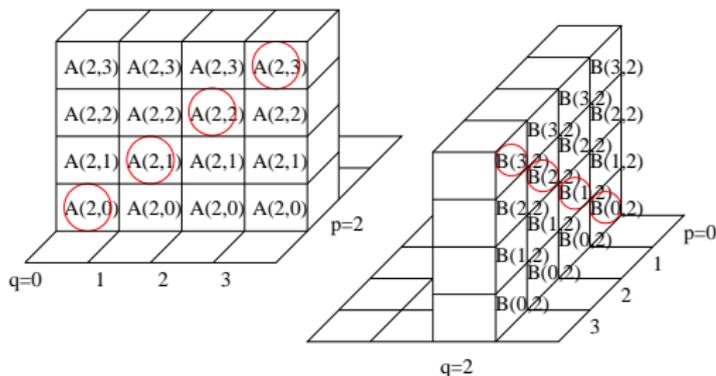
- Nun ist noch zu klären, wie Eingabe- und Ergebnismatrizen verteilt sein sollen.
- Sowohl  $A$  als auch  $B$  sind in  $P^{1/3} \times P^{1/3}$ -Blöcke der Größe  $\frac{N}{P^{1/3}} \times \frac{N}{P^{1/3}}$  zerlegt.
- $A_{p,q}$  und  $B_{p,q}$  wird zu Beginn in Prozessor  $(p, q, 0)$  gespeichert, 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):

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

$$T_P(N, P) = \underbrace{\left( t_s + t_h + t_w \left( \frac{N}{P^{\frac{1}{3}}} \right)^2 \right)}_{(p,q,0) \rightarrow (p,q,q), (p,q,p)} \underbrace{2}_{\substack{A_{p,q} \text{ u.} \\ B_{p,q}}} + \underbrace{\left( t_s + t_h + t_w \left( \frac{N}{P^{\frac{1}{3}}} \right)^2 \right) \text{Id } P^{\frac{1}{3}}}_{\text{einer-an-alle}} \underbrace{2}_{A,B}$$

$$+ \underbrace{\left( \frac{N}{P^{\frac{1}{3}}} \right)^3 2t_f}_{\text{Multiplikation}} + \underbrace{\left( t_s + t_h + t_w \left( \frac{N}{P^{\frac{1}{3}}} \right)^2 \right) \text{Id } P^{\frac{1}{3}}}_{\substack{\text{alle-an-einen} \\ (t_f \ll t_w)}} \approx$$

$$\approx 3 \text{Id } P^{\frac{1}{3}} (t_s + t_h) + \frac{N^2}{P^{\frac{2}{3}}} 3 \text{Id } P^{\frac{1}{3}} t_w + \frac{N^3}{P} 2t_f$$

$$T_P(W, P) = 3 \text{Id } P^{\frac{1}{3}} (t_s + t_h) + \frac{W^{\frac{2}{3}}}{P^{\frac{2}{3}}} 3 \text{Id } P^{\frac{1}{3}} \frac{t_w}{(2t_f)^{\frac{2}{3}}} + \frac{W}{P}$$

$$T_O(W, P) = P \text{Id } P^{\frac{1}{3}} 3(t_s + t_h) + W^{\frac{2}{3}} P^{\frac{1}{3}} \text{Id } P^{\frac{1}{3}} \frac{3t_w}{(2t_f)^{\frac{2}{3}}}$$

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

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

$$W^{\frac{2}{3}} P^{\frac{1}{3}} \text{ld } P^{\frac{1}{3}} \frac{3t_w}{(2t_f)^{\frac{2}{3}}} = KW$$

$$\Leftrightarrow W^{\frac{1}{3}} = P^{\frac{1}{3}} \text{ld } P^{\frac{1}{3}} \frac{3t_w}{(2t_f)^{\frac{2}{3}} K}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{W = P \left( \text{ld } P^{\frac{1}{3}} \right)^3 \frac{27t_w^3}{4t_f^2 K^3}}$$

- Also erhalten wir die Isoeffizienzfunktion  $O(P(\text{ld } P^{\frac{1}{3}})^3)$  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.