YÜKSEK BOYUTLU KRONECKER ÇARPIMI İÇİN İŞ PARÇACIĞI TABANLI PARALEL PROGRAMLAMA UYGULAMASI

Ahmet DURAN[1], H.Ünsal ÖZER[1-2], Mehmet TUNÇEL[1-3]

[1] İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Matematik Müh., İstanbul/Türkiye

[2] Yıldız Teknik Üniversitesi, Kimya-Metalurji Fakültesi, Matematik Müh., İstanbul/Türkiye

[3] İstanbul Teknik Üniversitesi, Bilişim Enstitüsü, Hesaplamalı Bil.&Müh., İstanbul/Türkiye

Öz: Kronecker çarpımı sayısal lineer cebir alanında önemli bir yere sahip matris işlemi olup, son yıllarda bilimsel hesaplama yöntemleri içerisinde kullanımı giderek artmaktadır. Bu yöntemlerden bazıları; özdeğer analizi ve problemleri, temel bileşenler analizi, karar verme sistemleri, görüntü işleme, korvaryans tahmini için model oluşturma, sinyal işleme, optimizasyon, quantum hesaplama, hızlı Fourier dönüşümü, stokastik modeller, ağ teori, operatör teori, sistem teori ve fotogrametridir. Bu çarpımda karşılan en büyük sıkıntılardan biri hesaplanan matristeki önemli ölçüdeki boyut artışıdır. Hızla gelişen bilgisayar teknolojileri sayesinde Kronecker çarpımı için yüksek boyutlara çıkma imkânı doğmuştur. Bu durum beraberinde zaman ve hafıza maliyetini getirmiştir. Bu çalışmamızda Kronecker çarpımı için seri programlamada oluşacak zaman maliyetini düşürmek için paralel programlama uygulaması yapılmıştır. Çalışmamız iki yoğun (ing: dense) kare matrisin Kronecker çarpımından yüksek boyutlu Kronecker çarpım matrisini verimli bir şekilde elde etmeye yöneliktir. Bunun için yüksek performanslı bilgisayar siteminden faydalandık. Çalışmamız, seri programlama ve paralel programlama uygulaması içermektedir. İlk olarak Kronecker çarpımı için oluşturulan seri algoritma çalıştırıldı ve istenilen boyutlar için ölçümler yapıldı. Sonrasında seri algoritma CPU'da OpenMP uygulama programlama arayüzü (ing: API) ile paralelleştilerek tekrar ölçüm yapıldı. Bu ölçümlerle birlikte uygulamanın kullanımı ve verimliliği tartışıldı. Sonuç olarak yüksek boyutlu Kronecker çarpım matrisini elde etme çalışmamız bize CPU ile yapılan paralelleştirilmiş algoritma seri algoritmaya göre daha hızlı sonuç verdi. Matris boyutu arttıkça sistemde iş yükü doyuma ulaşarak daha verimli bir şekilde doğrusal hızlanmaya daha yakın bir hızlanma elde edildi.

Anahtar Kelimeler: Kronecker Çarpımı, Paralel programlama, Paylaşımlı Bellekli programlama

GİRİŞ ve KURAMSAL ÇERÇEVE

Kronecker çarpımı, ismini 19. yy.'da yaşamış olan Alman matematikçi Leopold Kronecker'den alan ve sayısal lineer cebir alanında önemli bir yere sahip matris işlemidir. Tarihsel gelişimi için Henderson ve arkadaşlarının çalışmasına bakılabilir (Henderson et al.,1983). Günümüze gelindiğinde ise Kronecker çarpımı bilimsel hesaplama yöntemleri içerisinde kullanımı giderek artmaktadır.

Yüksek boyutlarda kovaryans tahminleri için Kronecker çarpımını temel alan çalışmalar (Tsiligkaridis ve Hero, 2013, Zamanighomi et al., 2016) ve kovaryans tahmini için Kronecker çarpımıyla elde edilen sağlam (ing: robust) model çalışması (Greenewald ve Hero, 2015), ayrıca Kronecker çarpımıyla oluşturulan olasılık modelinin incelenmesi üzerine çalışma (Montúfar ve Morton, 2017) Kronecker çarpımıyla oluşturulan kovaryans matrisleriyle olabilirlik kestirimleri (ing: likelihood estimator) üzerine çalışmalar (Ros et al., 2016) literatürde yer almaktadır.

Tıp alanındaki çalışmalarda elde edilen verileri tensör bazlı yöntem ile sınıflandırılmasında Kronecker çarpımıyla oluşturulan denklemlerin kullanılabileceği öneriliyor (Boussé et al., 2017).

Fonksiyonel teoride (Sharma ve Suryanarayana, 2018), optimizasyon problemlerinde (Anstreicher, 2016), özdeğer analizi yöntemlerinde (Ye, 2017) ve çok parametreli özdeğer problemlerinin çözümünde (Hochstenbach et al., 2018) kullanılmaktadır.

Bu yöntemlerden başka quantum hesaplama, hızlı Fourier dönüşümü, stokastik modeller, operatör teori, sistem teori ve fotogrametri alanlarında da Kronecker çarpımının kullanıldığı görülmektedir. Bu yöntemlerle ilgili 2000 yılı öncesine ait kaynaklar için C. Van Loan'ın makalesine bakılabilir (Van Loan, 2000). Ayrıca son yıllarda ülkemizde yapılan akademik çalışmalarda da bu çarpımın kullanıldığı görülmektedir (Gencoglu, 2015).

$A \in \mathbb{R}^{mxn}$ ve $B \in \mathbb{R}^{pxq}$ matrisleri için Kronecker çarpımı aşağıdaki gibi tanımlanabilir;

$$\boldsymbol{A \otimes B} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a_{11}B} & \cdots & \boldsymbol{a_{1n}B} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{a_{m1}B} & \cdots & \boldsymbol{a_{mn}B} \end{bmatrix}$$

Dolayısıyla, $A \otimes B = \mathbb{R}^{mpxnq}$ olur. Bu çarpımın dikkat çeken önemli özelliklerinden bir tanesi; çarpıma giren matrislerin yapısal özelliklerini çarpım sonucunda oluşan matriste de göstermesidir. Örneğin;

Eğer A ve B $\left\{\begin{array}{c} Bant \\ negatif\ olmayan \\ simetrik \\ pozitif\ tanımlı \\ sitokastik \\ dik \end{array}\right\}$ ise $A \otimes B$ 'de $\left\{\begin{array}{c} Bant \\ negatif\ olmayan \\ simetrik \\ pozitif\ tanımlı \\ sitokastik \\ dik \end{array}\right\}$ olur.

Bu özelliklerle ilgili detay ve ispat için (Van Loan ve Pitsianis, 1993) bakılabilir.

Bu çarpımda karşılan en büyük sıkıntılardan biri hesaplanan matristeki önemli ölçüdeki boyut artışıdır. Örneğin; $n \times n$ boyutlu A ve B yoğun (ing: dense) matrisleriyle oluşturulan Kronecker çarpım matrisinin boyutu $n^2 \times n^2$ olmaktadır. Yüksek boyutlu Kronecker çarpımında oluşacak matris boyutu ve bunun için gerekecek hafıza miktarı ile ilgili birkaç sayısal örneği aşağıdaki Tablo-1'de görülmektedir. (Gereken hafıza miktarı hesaplanırken matris değerlerinin double değişken tipinde olduğu varsayılmıştır.)

Tablo 1. Yüksek Boyutlu Kronecker Çarpımı

Girilen Matrislerin Boyutu (n)	Hesaplanan Kronecker Matris Boyutu (n^2)	Gereken Yaklaşık Hafıza (RAM-GB)
250	62500	30
300	90000	60
350	122500	112
400	160000	190
450	202500	305
500	250000	465

AMAÇ

Hızla gelişen bilgisayar teknolojileri sayesinde Kronecker çarpımı için yüksek boyutlara çıkma imkânı doğmuştur. Bu durum beraberinde zaman ve hafıza maliyetini getirmiştir. Bu çalışmamızda Kronecker çarpımı için seri programlamada oluşacak zaman maliyetini düşürmek için çeşitli paralel uygulamalar yapılmıştır. Bu sayede çalışmamızın Kronecker çarpımını çalışmalarında kullanmak isteyen araştırmacılara fikir vermesi hedeflenmektedir.

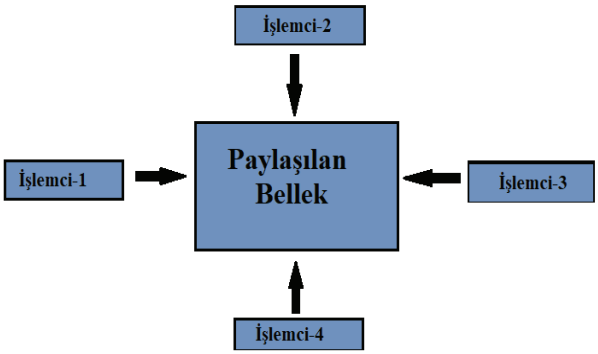
KAPSAM

Çalışmamız iki yoğun (dense) kare matrisin Kronecker çarpımından yüksek boyutlu Kronecker çarpım matrisini verimli bir şekilde elde etmeye yöneliktir. Bunun için yüksek performanslı bilgisayar siteminden faydalandık (UHEM). Çalışmamız seri programlama ve paralel programlama uygulaması içermektedir. Uygulamadan elde edilen ölçümlerle birlikte uygulamanın kullanımı ve verimliliği tartışıldı.

YÖNTEM

Çalışmada elde edilecek Kronecker çarpım matrisleri için Tablo-1'de verilen sayısal örnekler kullanıldı. Yoğun matrislerle ilgili işlemlerde hafıza problemi karşılaşılan en sık sorunlardan biridir. Bu yüzden kullandığımız yüksek başarımlı hesaplama sistemi mimarisindeki hafıza (RAM) miktarı 512GB olmasından dolayı en yüksek 250000×250000'lik Kronecker çarpım matrisini üretebildik. Çarpıma giren matrislerin değerleri rastgele sayı üretme fonksiyonu yardımıyla double değişken tipinde ondalık sayılar olarak üretildi. İlk olarak Kronecker çarpımı için oluşturulan seri algoritması çalıştırıldı ve istenilen boyutlar için ölçümler yapıldı. Sonrasında seri algoritma CPU (Merkezi İşlem Birimi) için paralelleştilerek tekrar ölçüm yapıldı.

Kronecker çarpımının CPU'da paralelleştirilmesi için paylaşımlı bellekli sistemde çoklu işlemcili programlama yapmaya imkân tanıyan OpenMP (Open Multi-Processing) uygulama programlama arayüzü (ing: API) kullanıldı. Bu arayüz ile hesaplanacak olan Kronecker çarpımı işi daha küçük iş parçacıklarına (threads) bölünür. Bu iş parçacıkları işlemcideki çekirdekler tarafından eşzamanlı (paralel) olarak art arda çalıştırılmasıyla tamamlanır. Böylelikle birden fazla işlemciyle gerçekleştirilen işin, tek bir işlemci ile seri olarak yapılmasından daha hızlı sonuç vermesi beklenir.



BULGULAR

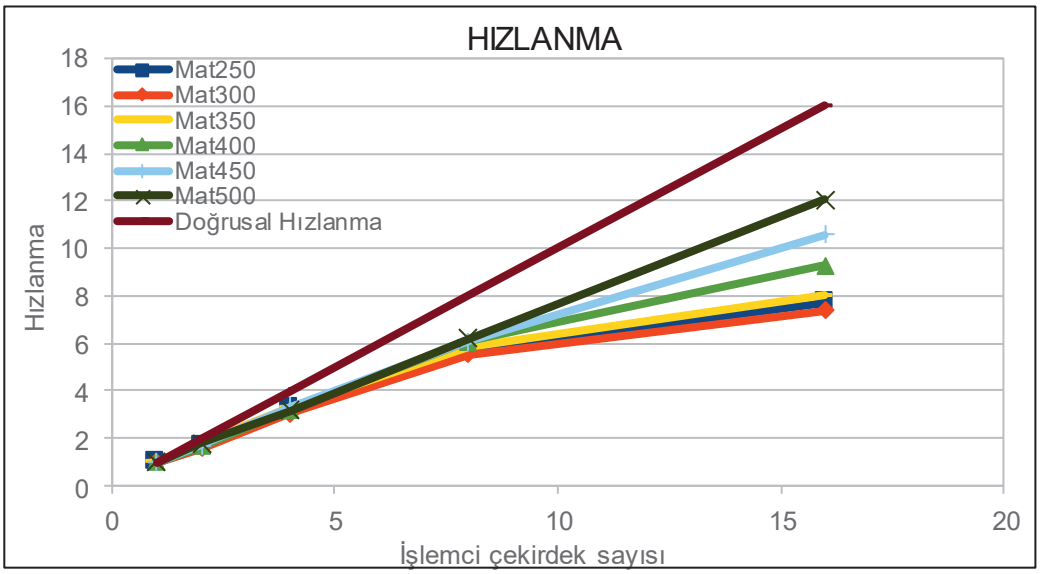
Girilen matris boyutları için ilk seri algoritmayı çalıştırdık ve elde edilen sonuçları Tablo-2'de P=1 sütununda gösterdik. Sonrasında paylaşımlı bellekte paralelleştirme için iş parçacıklarını oluşturup sırası ile işlemcideki P=2, 4, 8 ve 16 çekirdek sayısı ile bu parçacıklar hesaplandı. Bu hesaplamalarda geçen süreleri yine Tablo-2'de ilgili sütun altında belirttik.

Tablo 2. Farklı İşlemci Sayıları ile Kronecker Çarpımının Hesaplama Zamanı (Saniye)

Matris Boyutu	İşlemci Sayısı				
	P=1(Seri)	P=2	P=4	P=8	P=16
250	19.07216033	11.3418413	5.845825	3.327823	2.46706867
300	39.51842933	24.997432	12.95230767	7.158406	5.365380333
350	79.47938833	44.333572	24.19284733	13.545787	9.943914
400	124.764697	74.1020863	38.7578753	20.517901	10.5923313
450	203.7911453	119.247246	60.8003997	33.553354	19.281662
500	321.523908	180.733718	101.469577	51.821677	26.7282333

Tablo-2'de elde sonuçlar bize CPU'da OpenMP ile algoritmada yapılan paralelleştirmenin algoritmanın seri çalışmasından daha etkili bir işlev olduğunu açıkça göstermektedir. Bununla birlikte, işlemcideki çekirdek sayısı arttıkça da çarpım daha hızlı bir şekilde hesaplanabilmektedir. P=16 işlemcinin kullanıldığı hesaplamada, seri hesaplamaya göre yaklaşık 10-12 kata varan hızlanmalar gözlemlenmektedir.

Ayrıca elde edilen hızlanmaların grafiği Şekil-1'de gösterilmektedir. Daha az çekirdek sayılarında hızlanmanın doğrusal hızlanmaya daha yakın olduğu görülmektedir. Artan çekirdek sayısı ile algoritmanın çalışması hızlansa da hızlanma veriminin düştüğü gözlemlenmektedir. Bununla beraber matris boyutunun artması ile doğrusal hızlanmaya yakınlaşmada bir artış olduğu fark edilmektedir.



Şekil 1. Hızlanma Grafiği

Test Ortamı

Seri ve paralel testlerimizi yaptığımız makinaların özellikleri Tablo-4'de gösterilmiştir. Yüksek bellek ihtiyacı gerektiren algoritmalarımız için (UHeM) hesap kaynakları kullanılmıştır.

Tablo-4: CPU Test Makinasının Özellikleri

CPU işlemci tipi	2 x Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2680 v4 @ 2.40GHz
CPU çekirdek sayısı	28
Bellek	512 GB

SONUÇ

Yüksek boyutlu Kronecker çarpım matrisini elde etme çalışmamız bize CPU ile yapılan paralelleştirilmiş algoritmanın seri algoritmaya göre daha iyi sonuç verebileceğini gösterdi. CPU'da yapılan paylaşımlı bellekli paralelleştirmede kullanılan çekirdek sayısının artması ile daha hızlı sonuç elde edildiğini gördük. Ancak, çekirdek sayısının artması hızlanma veriminde düşüşe sebebiyet verdiğini gözlemledik. Diğer bir ifadeyle doğrusal hızlanmadan uzaklaşılmaktadır. Bundan başka, önemli bir sonuç olarak, matris boyutu arttıkça sistemde iş yükü doyuma ulaşarak daha verimli bir şekilde doğrusal hızlanmaya daha yakın bir hızlanma elde edilmektedir. Kronecker çarpımının başka bir paralleştirme uygulaması için Tadonki'nin çalışmasına bakılabilir (Tadonki, 2011).

TEŞEKKÜR

Bu çalışmada kullanılan hesaplama kaynakları Ulusal Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi (UHeM), 4006072019 numaralı desteğiyle sağlanmıştır.

KAYNAKÇA

Henderson, H.V., Pukelsheim, F., Searl, S.R., (1983). On the history of the Kronecker product. Linear Multilinear Algebra, 14: 113-120 Taylor&Francis.

Van Loan, C., (2000). The ubiquitous Kronecker product. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 123: 85-100 Elsevier.

Van Loan, C., Pitsianis, C.F., (1993) Approximation with Kronecker Product. *In: Moonen M.S., Golub G.H., De Moor B.L.R., (eds)*, *Linear Algebra for Large Scale and real-Time Applications*. NATO ASI Series vol 232: 293-314 Springer

Gencoglu, M.T., (2015) Kronecker Solutions for the Matrix Differential Equations. Turkish Journal of Science & Technology Volume 10(1): 59-62

Boussé, M., Goovaerts, G. Vervliet, N., Debals, O., Van Huffel, S., De Lathauwer, L., (2017). Irregular hearthbeat classification using Kronecker Product Equations. *39th Annual Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC)* ss. 438-441, Seogwipo, South Korea

Tsiligkaridis, T., Hero, A.O., (2013). Covariance Estimation in High Dimension via Kronecker Product Expansion. *IEEE Transaction on Signal Processing* Vol. 61, No. 21, ss. 5347-5360. IEEE

Greenewald, K., Hero, A.O., (2015). Robust Kronecker Product PCA for Spatio-Temporal Covariance Estimation. *IEEE Transaction on Signal Processing* Vol. 63, No. 23, ss. 6368-6378. IEEE

Zamanighomi, M., Wang, Z., Giannakis, G.B., (2016). Estimating High-Dimensional Covariance Matrices with Misses for Kronecker Product Expansion Models. *IEEE International Conference on Acoustic, Speech and Signal Processing (ICASSP).* Shanghai, China ss. 2667-2671. IEEE

Montúfar, G., Morton J., (2017). Dimensions of Marginals of Kronecker Product Models. *Journal on Applied Algebra and Geometry.* Vol. 1, ss. 126-151. SIAM

Ros, B., Bijma, F., de Munck, J.C., de Gunst, M.C.M., (2016). Existence and uniqueness of the maximum likelihood estimator for models with a Kronecker product covariance structure. *Journal of Multivariate Analysis.* Vol. 143, ss. 345-361. Elsevier.

Sharma, A., Suryanarayana, P., (2018). On real-space Density Functional Theory for non-orthogonal crystal systems: Kronecker product formulation of the kinetic energy operator. *Chemical Physics Letters.* Vol. 700, ss. 156-162. Elsevier

Anstreicher, K.M., (2016) Kronecker Product Constraint for Semidefinite Optimization. *Optimization Online* http://www.optimization-online.org/DB_FILE/2016/06/5477.pdf (E.T. 09.03.2019)

Ye, H., Mou, Q., Liu, Y., (2017). Enabling Highly Efficient Spectral Discretization-Based Eigen-Analysis Methods by Kronecker Product. *IEEE Transaction Power Systems.* Vol. 32 No. 5, ss. 4148-4150 IEEE

Hochstanbasch, M.E., Meerbergen, K., Mengi, E., Plestenjak, B., (2018). Subspace Methods for 3-Parameter Eigenvalue Problems. *arXiv:1802.07386 [math.NA]* https://arxiv.org/abs/1802.07386

Tadonki, C. (2011) Large scale kronecker product on supercomputers. Second Workshop on Architecture and Multi-Core Applications. IEEE

UHeM, Ulusal Yüksek Başarımlı Hesaplama Merkezi, http://www.uhem.itu.edu.tr/