

Weekly Research Progress Report

Student: 丛 兴 Date: 2023/12/21 - 2024/1/16

List of accomplishments this week

1. 整理之前所有的周报以及相关论文，共享到北航云盘
2. 建立一个项目专门的 github 仓库，仓库地址为：<https://github.com/BUAAer-xing>
3. 梳理 2023 年所学到的知识，整理所总结的笔记，并利用 github 搭建了一个博客（博客地址为：<https://buaaer-xing.github.io>），记录每一篇论文的笔记、周报和相关技术。
4. 阅读 HiCOO 篇论文

Paper summary

Name: HiCOO-Hierarchical Storage of Sparse Tensors

Motivation: 数据张量通常是稀疏的，因此并不需要显式存储或操作，而如何选择稀疏张量的数据结构对于后面的计算至关重要，目前，影响数据结构选择的两个关键问题是紧凑性和模式定向，如果要求结构是紧凑的，则需要对固定方向上的坐标进行压缩，类似于 csr 格式，但是大多数进行张量计算时，需要按照多个方向进行遍历张量，为了保证效率，需要存储多个方向压缩的副本，但这样虽然结构紧凑了，存储空间却大了，因此采用 coo 格式进行存储可以对多个方向的遍历计算具有一定的通用性，但 coo 格式不紧凑，为此，该团队想要提出一种新的存储张量的数据结构，来实现更加通用并且紧凑的存储。

Solution: 该团队的解决方法是提出一个层级坐标格式-HiCOO，类似于 cache 中的组相联映射，利用固定大小的块对整个张量中的非零元素进行分块处理，使得多个非零元的坐标统一可以由一个大块的坐标来进行表示，然后用极少 bit 来指示每个小块中非零元所在位置，这样就使结构更加紧凑，同时可以借助公式，实现从 HiCOO 到 COO 格式的快速转化。

Related to us: 为新的数据结构存储方式开拓新的思路

Work summary

1. 整理周报以及相关论文，共享到北航云盘

在北航云盘中主要保存阅读过的相关论文、提交的周报以及和实验室项目相关的文档。



图 1 共享到北航云盘的资料

2. 建立项目专门的 Github 仓库

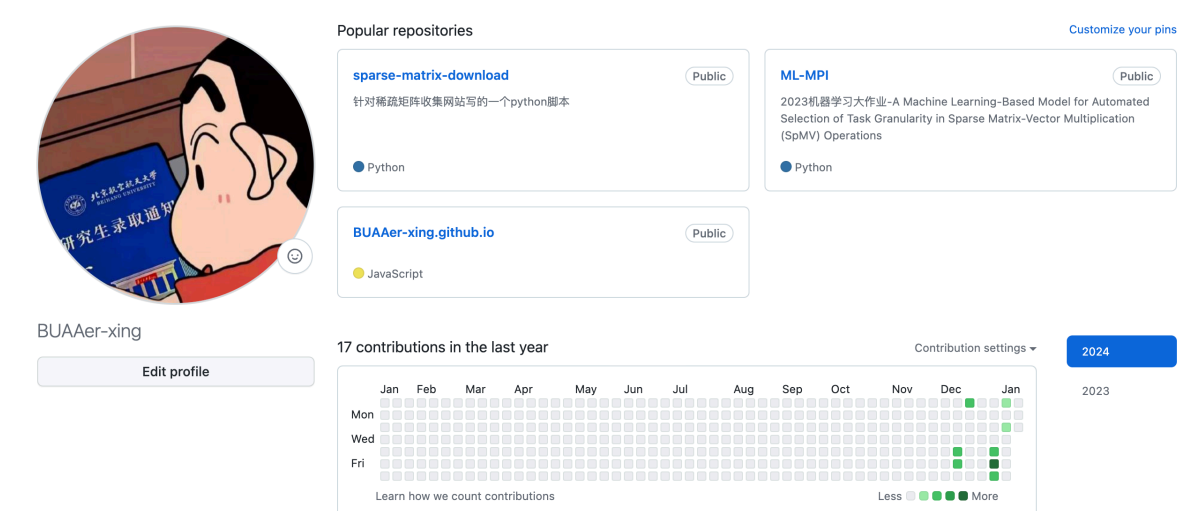


图 2 硕士研究生阶段的 github 仓库

仓库中上传了从稀疏矩阵网站获取资源的脚本、上次 ML 课程的源代码以及博客搭建的源代码。

3. 利用 github 搭建博客

博客地址：<https://buaaer-xing.github.io>

梳理 2023 年所学到的知识，整理所总结的笔记，并利用 github 搭建了一个博客，记录每一篇论文的笔记、周报和相关技术。方便以后的复习以及知识的继承。

笔记说明

HYCOM >

LU >

说明

A Communication-Avoiding 3D LU Factorization Algorithm for Sparse Matrices >

A communication-avoiding 3D sparse triangular solver >

Making Sparse Gaussian Elimination Scalable by Static Pivoting >

Pangu LU A Scalable Regular Two-Dimensional Block-Cyclic Sparse Direct Solver on Distributed Heterogeneous Systems >

Kernel >

未分类 >

说明

论文概况

标题	主要内容
A Communication-Avoiding 3D LU Factorization Algorithm for Sparse Matrices	借鉴 2.5D dense LU 算法的思想，将二维进程 grid 映射到三维 block 上面，本方法在进行映射时，借助 eliminate-tree(e-tree)的结构进行映射，将各个子树上所需要的父节点数据进行拷贝到每一个层上面，并行计算每个层的 schur-complement，最后将计算好的所有子树进行通信，合并到根节点上，也就是说，利用空间换时间的方式，实现通信量的减少，因此每层子树所需要的数据都已经拷贝一份了。
A communication-avoiding 3D sparse triangular solver	团队实现该求解器的思想和实现三维 LU 分解的思想基本一致，都是利用 etree 中所涉及的依赖关系，然后对每个式子中可以独立进行计算的部分进行细分，经过拷贝共同需要的数据后，实现各个部分的并行计算，从而减少通信和计算时间。即，也是通过空间换取时间的措施，来实现直接求解器的加速操作。
Making Sparse Gaussian Elimination Scalable by Static Pivoting	通过各种技术来保持数值稳定性：预先将大元素转移到对角线上、迭代细化以及允许在最后一行进行迭代的修改等。文章还实现了基于 static pivoting 的 SuperLU_dist 算法以及三角求解器算法。
Pangu LU A Scalable Regular Two-Dimensional Block-Cyclic Sparse Direct Solver on Distributed Heterogeneous Systems	提出一种新的直接求解器用于分布式异构系统的 $Ax = b$ 的求解——PanguLU，它使用规则的二维区块进行布局，并以块内稀疏子矩阵为基本单元，构建了一种新的分布式稀疏 LU 分解算法。由于存储的矩阵块是稀疏的，因此利用稀疏 BLAS 进行计算，进而避免不必要的填充，并优化稀疏属性，使得计算更加高效。

图 3 各个论文的阅读笔记

4. HiCOO 论文

(1) 提出的背景

在面向张量的数据分析中，一个核心问题是选择什么样的数据结构来组织张量，数据张量通常是稀疏的，即大部分条目为零，并不需要显式存储或操作。因此，选择稀疏张量数据结构的问题类似于经典问题之一：如何选择稀疏矩阵格式。

影响格式选择的两个关键问题是 **紧凑性**和 **模式定向**。

- 紧凑性指的是保持总字节数较小。
- 模式定向是指一种格式是否偏好以特定顺序迭代张量模式。比如，二维矩阵的 CSR 压缩存储（行：mode-1，列：mode-2）特定顺序为 $1 < 2$ ，而在 CSC 压缩存储中，特定顺序为 $2 < 1$ 。

扩展到张量中，有 CSF(compressed sparse fiber)，因为稀疏张量分析方法在同一计算过程中可能需要对某个方向进行**多次迭代**。对于固定的存储格式，在一种方向上迭代可能很快，但在方向切换时可能变慢。对于低阶（小 N）张量（例如矩阵），存储多个矩阵副本以缓解这种影响可能是可行的。例如，可以将矩阵以 CSR 和 CSC 格式进行存储，并在需要时使用适当的格式，因此阶数不再重要。但对于张量，随着阶数 N 的增长，多副本策略可能会变得不可行。

稀疏张量的最简单、也或许是最受欢迎的存储格式是 COO 格式。COO 存储不是模式特定的，而是通用模式。但是，这种格式（COO）不如 CSF 等格式紧凑，因为 CSF

可以利用方向特异性来减少每个非零项的平均索引元数据量（即 **ik** 值）。就是压缩横坐标的存储或者压缩纵坐标的存储空间。

所以该文章提出了一种新的格式-**HiCOO**，试图实现既紧凑又通用的张量存储格式。

(2) 对三种格式进行理论分析

根据紧凑性和模式取向的标准，以及它们对张量计算（比如 **MTTKRP**）的预期行为，对 **COO**、**CSF** 和 **F-COO** 格式进行了比较和分析。

TABLE II
THE ANALYSIS OF TENSOR FORMATS AND THEIR MTTKRP ALGORITHMS FOR A THIRD-ORDER TENSOR ($N = 3$) WITH M NONZERO ENTRIES. THE WORD SIZE PARAMETERS ARE $\beta_{\text{INT}} = 32$, $\beta_{\text{LONG}} = 64$, $\beta_{\text{BYTE}} = 8$, AND $\beta_{\text{FLOAT}} = 32$ BITS FOR SINGLE-PRECISION FLOATING-POINT VALUES AND DISCARDING INSIGNIFICANT ITEMS.

Format	Data Structure Index Space (Bits)	Update Needed?	Work (Flops)	MTTKRP Behavior Memory Access (Bytes)	Arithmetic Intensity (AI)
COO	$96M$	NO	$3MR$	$12MR$	$1/4$
F-COO	$65M$	YES	$3MR$	$12MR$	$1/4$
CSF	$[32M, 128M]$	YES ¹	$[2MR, 4MR]$	$[8MR, 16MR]$	$1/4$
HiCOO	$[24M, 184M]$	NO	$3MR$	$\min\{\frac{12}{c_b}, 12\}MR$	$\max\{\frac{1}{4}, \frac{c_b}{4}\}$

¹ MTTKRP in all tensor modes can use less CSF representations than tensor order or even only one CSF representation with performance payoff.

图 4 几种存储格式的对比分析结果

- **COO 格式**：将每个非零值与其所有位置索引一起存储
- **CSF 格式**：CSF（压缩稀疏 fiber）是一种分层的、以 fiber 为中心的格式，有效地将 CSR 矩阵格式推广到张量。CSF 将非零值组织成树形结构。每个级别对应一个

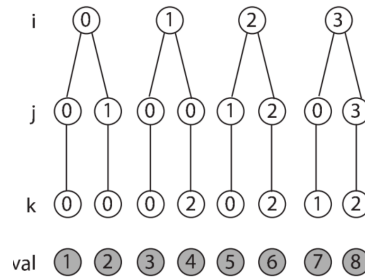


图 5 CSF-1 格式举例

张量模式，每个非零值都是从根节点到叶子节点的路径。由于路径暗示了枚举非零值的模式顺序，**CSF** 具有很强的模式特异性。对于一个 N 阶张量，如果需要在每个模式中迭代多次进行张量操作以获得最佳性能，则需要 N 个 **CSF** 树，如 [35] 所述。类比的情况是，在计算中既需要并行矩阵-向量乘法又需要矩阵转置-向量乘法，并且没有写冲突；一种简单快速的方法是按照前人的研究，将矩阵同时存储为 **CSR** 和 **CSC** 格式，但这会使空间成本加倍。然而，存储多个 **CSF** 树会消耗大量额外的存储空间。

- **F-COO 格式**：像 **COO** 一样，**F-COO** 存储非零张量元素。然而，**F-COO** 不受负载不平衡的影响，并且在不同模式的稀疏张量上运行时能保持最大的平行度。而且，

与 COO 类似，F-COO 对底层稀疏张量结构的不规则性不敏感。F-COO 使用两个

	bf	j	k	val
sf[0]=1	1	0	0	1
	0	1	0	2
	1	0	0	3
	0	0	2	4
sf[1]=1	1	1	0	5
	0	2	2	6
	1	0	1	7
	0	3	2	8

图 6 F-COO 格式

标志数组，即位标志 (bf) 和起始标志 (sf)。

- bf 数组用于表示索引模式的任何更改，从而显示计算已切换到另一个 fiber (在 SpTTM 中) 或切换到另一个 slice (在 SpMTTKRP 中)。
- F-COO 还配备了一个起始标志 (sf)，用于指示新的开始是否在当前分区内。

(3) HiCOO 格式的转换过程

首先总结 HiCOO 格式的特点：就是以稀疏张量块为单位压缩张量索引，并利用较短的整数类型来表示块内的偏移量，从而实现整体的紧凑性并保持 COO 本身的通用性。

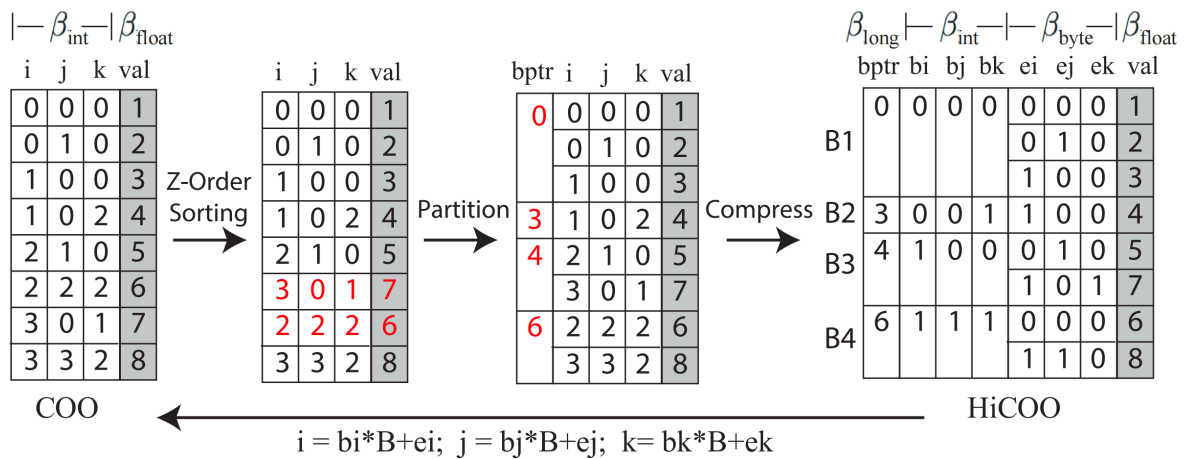


图 7 从 COO 格式转换为 HiCOO 格式的过程

从 COO 转换为 HiCOO 的三个步骤：

• 排序

- 使用快速排序的变体，按 **Z-Morton** 顺序对 COO 张量的所有非零值进行排序

- * Morton 码是一种将多维空间中的坐标映射到一维空间的方法，它与 Z-Morton 曲线有关联。在 Morton 码中，相邻的多维坐标被编码为相邻的一维索引，这种编码方式使得在多维空间中的数据能够以线性方式进行存储和访问。
- * Z-Morton 曲线和 Morton 码的特点使得它们在空间索引数据结构（比如四叉树、八叉树等）、并行计算、以及一些计算几何算法中有着广泛的应用，因为它们能够有效地处理多维数据，并提供高效的访问方式。

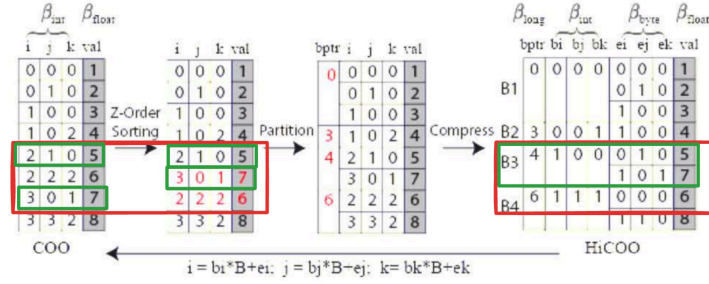


图 8 经过排序后的对比

- 进行完该步骤以后，可以使得相邻块的坐标在转换为 HiCOO 坐标格式时，也在相邻，为后面的压缩做准备。

• 分割

- 通过给定的块大小，对已知的大张量块进行划分、分割。

• 压缩

- 最后，将 COO 指标相应地压缩为块指标和块内元素指标。

同时，转换为 HiCOO 坐标格式后，之后并不需要再将其转换回 COO 格式，直接利用下方的公式，直接可以由 HiCOO 格式得到 COO 格式，从而使得 HiCOO 格式存储的矩阵直接参加运算。

$$i = b_i \cdot B + e_i$$

$$j = b_j \cdot B + e_j$$

$$k = b_k \cdot B + e_k$$

HiCOO 格式存储的 value 值仍然是 COO 格式下存储的 value 值。

说明：

- b_i, b_j, b_k 指示的是块指针，它的存储类型是 int 类型（64 位）
- e_i, e_j, e_k 指示的是块内位置，它的存储类型是 byte 类型（8 位）
- $bptr$ 数组中的元素的存储类型为 long 类型，它存储的是每个块的开始位置

综上所述，在 HiCOO 格式中，Z-Morton 排序为张量算法提供了更好的**数据局部性**，而压缩索引节省了**稀疏张量的存储空间**，同时也**减少了张量访问的存储带宽**。

(4) 加速 MTTKRP 操作

通过使用超级块调度器和两种并行化策略，在基于 HICOO 的多核 CPU 架构上加速 MTTKRP。将**一组小块分组成一个大而逻辑的超级块**。超级块中的块总是一起调度并分配给单个线程。在超级块中，以相同模式物理存储非零。

Next

读 `linpack` 的相关使用和源代码，在源代码的基础上进行相关论文实现的改进，观察效果。

继续阅读 `Optimizing High-Performance Linpack for Exascale Accelerated Architectures` 这篇论文。