

Grundlagenpraktikum: Rechnerarchitektur

Technische Universität München
TUM School of Computation, Information and Technology

Prof. Dr. rer. nat. Martin Schulz

München, 22.08.2024





Multiplikation dünnbesetzter Matrizen: CSC

Felipe Escallon, Jakob Friedrich, Alejandro Tellez München, 22.08.2024





Inhaltsübersicht

- Matrixmultiplikation
 - Multiplikation vollbesetzter Matrizen
 - Compressed Sparse Column (CSC) Format
 - Vor- und Nachteile des CSC-Formats
- Parsing und I/O
 - Datenstrukturen für Matrizen
 - Korrektheit
- Implementierung der Matrixmultiplikation
 - Skalarprodukte
 - Multiplikation mit transponierter Matrix
- Performanzanalyse



Matrixmultiplikation

Felipe Escallon, Alejandro Tellez, Jakob Friedrich München, 22.08.2024





Multiplikation vollbesetzter Matrizen

$$c_{ik} = \sum_{j=1}^{m} a_{ij} \cdot b_{jk}$$

Spaltenzahl von A muss mit der Zeilenzahl von B übereinstimmen

Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 4 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 * 0 + 0 * 6 + 0 * 0 & 0 * 0 + 0 * 0 + 0 * 0 & 0 * 0 + 0 * 0 + 0 * 7 \\ 0 * 0 + 0 * 6 + 0 * 0 & 0 * 0 + 0 * 0 + 0 * 0 & 0 * 0 + 0 * 0 + 0 * 7 \\ 3 * 0 + 0 * 6 + 4 * 0 & 3 * 0 + 0 * 0 + 4 * 0 & 3 * 0 + 0 * 0 + 4 * 7 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 28 \end{pmatrix}$$

Viele unnötige Berechnungen! O(n³)



Compressed Sparse Column (CSC) - Format

Gespeicherte Werte:

- rows, columns Dimensionen
- Values Werte-Array
- rowInd Zeilen-Indizes
- colPtr Pointer auf die Einträge im Werte-Array, an denen neue Spalte startet

Beispiel:

$$\begin{pmatrix}
5 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 6 & 1 & 0 \\
0.5 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 3
\end{pmatrix}$$

```
rows, columns = 4, 4
values = 5, 0.5, 6, 1, 3
rowInd = 0, 2, 1, 1, 3
colPtr = 0, 2, 3, 4, 5
```



Vor- und Nachteile des CSC-Formats

Vorteile:

- Speicherverbrauch
- Speicherzugriffe
- Spaltenoperationen

Nachteile:

- Ineffiziente Zeilenoperationen
- Eventueller Konvertierungs-Overhead
- Verlust der Symmetrie der Matrix (schwieriger, sinnvolle SIMD-Optimierungen zu implementieren)



Parsing und I/O

Felipe Escallon, Alejandro Tellez, Jakob Friedrich München, 22.08.2024





Datenstrukturen für Matrizen

- Daten speichern
- Erleichtung der transponierung
 - colIndices generieren mit get_col_indices

```
struct cscMatrixTranspose {
    uint64_t rows;
    uint64_t columns;
    uint64_t valueCount;
    float* values;
    uint64_t* rowIndices;
    uint64_t* colIndices;
    uint64_t* colPtr;
};
```

```
struct cscMatrix {
    uint64_t rows;
    uint64_t columns;
    uint64_t valueCount;
    float* values;
    uint64_t* rowIndices;
    uint64_t* colPtr;
};
```



Korrektheit

- Falsches Format
 - Values enthält ein oder mehrere Null Werte
 - Falshe anzahl an rowIndices oder colPtr
- Multiplikation nicht möglich
 - Unmögliche Dimensionen
 - Werte außerhalb des Bereichs
- Matrizen voller Nullen

```
LINE | CONTENT
1 | <noRows>,<noCols>
2 | <values>
3 | <row_indices>
4 | <col_ptr>

Beispiel:
4,4
5,0.5,6,1,3
0,2,1,1,3
```

0,2,3,4,5



Implementierung der Matrixmultiplikation

Felipe Escallon, Alejandro Tellez, Jakob Friedrich München, 22.08.2024





Seien A, B Matrizen mit Dimensionen $n \times m$ bzw. $m \times k$.

• Worst-Case für Ergebnis *AB*: $n \times k$ nicht-null Elemente (100% Dichte)

- Größe erst nach Multiplikation bekannt
- malloc(n*k*sizeof(x)) für Elementgröße x nicht optimal
 - Overflows
 - Evtl. können n*k Elemente zwar nicht allokiert werden, aber die tatsächliche Anzahl an Ergebniswerten schon
 - False Positives



Seien A, B Matrizen mit Dimensionen $n \times m$ bzw. $m \times k$.

- Idee: Bessere Abschätzung
- Bspw.: Wenn A eine Nullzeile hat, wird die Ergebniszeile vom gleichen Index auch lauter Nullen haben
 - Analog f
 ür B und Nullspalten

- Falls A n' Nullzeilen und B k' Nullspalten hat, allokiere $(n n') \times (k k')$ Elemente
 - Overflows und False Positives zwar unwahrscheinlicher, aber immer noch anwesend
 - Neues Problem: Overhead von Berechnung von Nullzeilen /-spalten



Seien A, B Matrizen mit Dimensionen $n \times m$ bzw. $m \times k$.

- Weitere Möglichkeit: berechne Anzahl Einträge, die nach Multiplikation ungleich 0 wären
 - Fast so teuer wie tatsächliche Multiplikation
- Lösung: dynamische Reallokierung
 - Trotz Einfügen von Werten im Worst-Case linear, amortisiert immer noch konstant
- Zusätzliche Optimierung: Kleine Anfangsabschätzung



Seien A, B Matrizen mit Dimensionen $n \times m$ bzw. $m \times k$.

- Weitere Möglichkeit: berechne Anzahl Einträge, die nach Multiplikation ungleich 0 wären
 - Fast so teuer wie tatsächliche Multiplikation
- Lösung: dynamische Reallokierung
 - Trotz Einfügen von Werten im Worst-Case linear, amortisiert immer noch konstant
- Zusätzliche Optimierung: Kleine Anfangsabschätzung
- Verdopple Arrays, bis Größe $n \times k$ erricht wird



Slicing von Spalten

- Anfang und Ende einer Spalte in O(1) berechenbar
- i-te Spalte: values und row indices von colPtr[i] bis colPtr[i + 1] exkl.
- Anzahl Elemente in Spalte i: colPtr[i + 1] colPtr[i]



Slicing von Spalten: Beispiel

```
values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2,
rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3,
colPtr: 0, 2, 3, 5, 6
```

Seien v, rI die values und row indices in der gesuchten Spalte.

```
Gesucht: Spalte 2
colPtr[2]: 3
colPtr[2 + 1] = colPtr[3]: 5
v.Length = rI.length = colPtr[3] - colPtr[2] = 2
v = {values[3], values[4]} = {4, 0.3}
rI = {rowInd[3], rowInd[4]} = {1, 2}
```



- values von oben nach unten und von links nach rechts sortiert
- rowInd innerhalb einer Spalte aufsteigend sortiert
- Für Spaltenvektoren a,b: Multiplikation der Einträge in Index i findet genau dann statt, wenn sowohl a.rowInd als auch
 b.rowInd i enthalten
 - Gleichzeitige Traversierung beider Arrays



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 0
   float result = 0;
                                                                            j: 0
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 0 + 3.1*2.5
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 1
   float result = 0;
                                                                            j: 1
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 7.75
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 1
   float result = 0;
                                                                            j: 2
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 7.75
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 2
   float result = 0;
                                                                            j: 2
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 7.75 + 4*5
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 3
   float result = 0;
                                                                            j: 3
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 27.75
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 3
   float result = 0;
                                                                            j: 4
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 27.75
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 3
   float result = 0;
                                                                            j: 5
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 27.75 + 1*0.25
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 4
   float result = 0;
                                                                            j: 6
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 28
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 5
   float result = 0;
                                                                            j: 6
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 28
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 6
   float result = 0;
                                                                            j: 6
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 28
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 7
   float result = 0;
                                                                            j: 6
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 28 + 14
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



```
float scalar prod(const float* aVec, const float* bVec, const uint64 t* aInd,
                   const uint64_t* bInd, uint64_t aLen, uint64_t bLen) {
                                                                            i: 8
   float result = 0;
                                                                            j: 7
   for (uint64_t i = 0, j = 0; i < aLen && j < bLen;) {</pre>
       if (aInd[i] < bInd[j]) {</pre>
                                                                            a.rowInd: {0, 2, 3, 6, 8, 9, 10, 14}
           while (i < aLen && aInd[i] < bInd[j]) ++i;</pre>
                                                                            b.rowInd: {0, 1, 3, 4, 5, 6, 14}
           if (i >= aLen) break;
       } else {
                                                                            a.values: {3.1, 8, 4, 1, 2.1, 6, 0.1, 2}
           while (j < bLen && bInd[j] < aInd[i]) ++j;</pre>
                                                                            b.values: {2.5, 12, 5, 2, 9.4, 0.25, 7}
           if(j >= bLen) break;
                                                                            result: 42
       if (aInd[i] == bInd[j]) {
           result += aVec[i++] * bVec[j++];
   return result;
```



- Klassische Matrixmultiplikation
- Finde Zeilen von A und multipliziere mit Spalten von B
 - Spalten von B durch Slicing einfach zu finden
 - Skalarprodukt mit Slicing
- Innere Schleife iteriert über A, um Struktur von CSC zu folgen

```
A B Result values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3
```



- Klassische Matrixmultiplikation
- Finde Zeilen von A und multipliziere mit Spalten von B
 - Spalten von B durch Slicing einfach zu finden
 - Skalarprodukt mit Slicing
- Innere Schleife iteriert über A, um Struktur von CSC zu folgen

$$\begin{pmatrix}
7 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 4 & 0 \\
1 & 0 & 0.3 & 0 \\
0 & 1.6 & 0 & 2
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
0 & 4 & 0.8 & 0 & 0 \\
9 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 \\
2.3 & 0 & 3 & 0 & 7.7
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
0 \\
0 \\
0
\end{pmatrix}$$

```
A B Result values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3
```



- Klassische Matrixmultiplikation
- Finde Zeilen von A und multipliziere mit Spalten von B
 - Spalten von B durch Slicing einfach zu finden
 - Skalarprodukt mit Slicing
- Innere Schleife iteriert über A, um Struktur von CSC zu folgen

$$\begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 1.6 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 4 & 0.8 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2.3 & 0 & 3 & 0 & 7.7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

```
A B Result values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3
```



- Klassische Matrixmultiplikation
- Finde Zeilen von A und multipliziere mit Spalten von B
 - Spalten von B durch Slicing einfach zu finden
 - Skalarprodukt mit Slicing
- Innere Schleife iteriert über A, um Struktur von CSC zu folgen

$$\begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 1.6 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 4 & 0.8 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 7.7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 4.6 \end{pmatrix}$$

```
A B Result values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: 4.6 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3 rowInd: 3
```



- Klassische Matrixmultiplikation
- Finde Zeilen von A und multipliziere mit Spalten von B
 - Spalten von B durch Slicing einfach zu finden
 - Skalarprodukt mit Slicing
- Innere Schleife iteriert über A, um Struktur von CSC zu folgen

$$\begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 1.6 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 4 & 0.8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2.3 & 0 & 3 & 0 & 7.7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 28 \\ 0 \\ 0 \\ 4.6 \end{pmatrix}$$

```
A B Result values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: 4.6, 28 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3
```



- Klassische Matrixmultiplikation
- Finde Zeilen von A und multipliziere mit Spalten von B
 - Spalten von B durch Slicing einfach zu finden
 - Skalarprodukt mit Slicing
- Innere Schleife iteriert über A, um Struktur von CSC zu folgen

$$\begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 1.6 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 4 & 0.8 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2.3 & 0 & 3 & 0 & 7.7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 28 & 5.6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0.8 & 0.3 & 0 \\ 4.6 & 14.4 & 6 & 0 & 15.4 \end{pmatrix}$$

```
A B Result values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 values: 4.6, 28, 4, 14.4, 5.6, 0.8, 6, 4, 0.3, 15.4 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3
```



Naiver Ansatz: Slicing von B

Spalten von B können in linearer Zeit gefunden werden



Naiver Ansatz: Problem

- Zeilen von A nicht durch Slicing berechenbar
- Idee: Für Zeile r, finde alle Indizes i in A mit rowInd[i] = r
 - rowInd unsortiert → lineare Suche auf alle Elemente der Matrix

```
struct cscRow get row vector(const struct cscMatrix* m, uint64 t index) {
    struct cscRow row = { .values = malloc(sizeof(float)),
        .colIndices = malloc(sizeof(uint64_t))
    uint64 t size = 1;
   if (!row.values || !row.colIndices) {
       free(row.values);
       free(row.colIndices);
       row.values = 0;
       row.colIndices = 0;
       errno = ENOMEM;
        return row;
   for (uint64_t i = 0; i < m->columns; ++i) {
        for (uint64_t j = m->colPtr[i]; j < m->colPtr[i + 1]; ++j) {
           if (m->rowIndices[j] != index) continue;
           if (row.valueCount >= size) {
                size = extend vector(&row.values, &row.colIndices, row.valueCount,
                                     m->columns);
                if (!size) {
                    free(row.values);
                    free(row.colIndices);
                    row.values = 0;
                    row.colIndices = 0;
                    errno = ENOMEM;
                    return row;
            row.values[row.valueCount] = m->values[j];
           row.colIndices[row.valueCount++] = i;
            break;
    return row;
```



Naiver Ansatz: Problem

- Für Ergebnismatrix mit n Einträgen, i.A. n Aufrufe von getRowVector
 - Quadratische Zeit → Hoher Zeitaufwand

```
get col vector(csB->values, csB->rowIndices, bLen, bVec, bInd, start);
 for (uint64 t i = 0; i < csA->rows; ++i) {
     errno = 0;
     struct cscRow row = get row vector(csA, i);
     if (errno) {
         perror("Error getting row vector from a");
         free(bVec);
         free(bInd);
         freeResultPtrs(csResult);
         return;
     float entry = scalar_prod(row.values, bVec, row.colIndices, bInd,
                               row.valueCount, bLen);
```



Naiver Ansatz: Problem

Idee: Für Matrizen A, B Skalarprodukte zwischen Zeilen von A und Spalten von B äquivalent zu Skalarprodukte zwischen
 Spalten von A^T und Spalten von B

```
get col vector(csB->values, csB->rowIndices, bLen, bVec, bInd, start);
 for (uint64 t i = 0; i < csA->rows; ++i) {
     errno = 0;
     struct cscRow row = get row vector(csA, i);
     if (errno) {
         perror("Error getting row vector from a");
         free(bVec);
         free(bInd);
         freeResultPtrs(csResult);
         return;
     float entry = scalar_prod(row.values, bVec, row.colIndices, bInd,
                               row.valueCount, bLen);
```



Transponieren einer CSC Matrix

- colPtr gibt Spaltenindizes an: Eintrag liegt zwischen Indizes colPtr[i] und colPtr[i + 1], gdw. er in Spalte i liegt
- Spaltenindizes in CSC Matrix aufsteigend sortiert

$$\begin{pmatrix}
7 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 4 & 0 \\
1 & 0 & 0.3 & 0 \\
0 & 1.6 & 0 & 2
\end{pmatrix}$$

```
values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2
```

rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3

colPtr: 0, 2, 3, 5, 6

colInd: 0, 0, 1, 2, 2, 3



Transponierung einer CSC Matrix

- colPtr gibt Spaltenindizes an: Eintrag liegt zwischen Indizes colPtr[i] und colPtr[i + 1], gdw. er in Spalte i liegt
- Spaltenindizes colInd in CSC Matrix aufsteigend sortiert
- rowInd in ursprünglicher Matrix äquivalent zu colInd in transponierter Matrix
- values von oben nach unten und von links nach rechts sortiert > Elemente mit gleichem rowInd haben dieselbe Reihenfolge wie im Zeilenvektor

$$\begin{pmatrix}
7 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 4 & 0 \\
1 & 0 & 0.3 & 0 \\
0 & 1.6 & 0 & 2
\end{pmatrix}$$

values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2

rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3

colInd: 0, 0, 1, 2, 2, 3

$$\begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 1.6 & 0 & 2 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 1.6 & 0 & 2 \end{pmatrix}^{T} = \begin{pmatrix} 7 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.6 \\ 0 & 4 & 0.3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

values: 7, 4, 1, 0.3, 1.6, 2

rowInd: 0, 2, 0, 2, 1, 3

colPtr: 0, 2, 3, 5, 6 colPtr: 0, 1, 2, 4, 6

colInd: 0, 1, 2, 2, 3, 3



Transponierung einer CSC Matrix

- Idee: sortiere values, rowInd und colInd nach aufsteigender Sortierung von rowInd
 - Stabiler Sortieralgorithmus nötig
- colling sind neue rowling, neuer colPtr kann durch aufsteigend sortierte, ehemalige rowling in O(|values|) berechnet werden

$$\begin{pmatrix}
7 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 4 & 0 \\
1 & 0 & 0.3 & 0 \\
0 & 1.6 & 0 & 2
\end{pmatrix}$$

values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2

rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3

colInd: 0, 0, 1, 2, 2, 3

$$\begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 1.6 & 0 & 2 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 1.6 & 0 & 2 \end{pmatrix}^{T} = \begin{pmatrix} 7 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.6 \\ 0 & 4 & 0.3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

values: 7, 4, 1, 0.3, 1.6, 2

rowInd: 0, 2, 0, 2, 1, 3

colPtr: 0, 2, 3, 5, 6 colPtr: 0, 1, 2, 4, 6

colInd: 0, 1, 2, 2, 3, 3



Sortierung der Arrays

Anforderungen: stabil, möglichst gute Laufzeit

RadixSort und MergeSort kommen in Frage

Laufzeit: O(kn) für Keylength k bzw. $O(n \log n)$

k hier: Dezimalstellen von $\max_{0 \le i < |rowInd|} rowInd[i]$

MergeSort: evtl. schwierig zu implementieren, hoher Speicheraufwand

RadixSort: aufsteigende Sortierung der rowInd und anhand dieser Reihenfolge values und colInd sortieren Implementierung: Buckets entsprechen verschiedenen rowInd



aufsteigende Sortierung der rowInd und anhand dieser Reihenfolge values und colInd sortieren Implementierung: Buckets entsprechen verschiedenen rowInd

Matrix A

```
values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2
rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3
colInd: 0, 0, 1, 2, 2, 3
```

colPtr: 0, 2, 3, 5, 6

Matrix A^T

```
values: 7, 0, 0, 0, 0, 0
rowInd: 0, 0, 0, 0, 0
colInd: 0, 0, 0, 0, 0
colPtr: Berechnung folgt
```



aufsteigende Sortierung der rowInd und anhand dieser Reihenfolge values und colInd sortieren Implementierung: Buckets entsprechen verschiedenen rowInd

Matrix *A*values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3 colInd: 0, 0, 1, 2, 2, 3 colPtr: 0, 2, 3, 5, 6

```
Matrix A<sup>T</sup>
values: 7, 0, 1, 0, 0, 0
rowInd: 0, 0, 0, 0, 0
colInd: 0, 0, 2, 0, 0, 0
colPtr: Berechnung folgt
```



aufsteigende Sortierung der rowInd und anhand dieser Reihenfolge values und colInd sortieren Implementierung: Buckets entsprechen verschiedenen rowInd

Matrix *A*values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3 colInd: 0, 0, 1, 2, 3

colPtr: 0, 2, 3, 5, 6

```
Matrix A<sup>T</sup>

values: 7, 0, 1, 0, 1.6, 0

rowInd: 0, 0, 0, 0, 1, 0

colInd: 0, 0, 2, 0, 3, 0

colPtr: Berechnung folgt
```



aufsteigende Sortierung der rowInd und anhand dieser Reihenfolge values und colInd sortieren Implementierung: Buckets entsprechen verschiedenen rowInd

Matrix *A*values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3 colInd: 0, 0, 1, 2, 3 colPtr: 0, 2, 3, 5, 6

```
Matrix A<sup>T</sup>
values: 7, 4, 1, 0, 1.6, 0
rowInd: 0, 2, 0, 0, 1, 0
colInd: 0, 1, 2, 0, 3, 0
colPtr: Berechnung folgt
```



aufsteigende Sortierung der rowInd und anhand dieser Reihenfolge values und colInd sortieren Implementierung: Buckets entsprechen verschiedenen rowInd

Matrix *A*values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2 rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3 colInd: 0, 0, 1, 2, 2, 3

colPtr: 0, 2, 3, 5, 6

Matrix A^T

```
values: 7, 4, 1, 0.3, 1.6, 0
rowInd: 0, 2, 0, 2, 1, 0
colInd: 0, 1, 2, 2, 3, 0
```

colPtr: Berechnung folgt



aufsteigende Sortierung der rowInd und anhand dieser Reihenfolge values und colInd sortieren Implementierung: Buckets entsprechen verschiedenen rowInd

Matrix A

```
values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2
rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3
colInd: 0, 0, 1, 2, 2, 3
colPtr: 0, 2, 3, 5, 6
```

Matrix A^T

```
values: 7, 4, 1, 0.3, 1.6, 2
rowInd: 0, 2, 0, 2, 1, 3
colInd: 0, 1, 2, 2, 3, 3
```

colPtr: Berechnung folgt



RadixSort: colPtr

colPtr anhand von colInd mit gleichen Indizes berechnen

Matrix A

```
values: 7, 1, 1.6, 4, 0.3, 2
rowInd: 0, 2, 3, 1, 2, 3
colInd: 0, 0, 1, 2, 2, 3
colPtr: 0, 2, 3, 5, 6
```

Matrix A^T

```
values: 7, 4, 1, 0.3, 1.6, 2
rowInd: 0, 2, 0, 2, 1, 3
colInd: 0, 1, 2, 2, 3, 3
colPtr: 0, 1, 2, 4, 6
```



Multiplikation mit Skalarprodukt zwischen Spalten

- Anfang und Ende beider Vektoren nun in O(1) berechenbar
- Extrahiere Spalten von A und B in linearer Zeit bzgl. Spaltengröße und berechne Skalarprodukt

```
get col vector(csB->values, csB->rowIndices, bLen, bVec, bInd, start);
for (uint64 t i = 0; i < csA->columns; ++i) {
    start = csA->colPtr[i];
    end = csA->colPtr[i+1];
    uint64 t aLen = end-start;
    if (!aLen) continue;
    // get the next A column
    float* aVec = malloc(aLen * sizeof(float));
    uint64_t* aInd = malloc(aLen * sizeof(uint64_t));
    if (!aVec || !aInd) {
        errno = ENOMEM;
        free(aVec);
        free(aInd);
        free(bVec);
        free(bInd);
        freeResultPtrs(csResult);
        fprintf(stderr,
            "\rError allocating memory for row %lu of matrix A.\n", i);
        return;
    get col vector(csA->values, csA->rowIndices, aLen, aVec, aInd,
            start);
```



In-Place Skalarprodukt mit Slicing

- Idee: mit transponiertem Matrix unnötig,
 Spalte vor Berechnung zu finden
 - Auch auf Matrix B anwendbar
- Statt Skalarprodukt zwischen zwei ganze Arrays zu berechnen: zwischen zwei Unterarrays

```
float scalar_prod_in_place(const struct cscMatrix* a, const struct cscMatrix* b,
        uint64 t aStart, uint64 t aEnd, uint64 t bStart, uint64 t bEnd) {
    float result = 0;
    for (uint64_t i = aStart, j = bStart; i < aEnd && j < bEnd;) {</pre>
        if (a->rowIndices[i] < b->rowIndices[j]) {
            while (i < aEnd && a->rowIndices[i] < b->rowIndices[j]) ++i;
            if (i >= aEnd) break;
        } else {
            while (j < bEnd && b->rowIndices[j] < a->rowIndices[i]) ++j;
            if(j >= bEnd) break;
        if (a->rowIndices[i] == b->rowIndices[j]) {
            result += a->values[i++] * b->values[j++];
    return result;
```



In-Place Skalarprodukt mit Slicing

- malloc innerhalb von Schleife vermieden
- Keine Kopien in linearer Zeit nötig

```
float scalar_prod_in_place(const struct cscMatrix* a, const struct cscMatrix* b,
        uint64 t aStart, uint64 t aEnd, uint64 t bStart, uint64 t bEnd) {
    float result = 0:
    for (uint64_t i = aStart, j = bStart; i < aEnd && j < bEnd;) {</pre>
        if (a->rowIndices[i] < b->rowIndices[j]) {
            while (i < aEnd && a->rowIndices[i] < b->rowIndices[j]) ++i;
            if (i >= aEnd) break;
        } else {
            while (j < bEnd && b->rowIndices[j] < a->rowIndices[i]) ++j;
            if(j >= bEnd) break;
        if (a->rowIndices[i] == b->rowIndices[j]) {
            result += a->values[i++] * b->values[j++];
    return result;
```



Genauigkeit

Felipe Escallon, Alejandro Tellez, Jakob Friedrich München, 22.08.2024





Genauigkeit bei Berechnung der Skalarprodukte

- Arithmetik mit Fließkommazahlen immer ungenau
- Möglicher Lösungsansatz: sortiere Produkte von Einträgen und addiere sie aufsteigend

```
a = \{5, 0.05, 8.4, 6.7, 11.8, 2.3\}
b = \{0, 0.01, 0, 7.1, 5.4, 1.7\}
prods = \{0, 0.0005, 0, 47.57, 63.72, 3.91\}
prods_sorted = \{0, 0, 0.0005, 3.91, 47.57, 63.72\}
Result = ((0.0005 + 3.91) + 47.57) + 63.72)
```



Genauigkeit bei Berechnung der Skalarprodukte

- Mehrere Probleme bei Lösungsansatz
- Speicher für Teilergebnisse muss allokiert werden erhohte Speicherverbrauch
- Sortierung von Array: Best-Case O(n log n) (Vergleichsbasiert)
- Addition: O(n)
- Aktuelle Implementierungen: Abweichungen kleiner als 0,001% laut Tests

```
int cmp_float_eq(float a, float b) {
   const float EPSILON = 1e-5;

   if (a == b) return 1;
   float diff = a - b;
   if (diff < 0) diff = -diff;

   if (a == 0 || b == 0) return diff < EPSILON;
   return diff/a < EPSILON;
}</pre>
```



Performanzanalyse

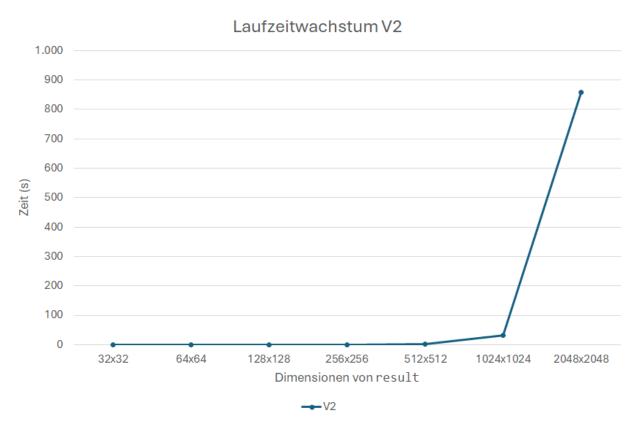
Felipe Escallon, Alejandro Tellez, Jakob Friedrich München, 22.08.2024





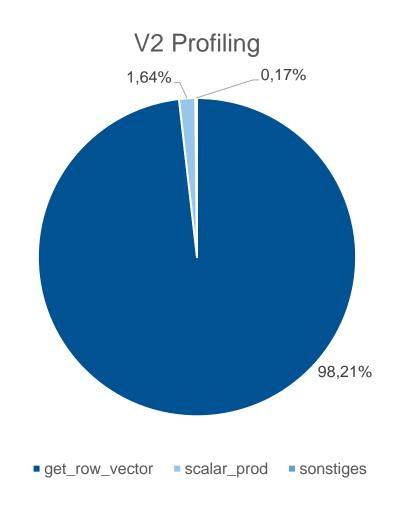
Performanzanalyse: Naive Implementierung (V2) - Laufzeit

- {Quadratische, Kubische, usw} Laufzeit bzgl. Dimensionen der Eingaben
- Bei Produkt zweier 1024 × 1024 Matrizen: {x Zeit} im Schnitt





Performanzanalyse: Naive Implementierung (V2) - Profiling





Performanzanalyse: Naive Implementierung (V2) - Speicher

- 2 Speicherallokationen für jede Spalte von B
 - 2 Allokationen und 2 Freigaben jede Iteration der äußeren Schleife
 - Aber: Größe bekannt, genau eine Allokationsoperation
- 2 Speicherallokationen f
 ür jede Zeile von A
 - Jede Iteration 2 Allokationen und 2 Freigaben
 - Insg. 2 Allokationen f
 ür jeden Eintrag von result
 - Unbekannte Zeilengröße dynamische Reallokation



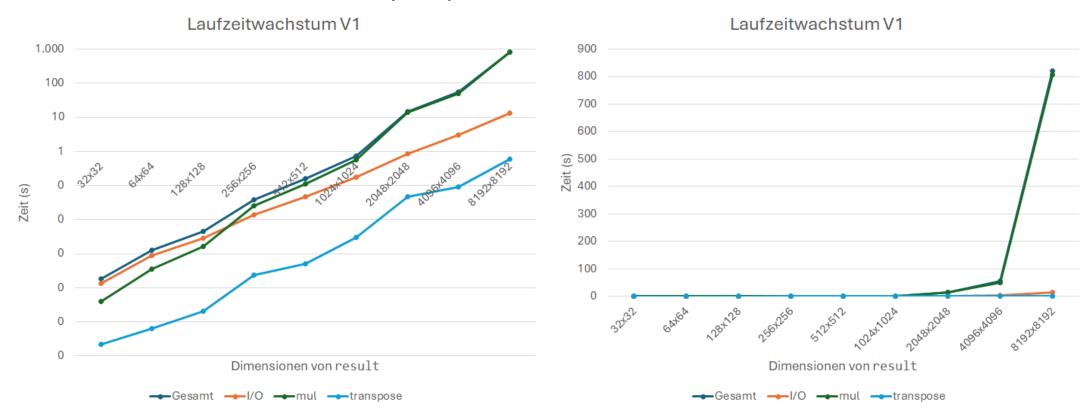
Performanzanalyse: Naive Implementierung (V2) - Speicher





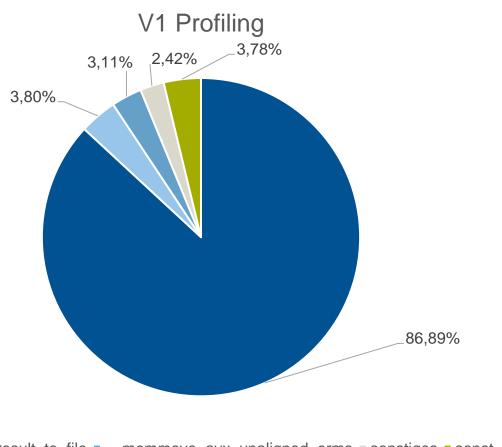
Performanzanalyse: Out-of-place Skalarprodukt mit Transponierung (V1) - Laufzeit

- {Quadratische, Kubische, usw} Laufzeit bzgl. Dimensionen der Eingaben
- Bei Produkt zweier 1024 × 1024 Matrizen: {x Zeit} im Schnitt





Performanzanalyse: Out-of-place Skalarprodukt mit Transponierung (V1) - Profiling



scalar_prod = result_to_file = __memmove_avx_unaligned_erms = sonstiges = sonst. I/O



Performanzanalyse: Out-of-place Skalarprodukt mit Transponierung (V1) - Speicher

- 2 Speicherallokationen f
 ür jede Spalte von B
 - 2 Allokationen und 2 Freigaben jede Iteration der äußeren Schleife
- 2 Speicherallokationen f
 ür jede Spalte von A transponiert
 - Jede Iteraiton 2 Allokationen und 2 Freigaben
 - Insg. 2 Allokationen f
 ür jeden Eintrag von result
 - Größen bekannt, keine Reallokierungen



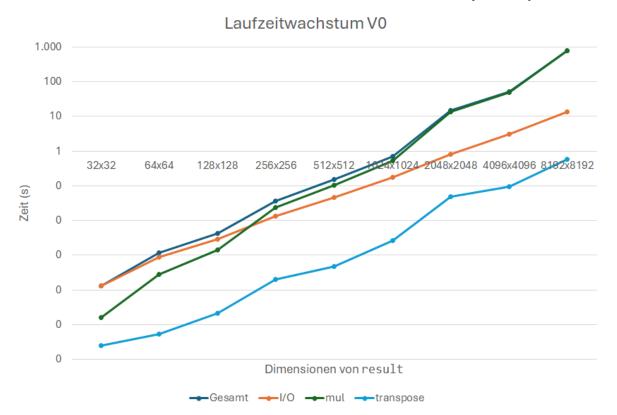
Performanzanalyse: Out-of-place Skalarprodukt mit Transponierung (V1) - Speicher

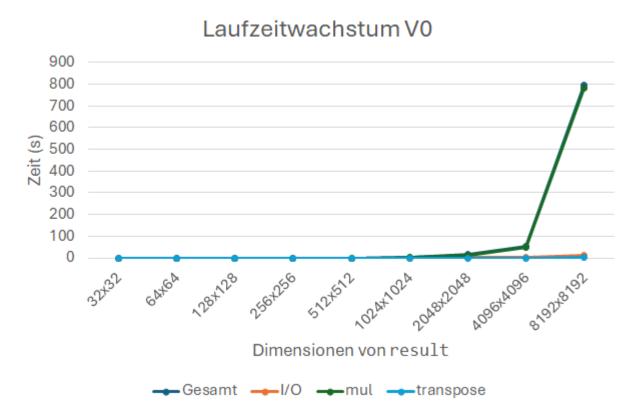




Performanzanalyse: In-place Skalarprodukt mit Transponierung (V0) - Laufzeit

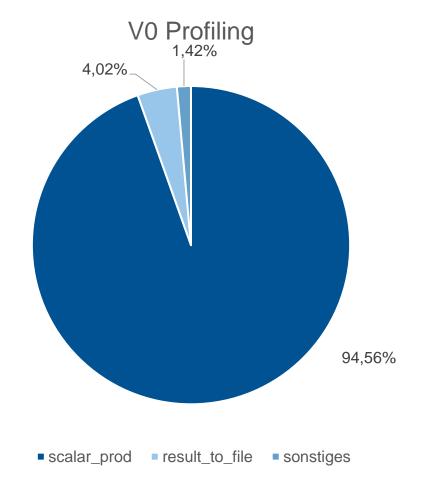
- {Quadratische, Kubische, usw} Laufzeit bzgl. Dimensionen der Eingaben
- Bei Produkt zweier 1024 × 1024 Matrizen: {x Zeit} im Schnitt







Performanzanalyse: In-place Skalarprodukt mit Transponierung (V0) - Profiling



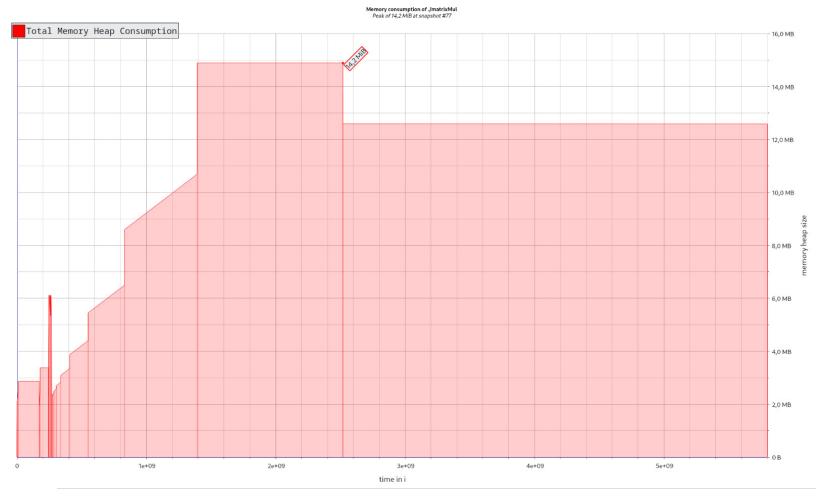


Performanzanalyse: In-place Skalarprodukt mit Transponierung (V0) - Speicher

- Kein Hilfsspeicher nötig
- result zwar mehrmals reallokiert, aber deutlich seltener als Allokationen bei V1 und V2
 - Bsp.: Seien A, B, result 32×32 Matrizen, sodas result vollbesetzt ist (1024 nicht-null Werte)
 - V0: 5 Reallokationen
 - V1, V2: 1024 · 2 = 2048* Allokationen f
 ür Spalten/Zeilen von A und 32 Allokationen f
 ür Spalten von B

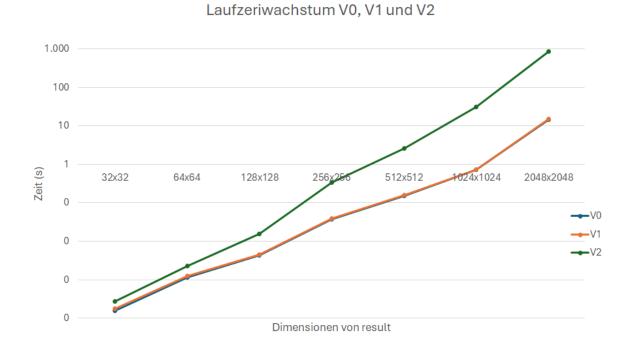


Performanzanalyse: In-place Skalarprodukt mit Transponierung (V0) - Speicher

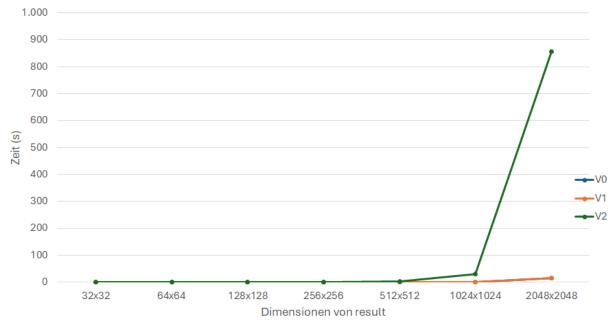




Vergleich

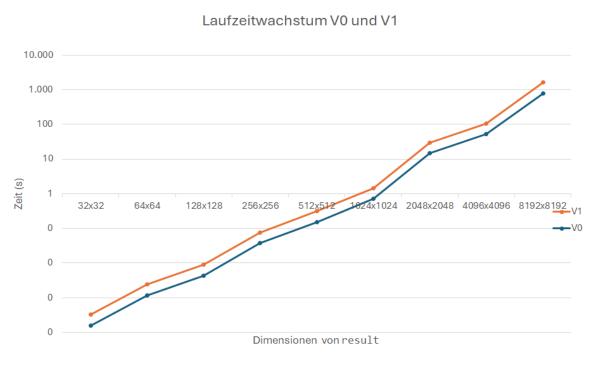


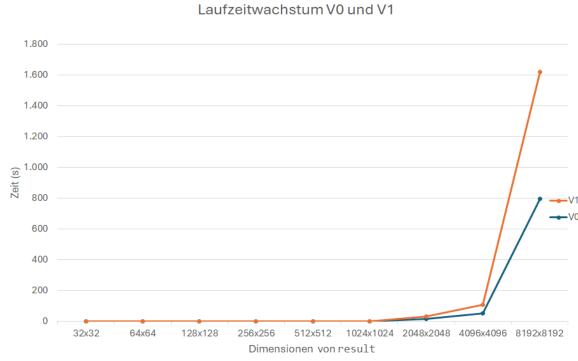
Laufzeriwachstum V0, V1 und V2





Vergleich







Weitere Optimierungsmöglichkeiten

- Skalarprodukt > 90% der Zeit -> andere Teile des Programms lohnen sich nicht
- SIMD umständlich/unmöglich wegen Abwesenheit von Struktur der Vektoren
- Threading



Zusammenfassung/Ausblick

Felipe Escallon, Alejandro Tellez, Jakob Friedrich München, 22.08.2024





Zusammenfassung

- CSC Matrizen sehr effizient für dünnbesetzte Matrizen
 - Aber: Zeilenoperationen langsam
- Alle I/O Operationen: linearer Zeit
 - Keine große Auswirkung auf Laufzeit trotz große Anzahl an Syscalls
- Transponierung der Matrix A vermeidet Zeilenzugriffe und Speicherkopien
 - Radixsort: effiziente stabile Sortierung
 - Für Transposition geeignet
- Produkt zwischen A^T und B durch in-place Spaltenoperationen effizient berechenbar
 - ca. 95% der Laufzeit für Skalarprodukte verwendet



Ausblick

- Weiteroptimierung von Berechnung der Skalarprodukte
 - Schwer vektorisierbar
 - Threading
 - Idee: Trennung von Matrizen und Multiplikation von Teilmatrizen miteinander
 - Problem: Zu schwer zu implementieren
- Weiteroptimierung von Parsing und I/O:
 - SIMD
 - Nicht lohnenswert
 - String concatenation
 - Zeitaufwendig zu implementieren
 - Kann langsamer sein