Paralelní algoritmy v lineární algebře

Tomáš Oberhuber
tomas.oberhuber@fjfi.cvut.cz

15. dubna 2024

Video na Youtube

Násobení hustých matic

- Násobení husté matice s vektorem je poměrně přímočeré:
  - do vstupního vektoru přistupujeme opakovaně a může se vyplatit ho držet v keši CPU nebo sdílené paměti multiprocesrou na GPU
- Násobení dvou hustých matic na CPU jsme si ukázali již v části a optimálních přístupech do paměti na CPU.
- Podobný postup využívajíci násobení jednotlivých dlaždic matice se hodí i na GPU.

Ukážeme si násobení hustých matic na architekturách s distribuovanou pamětí.

Násobení hustých matic

- mějme matice $\mathbb{A}, \mathbb{B}, \mathbb{C} \in \mathbb{R}^{n,n}$
- počítáme součin $\mathbb{C} = \mathbb{A}\mathbb{B}$
- mějme p procesu a nechť p je mocnina dvou
- matice rozdělíme blokově na $\sqrt{p} \times \sqrt{p}$ bloků
- pak je

$$C_{i,j} = \sum_{k=0}^{\sqrt{p}-1} A_{i,k} B_{k,j}$$

- výpočet bloku $C_{i,j}$ provádí ten proces, na který je blok mapován
- od ostatních procesů si musí vyžádat příslušné bloky $A_{i,k}$ a $B_{k,j}$

Násobení hustých matic

Příklad: pro $p = 9$

$$
\begin{aligned}
C_{0,0} &= A_{0,0}B_{0,0} + A_{0,1}B_{1,0} + A_{0,2}B_{2,0} \\
C_{1,0} &= A_{1,0}B_{0,0} + A_{1,1}B_{1,0} + A_{1,2}B_{2,0} \\
C_{2,0} &= A_{2,0}B_{0,0} + A_{2,1}B_{1,0} + A_{2,2}B_{2,0} \\
C_{0,1} &= A_{0,0}B_{0,1} + A_{0,1}B_{1,1} + A_{0,2}B_{2,1} \\
C_{1,1} &= A_{1,0}B_{0,1} + A_{1,1}B_{1,1} + A_{1,2}B_{2,1} \\
C_{2,1} &= A_{2,0}B_{0,1} + A_{2,1}B_{1,1} + A_{2,2}B_{2,1} \\
C_{0,2} &= A_{0,0}B_{0,2} + A_{0,1}B_{1,2} + A_{0,2}B_{2,2} \\
C_{1,2} &= A_{1,0}B_{0,2} + A_{1,1}B_{1,2} + A_{1,2}B_{2,2} \\
C_{2,2} &= A_{2,0}B_{0,2} + A_{2,1}B_{1,2} + A_{2,2}B_{2,2}
\end{aligned}
$$

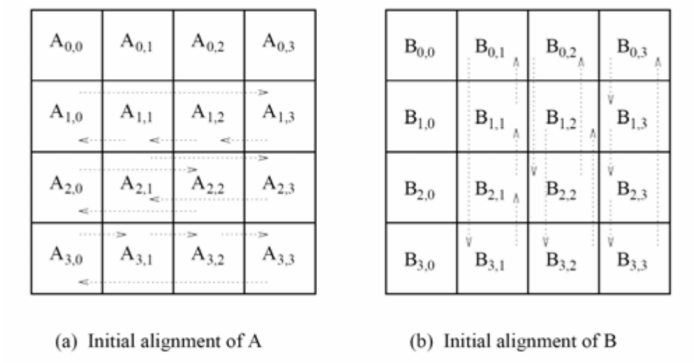
- vidíme, že např. v prvním kroku tři různé procesy potřebují současně bloky $A_{0,0}$, $A_{1,0}$, $A_{2,0}$ a podobně pro bloky z matice $\mathbb{B}$

Násobení hustých matic

- tyto konflikty jsou nevýhodné zejména pro architektury s distribuovanou pamětí
- změníme pořadí sčítání bloků v jednotlivých procesech
- každý řádek pro výpočet bloku $C_{i,j}$ orotujeme $(i+j)$-krát doleva

$$
\begin{aligned}
C_{0,0} &= A_{0,0}B_{0,0} + A_{0,1}B_{1,0} + A_{0,2}B_{2,0} \\
C_{1,0} &= A_{1,1}B_{1,0} + A_{1,2}B_{2,0} + A_{1,0}B_{0,0} \\
C_{2,0} &= A_{2,2}B_{2,0} + A_{2,0}B_{0,0} + A_{2,1}B_{1,0} \\
C_{0,1} &= A_{0,1}B_{1,1} + A_{0,2}B_{2,1} + A_{0,0}B_{0,1} \\
C_{1,1} &= A_{1,2}B_{2,1} + A_{1,0}B_{0,1} + A_{1,1}B_{1,1} \\
C_{2,1} &= A_{2,0}B_{0,1} + A_{2,1}B_{1,1} + A_{2,2}B_{2,1} \\
C_{0,2} &= A_{0,2}B_{2,2} + A_{0,0}B_{0,2} + A_{0,1}B_{1,2} \\
C_{1,2} &= A_{1,0}B_{0,2} + A_{1,1}B_{1,2} + A_{1,2}B_{2,2} \\
C_{2,2} &= A_{2,1}B_{1,2} + A_{2,2}B_{2,2} + A_{2,0}B_{0,2}
\end{aligned}
$$

Násobení hustých matic



Zdroj: A. Grama, A. Gupta, G. Karypis, V. Kumar, Introduction to Parallel Computing, Pearson/Addison Wesley, 2003

Násobení hustých matic

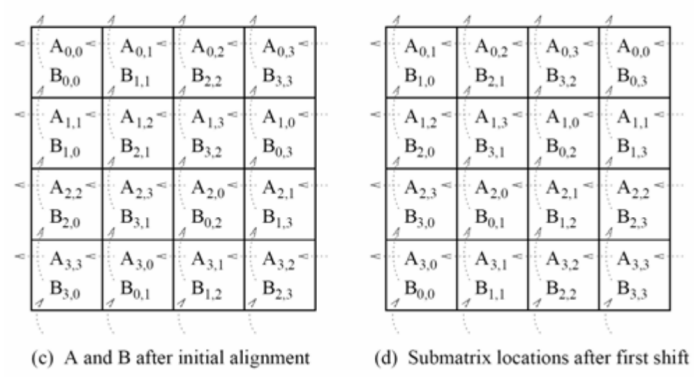
- a sumu

$$C_{i,j} = \sum_{k=0}^{2} A_{i,k} B_{k,j}$$

zaměníme za

$$C_{i,j} = \sum_{k=0}^{2} A_{i,(k+i+j)\%3} B_{(k+i+j)\%3,j}$$

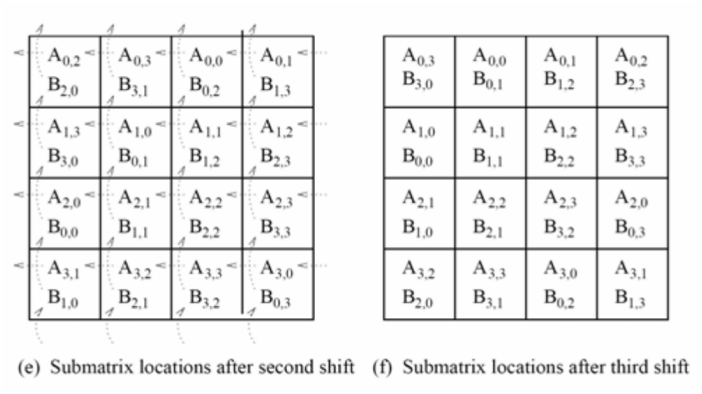
Násobení hustých matic



Zdroj: A. Grama, A. Gupta, G. Karypis, V. Kumar, Introduction to Parallel Computing, Pearson/Addison Wesley, 2003

- v každém kroku algoritmu bloky matice $\mathbb{A}$ rotují o jeden doleva a bloky matice $\mathbb{B}$ o jeden nahoru

Násobení hustých matic



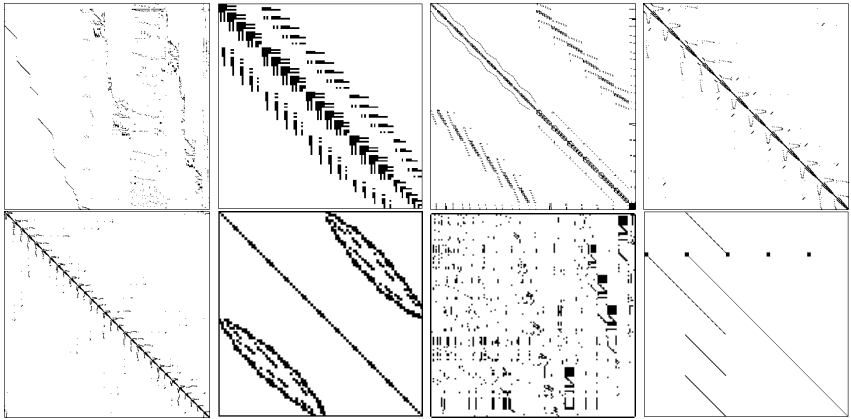
(e) Submatrix locations after second shift (f) Submatrix locations after third shift

Zdroj: A. Grama, A. Gupta, G. Karypis, V. Kumar, Introduction to Parallel Computing, Pearson/Addison Wesley, 2003

Řídké matice

Definition

Řídká matice je taková matice, která má většinu svých prvků nulových.

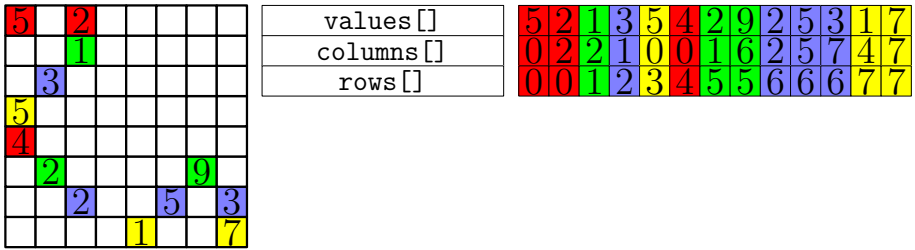


Zdroj: Matrix market

Řídké matice

- U takovýchto matic ukládáme jen nenulové prvky, čímž lze výrazně redukovat paměťové nároky.
- Existuje celá řada formátů pro ukládání řídkých matic.
- Mezi nejznámější patří:
  - COO - *coordinate list*
  - CSR - *compressed sparse rows*
  - Ellpack
- Cílem je maximálně redukovat objem dat nezbytný k reprezentaci matice.
- Jednak to šetří paměť, ale většina maticových opreací je limitováná datovou propustností, tj. méně dat = lepší výkon.

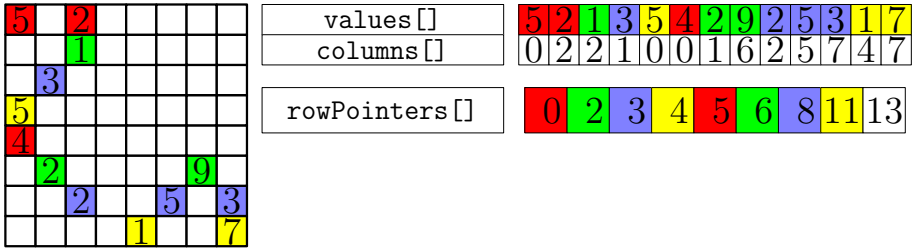
Řídké matice - COO formát



Tento formát využívá tři pole, každé má tolik prvků, kolik je nenulových maticových prvků:

- `values` - hodnoty maticových prvků,
- `columns` - sloupcové indexy maticových prvků,
- `rows` - řádkové indexy maticových prvků.

Řídké matice - CSR formát

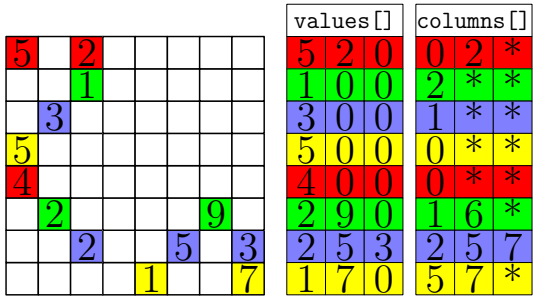


Předpokládáme, že nenulové prvky jsou uloženy po řádcích.

Pole `rows` nahradíme za `rowPointers`:

- to má velikost rovnu počtu řádku +1
- pro každý řádek obsahuje index prvního prvku v řádku v polích `values` a `columns`
- toto pole se do napočítat pomcí exkluziního prefix-sum aplikovaný na pole udávající počet nenulových prvků v daném řádku matice

Řídké matice - Ellpack formát



Předpokládáme, že v každém řádku je počet nenulových prvků téměř stejný.

- Pokud m je maximální počet nenulových prvků v jednotlivých řádcích matice, pak k-tý řádek začíná v polách `values` a `columns` na pozici $k \cdot m$.
- Do řádků, které mají menší zaplnění nenulovými prvky vložíme zarovnávací nuly, tzv. *padding elements*.

Řídké matice - SpMV

SpMV = *sparse-matrix vector multiplication*

```
1  void SpMV( const CSRMatrix& A, const Vector& x, Vector& b )
2  {
3     for( int row = 0; row < A.getRows(); row++) {
4        double aux( 0.0 );
5        const int begin = A.rowPointers[ row ];
6        const int end = A.rowPointers[ row + 1 ];
7        for( int i = begin; i < end; i++ )
8           aux += x[ A.columns[ i ] ] * A.values[ i ];
9        b[ row ] =  aux;
10    }
11 }
```

- Do polí `values` a `columns` přistupujeme sekvenčně máme tak optimální přístupy do paměti.
- **Vkládání nových prvků do formátů CSR je velice náročné.**

Matice v TNL

TNL podporuje následující typy matic:

- husté matice,
- obecné řídké matice,
- tridiagonální a mutlidiagonální matice,
- lambda matice pro bezmaticové metody (*matrix-free methods*).

Matice v TNL - husté matice

Hustá matice je v TNL definována jako:

```
1 template< typename Real = double,
2           typename Device = TNL::Devices::Host,
3           typename Index = int,
4           typename ElementsOrganization,
5           typename RealAllocator >
6 struct TNL::Matrices::DenseMatrix;
```

kde

- `Real` je typ maticových prvků.
- `Device` je typ zařízení, na kterém bude matice alokována.
- `Index` je typ pro indexování maticových prvků.
- `ElementsOrganization` definuje organizaci matice v paměti:
  - `TNL::Algorithms::Segments::RowMajorOrder` je uložení po řádcích - defaultní pro CPU,
  - `TNL::Algorithms::Segments::ColumnMajorOrder` je uložení po sloupcích - defaultní pro GPU.
- `RealAllocator` je alokátor pro maticové prvky.

Matice v TNL - husté matice

Nastavení maticových prvků:

```
template< typename Device >
void initializerListExample()
{
   TNL::Matrices::DenseMatrix< double, Device > matrix {
      {  1,  2,  3,  4,  5,  6 },
      {  7,  8,  9, 10, 11, 12 },
      { 13, 14, 15, 16, 17, 18 }
   };

   std::cout << "General dense matrix: " << std::endl << matrix << std::endl;

   TNL::Matrices::DenseMatrix< double, Device > triangularMatrix {
      {  1 },
      {  2,  3 },
      {  4,  5,  6 },
      {  7,  8,  9, 10 },
      { 11, 12, 13, 14, 15 }
   };

   std::cout << "Triangular dense matrix: "
             << std::endl << triangularMatrix << std::endl;
}
```

Matice v TNL - husté matice

Nastavení maticových prvků:

```
1  template< typename Device >
2  void addElements()
3  {
4     TNL::Matrices::DenseMatrix< double, Device > matrix( 5, 5 );
5
6     for( int i = 0; i < 5; i++ )
7        matrix.setElement( i, i, i );
8
9     std::cout << "Initial matrix is: " << std::endl << matrix << std::endl;
10
11    for( int i = 0; i < 5; i++ )
12       for( int j = 0; j < 5; j++ )
13          matrix.addElement( i, j, 1.0, 5.0 );
14
15    std::cout << "Matrix after addition is: " << std::endl << matrix << std::endl;
16 }
```

Matice v TNL - husté matice

Nastavení maticových prvků:

```
template< typename Device >
void forRowsExample()
{
   using MatrixType = TNL::Matrices::DenseMatrix<double, Device>;
   using RowView = typename MatrixType::RowView;
   const int size = 5;
   MatrixType matrix( size, size );

   // Set the matrix elements.
   auto f = [] __cuda_callable__ ( RowView& row ) {
      const int& rowIdx = row.getRowIndex();
      if( rowIdx > 0 )
         row.setValue( rowIdx - 1, -1.0 );
      row.setValue( rowIdx, rowIdx + 1.0 );
      if( rowIdx < size - 1 )
         row.setValue( rowIdx + 1, -1.0 );
   };
   matrix.forAllRows( f );
   std::cout << matrix << std::endl;

   // Now divide each matrix row by its largest element.
   matrix.forAllRows( [] __cuda_callable__ ( RowView& row ) {
      double largest = std::numeric_limits< double >::lowest();
      for( auto element : row )
         largest = TNL::max( largest, element.value() );
      for( auto element : row )
         element.value() /= largest;
   } );
   std::cout << matrix << std::endl;
}
```

Matice v TNL - řídké matice

Řídká matice je v TNL definována jako:

```
1  template<
2      typename Real = double,
3      typename Device = TNL::Devices::Host,
4      typename Index = int,
5      typename MatrixType =
6          TNL::Matrices::GeneralMatrix,
7      typename Format =
8          TNL::Algorithms::Segments::CSR>
9  class TNL::Matrices::SparseMatrix;
```

- `Real` je typ maticových prvků.
  - pro `bool` jde o binární matice, které neukládají hodnoty prvků
- `Device` je typ zařízení, na kterém bude matice alokována.
- `Index` je typ pro indexování maticových prvků.

- `MatrixType` může být:
  - `TNL::Matrices::GeneralMatrix`
  - `TNL::Matrices::SymmetricMatrix`
- jak formát lze použít např.
  - Ellpack
  - Sliced Ellpack
  - Chunked Ellpack
  - Bisection Ellpack
  - CSR - scalar, vector, light
  - Adaptive CSR

Matice v TNL - řídké matice

Nastavení maticových prvků:

```
template< typename Device >
void initializerListExample()
{
   TNL::Matrices::SparseMatrix< double, Device > matrix1 (
      5, // number of matrix rows
      5, // number of matrix columns
      {  // matrix elements definition
         {  0,  0,  2.0 },
         {  1,  0, -1.0 }, {  1,  1,  2.0 }, {  1,  2, -1.0 },
         {  2,  1, -1.0 }, {  2,  2,  2.0 }, {  2,  3, -1.0 },
         {  3,  2, -1.0 }, {  3,  3,  2.0 }, {  3,  4, -1.0 },
         {  4,  4,  2.0 } } );

   std::cout << "General sparse matrix: " << std::endl << matrix1 << std::endl;

   TNL::Matrices::SparseMatrix< double, Device > matrix2( 5, 5 );
   matrix2.setElements( {
      {  0,  0,  2.0 },
      {  1,  0, -1.0 }, {  1,  1,  2.0 }, {  1,  2, -1.0 },
      {  2,  1, -1.0 }, {  2,  2,  2.0 }, {  2,  3, -1.0 },
      {  3,  2, -1.0 }, {  3,  3,  2.0 }, {  3,  4, -1.0 },
      {  4,  4,  2.0 } } );

   std::cout << "General sparse matrix: " << std::endl << matrix2 << std::endl;
}
```

Matice v TNL - řídké matice

Nastavení maticových prvků:

```
1  template< typename Device >
2  void initializerListExample()
3  {
4     std::map< std::pair< int, int >, double > map;
5     map.insert( std::make_pair( std::make_pair( 0, 0 ),  2.0 ) );
6     map.insert( std::make_pair( std::make_pair( 1, 0 ), -1.0 ) );
7     map.insert( std::make_pair( std::make_pair( 1, 1 ),  2.0 ) );
8     map.insert( std::make_pair( std::make_pair( 1, 2 ), -1.0 ) );
9     map.insert( std::make_pair( std::make_pair( 2, 1 ), -1.0 ) );
10    map.insert( std::make_pair( std::make_pair( 2, 2 ),  2.0 ) );
11    map.insert( std::make_pair( std::make_pair( 2, 3 ), -1.0 ) );
12    map.insert( std::make_pair( std::make_pair( 3, 2 ), -1.0 ) );
13    map.insert( std::make_pair( std::make_pair( 3, 3 ),  2.0 ) );
14    map.insert( std::make_pair( std::make_pair( 3, 4 ), -1.0 ) );
15    map.insert( std::make_pair( std::make_pair( 4, 4 ),  2.0 ) );
16
17    TNL::Matrices::SparseMatrix< double, Device > matrix1( 5, 5, map );
18    TNL::Matrices::SparseMatrix< double, Device > matrix2( 5, 5 );
19    matrix2.setElements( map );
20
21    std::cout << "General sparse matrix: " << std::endl << matrix1 << std::endl;
22 }
```

Matice v TNL - řídké matice

Nastavení maticových prvků:

```
template< typename Device >
void forRowsExample()
{
   /***
    * Set the following matrix (dots represent zero matrix elements):
    *   /  2  .  .  .  . \
    *   |  1  2  1  .  . |
    *   |  .  1  2  1  . |
    *   |  .  .  1  2  1 |
    *   \  .  .  .  .  2 /
    */
   const int size( 5 );
   using MatrixType = TNL::Matrices::SparseMatrix< double, Device >;
   using RowView = typename MatrixType::RowView;
   MatrixType matrix( { 1, 3, 3, 3, 1 }, size );

   // Set the matrix elements.
   auto f = [] __cuda_callable__ ( RowView& row ) {
      const int rowIdx = row.getRowIndex();
      if( rowIdx == 0 )
         row.setElement( 0, rowIdx, 2.0 );      // diagonal element
      else if( rowIdx == size - 1 )
         row.setElement( 0, rowIdx, 2.0 );      // diagonal element
      else
      {
         row.setElement( 0, rowIdx - 1, 1.0 ); // elements below the diagonal
         row.setElement( 1, rowIdx, 2.0 );     // diagonal element
         row.setElement( 2, rowIdx + 1, 1.0 ); // elements above the diagonal
      }
   };
   matrix.forAllRows( f );
   std::cout << matrix << std::endl;

   // Divide each matrix row by a sum of all elements in the row.
   matrix.forAllRows( [] __cuda_callable__ ( RowView& row ) {
      double sum = 0.0;
      for( auto element : row )
         sum += element.value();
      for( auto element: row )
         element.value() /= sum;
   } );
   std::cout << matrix << std::endl;
}
```

Matice v TNL - redukce

Matice v TNL nabízí flexibilní redukci v rámci maticových řádků:

- Příklad pro násobení husté matice s vektorem.
- Příklad pro výpočet maximové normy husté matice.
- Příklad pro násobení řídké matice s vektorem.