Oblikovanje i analiza algoritama
4. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Složenost u praksi — eksperimenti (nastavak):
  - Množenje matrica reda n.
  - Blokovsko množenje matrica reda n.

Informacije — kolokviji

Oblikovanje i analiza algoritama je u kolokvijskom razredu D1.

Službeni termini svih kolokvija su:

- Prvi: ponedjeljak, 7. 11. 2011., u 9 sati.
- Drugi: ponedjeljak, 16. 1. 2012., u 9 sati.
- Popravni: ponedjeljak, 30. 1. 2012., u 9 sati.

Množenje matrica

Množenje matrica

Problem: Zadan je prirodni broj $n \in \mathbb{N}$ i 3 matrice A, B i C, reda n. Treba izračunati izraz

$$C := C + A * B.$$

Akumulacija ("nazbrajavanje") produkta $A * B$ u matrici C

- standardni je oblik BLAS–3 rutine `xGEMM` za množenje matrica,

tj. baš ova operacija se često koristi u praksi.

Usput, to će opet

- "prevariti" optimizaciju compilera,

kod višestrukog ponavljanja eksperimenta.

Množenje matrica — formula

"Matematička" realizacija matrične operacije

$$C := C + A * B$$

po elementima je trivijalna:

$$c_{ij} := c_{ij} + \sum_{k=1}^{n} a_{ik} \cdot b_{kj},$$

za sve indekse

$$i = 1, \ldots, n, \quad j = 1, \ldots, n.$$

Dakle, "programski" — treba "zavrtiti" tri petlje.

Množenje matrica — potprogram

```
      subroutine mulijk (lda, n, a, b, c)
c
c   Matrix multiply
c   C(n, n) = C(n, n) + A(n, n) * B(n, n).
c
      implicit none
c
      integer lda, n
      double precision a(lda, lda), b(lda, lda),
     $                 c(lda, lda)
c
      integer i, j, k, nn
```

Množenje matrica — potprogram (nastavak)

```
c
c    IJK loop, inner
c
      nn = n
      do 30, i = 1, nn
         do 20, j = 1, nn
            do 10, k = 1, nn
               c(i, j) = c(i, j) + a(i, k) * b(k, j)
10          continue
20       continue
30    continue
c
      return
      end
```

Permutacija petlji

Ovu varijantu algoritma zovemo `ijk` — opet po poretku (indeksa) petlji, izvana prema unutra.

Sve tri petlje možemo permutirati, tj. napisati ih u bilo kojem poretku. Na taj način dobivamo ukupno 6 varijanti algoritma, koje zovemo leksikografskim redom:

- `ijk`,
- `ikj`,
- `jik`,
- `jki`,
- `kij`,
- `kji`.

Broj operacija

U svakom prolazu kroz unutarnju petlju imamo dvije operacije:

- množenje matričnih elemenata $a_{ik} \cdot b_{kj}$,
- zbrajanje tog produkta s c_{ij}.

Sve tri petlje imaju (svaka) točno n prolaza.

Ukupan broj operacija u svim varijantama algoritma je:

$$F(n) = 2n^3.$$

Broj ponavljanja $N(n)$ izabran je tako da dobijemo približno konstantno trajanje "okolne" petlje (s ponavljanjem) kojoj mjerimo vrijeme, sve dok $N(n)$ ne padne na 1, za $n = 450$.

Boje na grafovima

Legenda za čitanje grafova:

- petlja `ijk` — zeleno, rang 3;
- petlja `ikj` — narančasta, rang 5;
- petlja `jik` — žuta, rang 4;
- petlja `jki` — ljubičasta, rang 1;
- petlja `kij` — crveno, rang 6;
- petlja `kji` — plavo, rang 2.

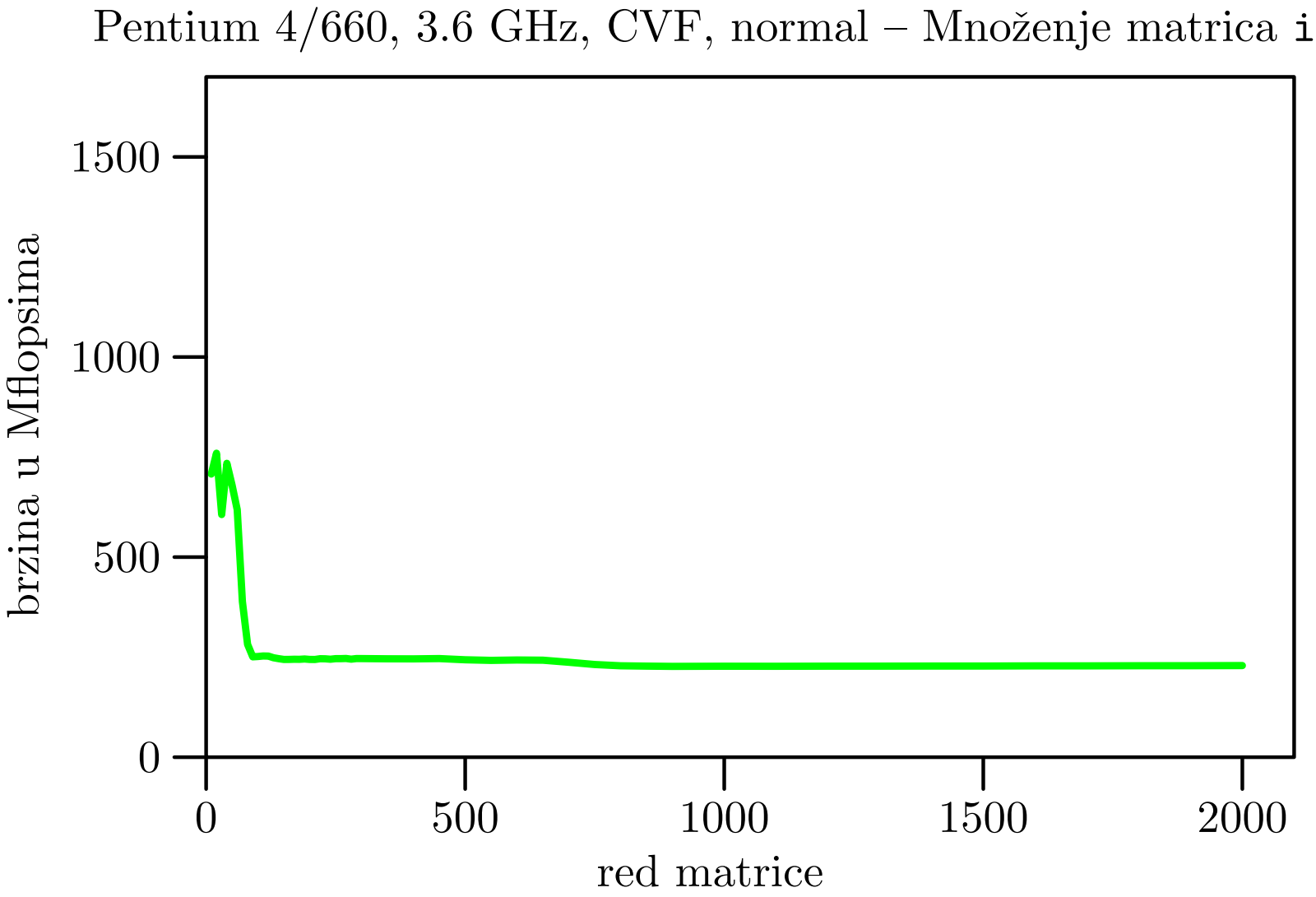
BabyBlue, CVF, normal

Compaq Visual Fortran:

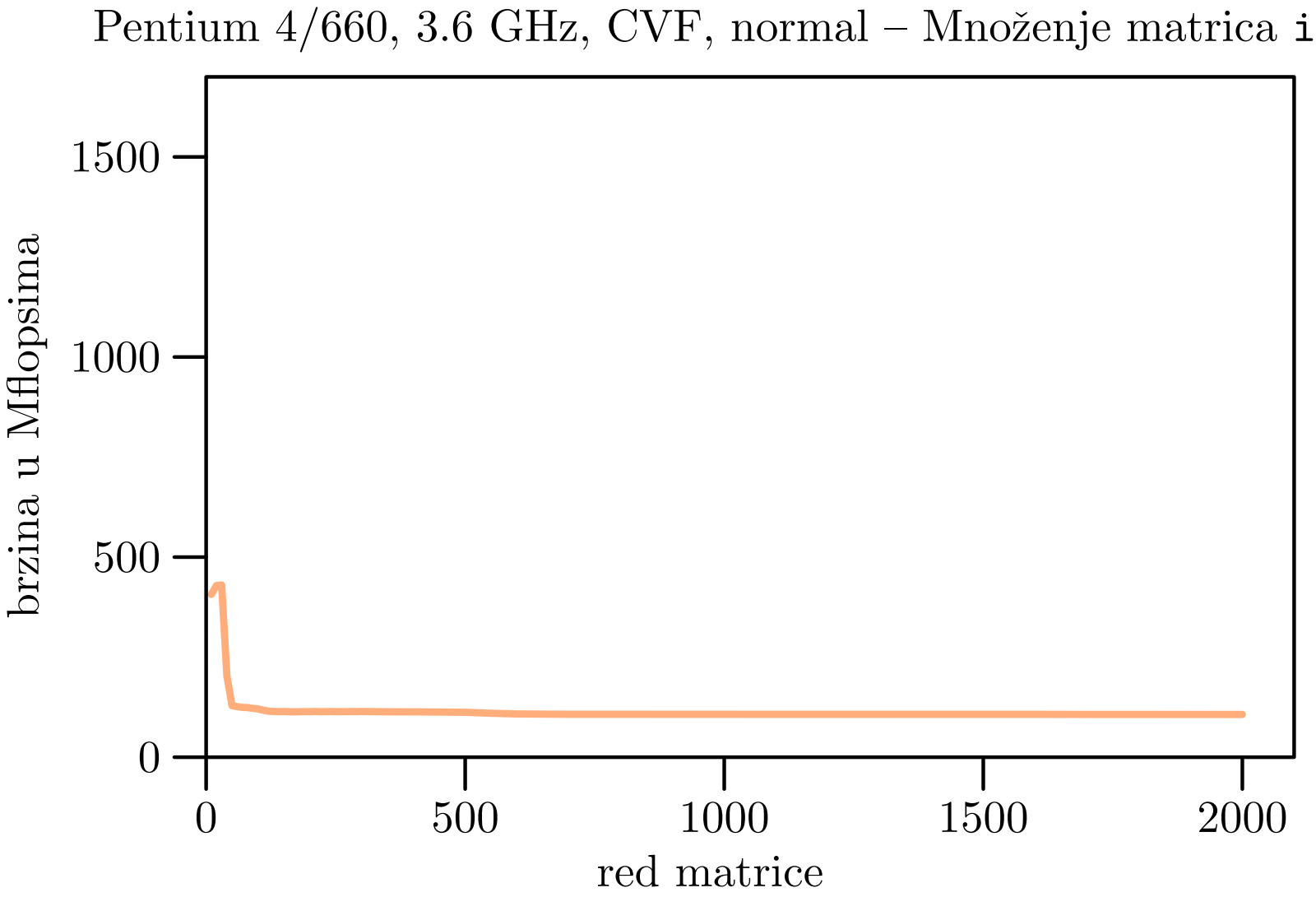
- normalna optimizacija:
  - prvo 6 pojedinačnih slika, leksikografskim redom, po petljama,
  - a zatim, zajednički graf za svih 6 petlji.
- fast optimizacija:
  - permutira petlje,

  tako da svih 6 petlji daje gotovo istu brzinu.
- Usporedba:
  - najbrže petlje `jki` u fast optimizaciji i
  - MKL-ovog algoritma `DGEMM`.

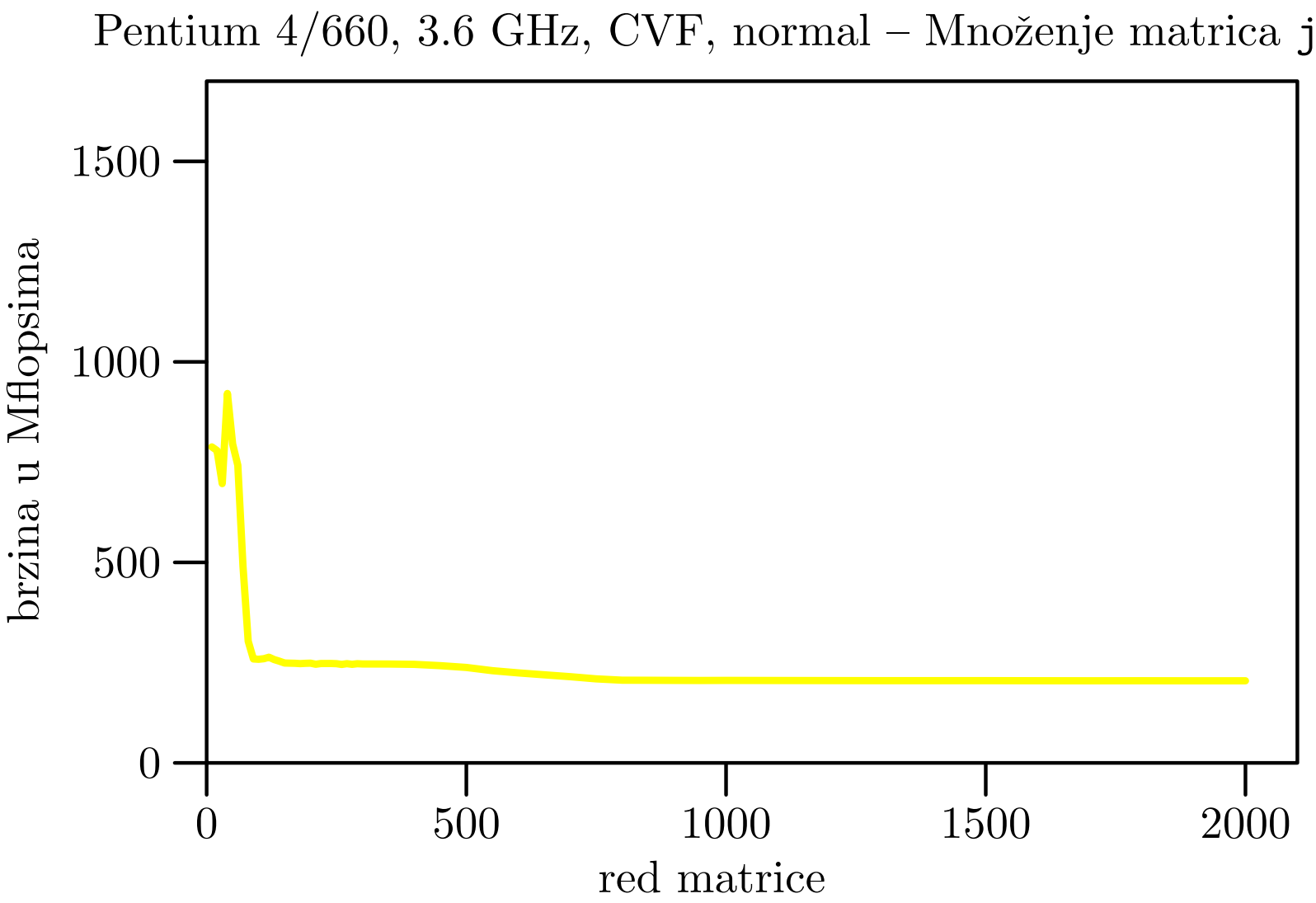
BabyBlue, CVF, normal — `ijk`



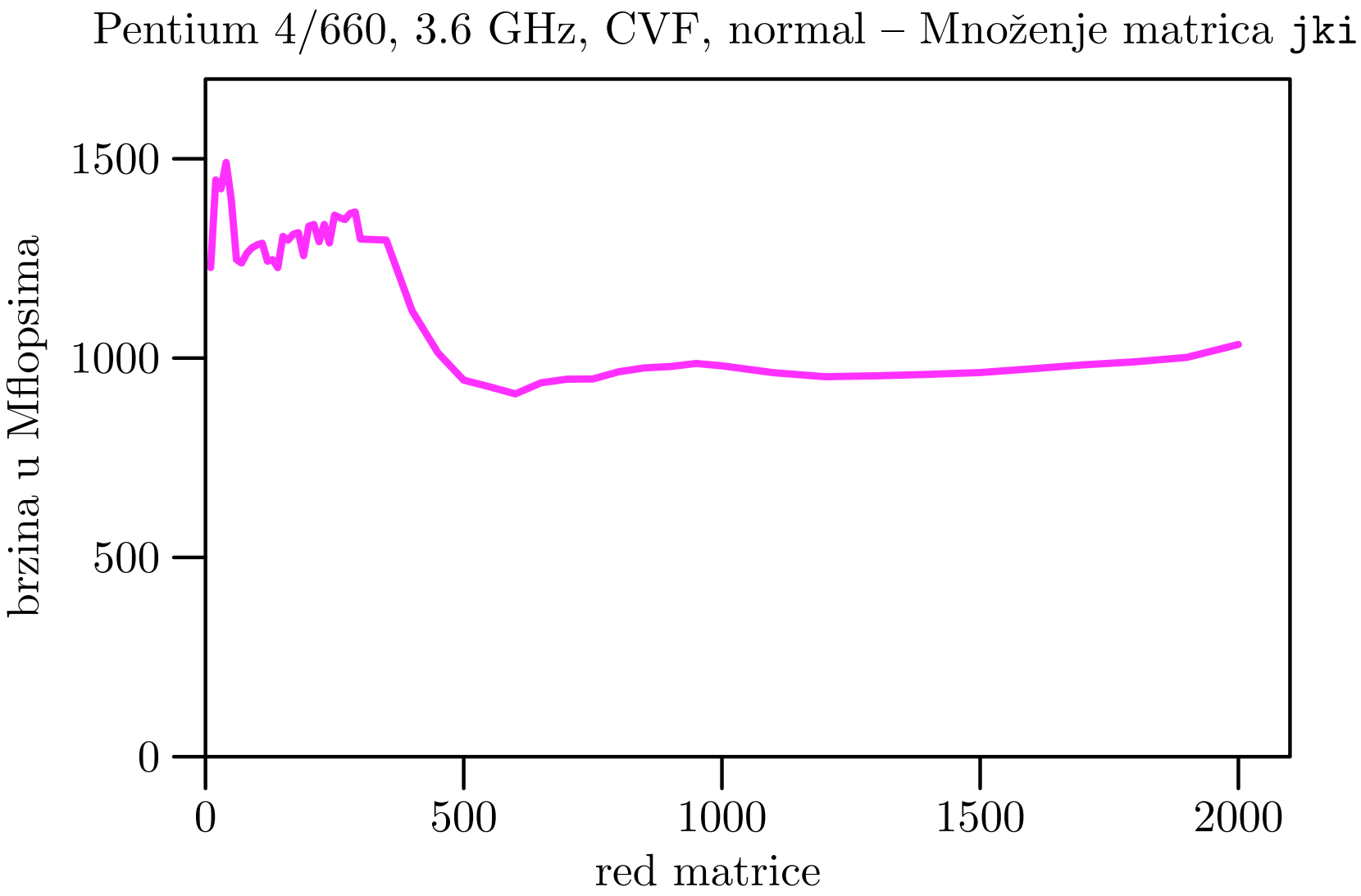
BabyBlue, CVF, normal — ikj



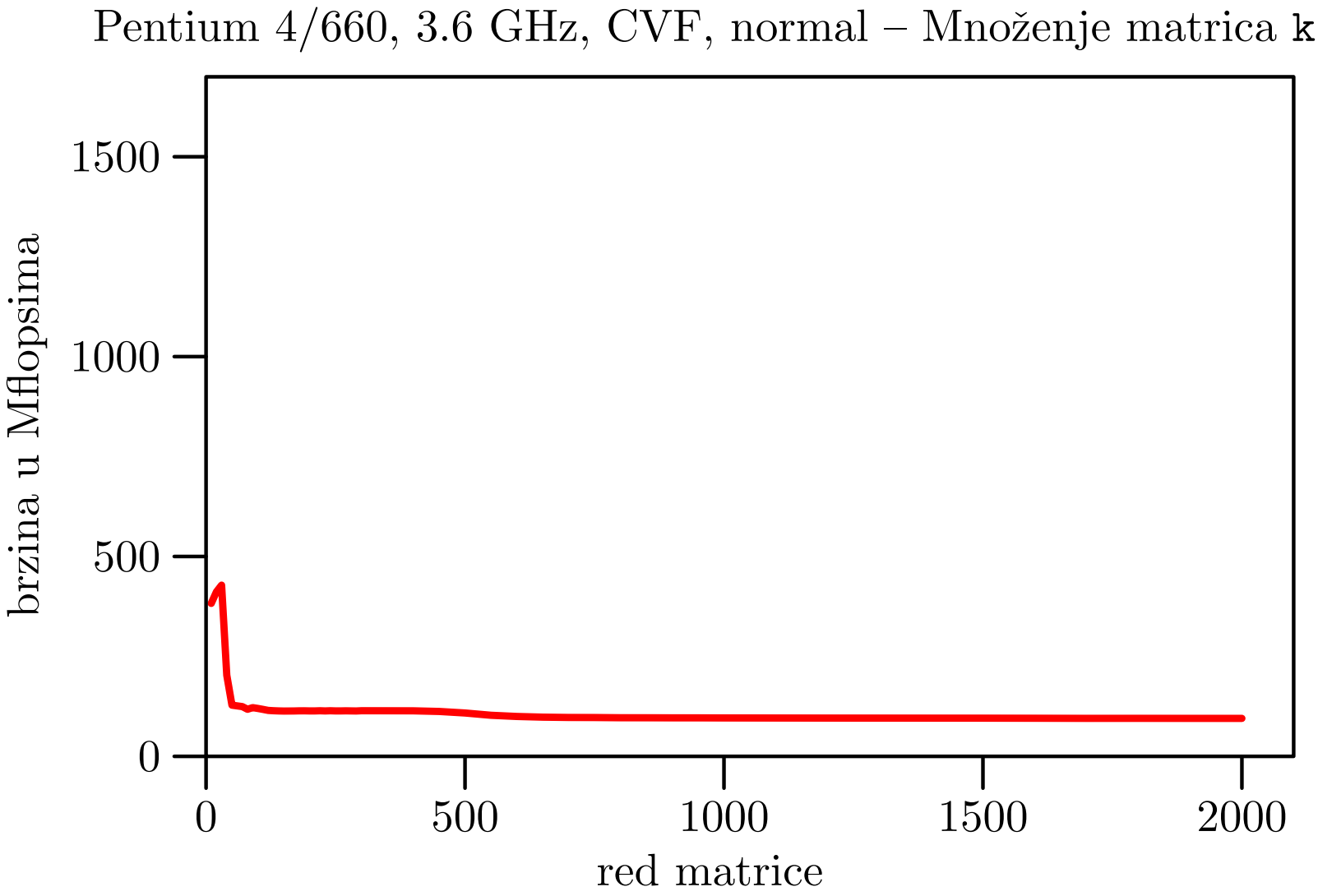
BabyBlue, CVF, normal — jik



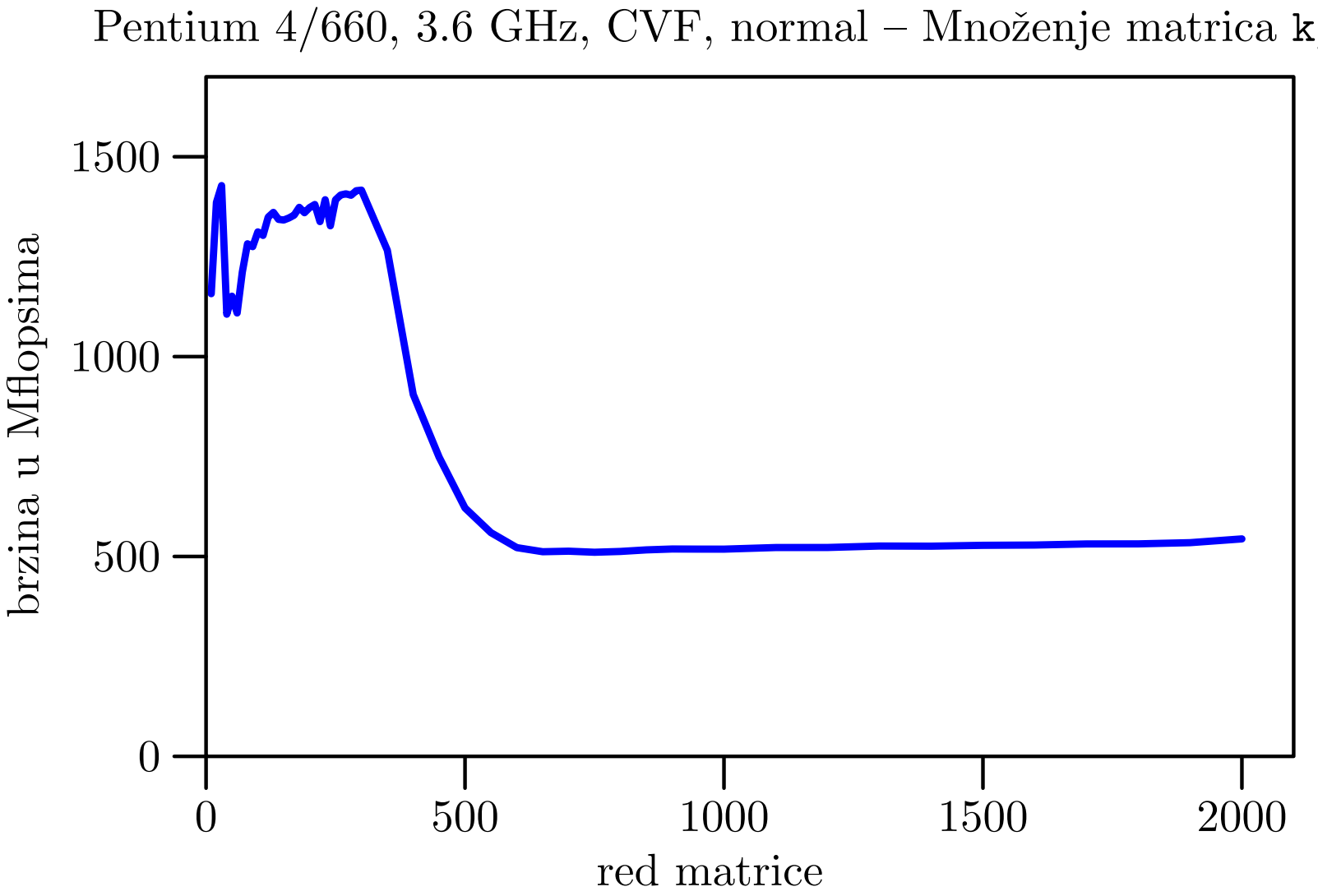
BabyBlue, CVF, normal — jki



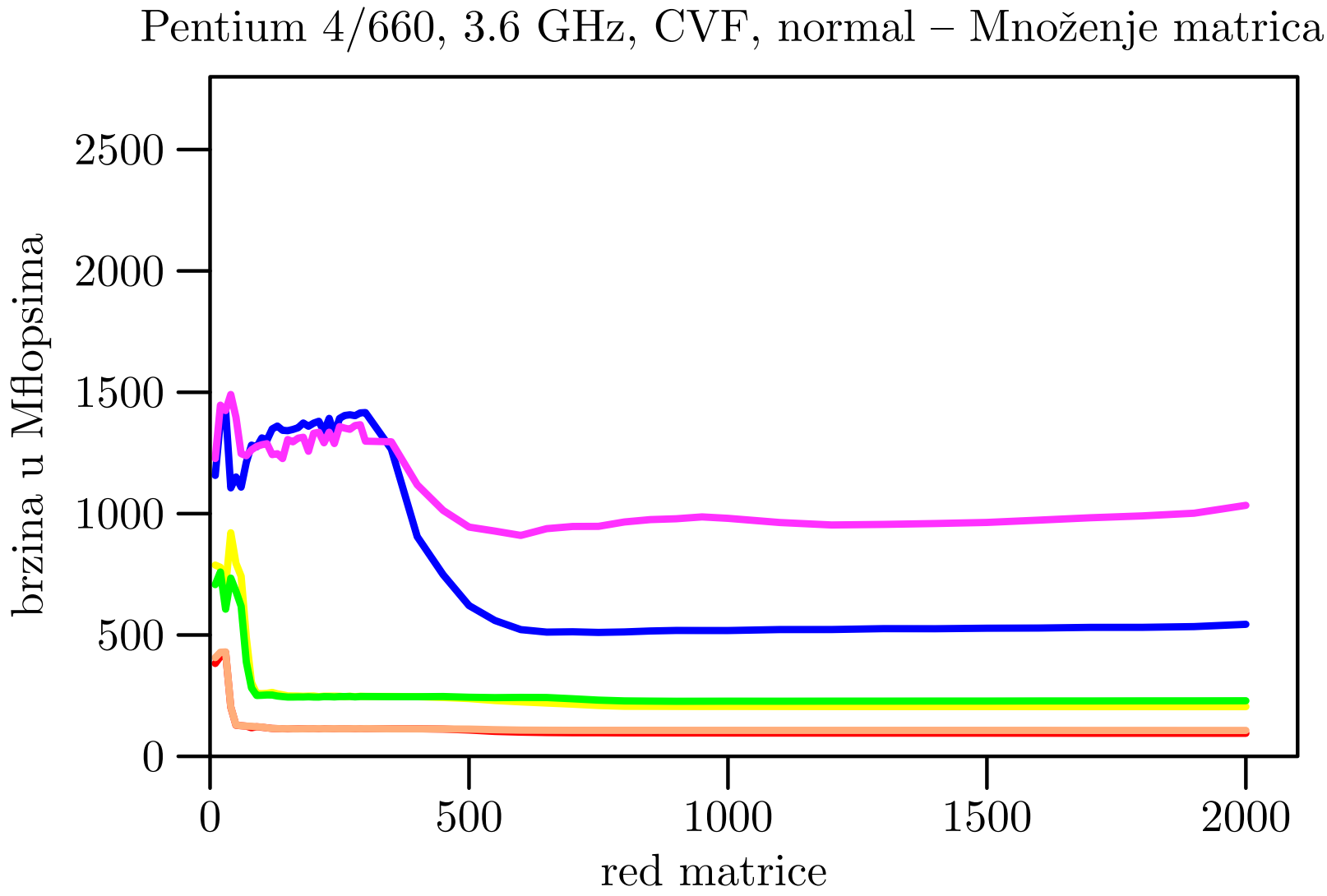
BabyBlue, CVF, normal — `kij`



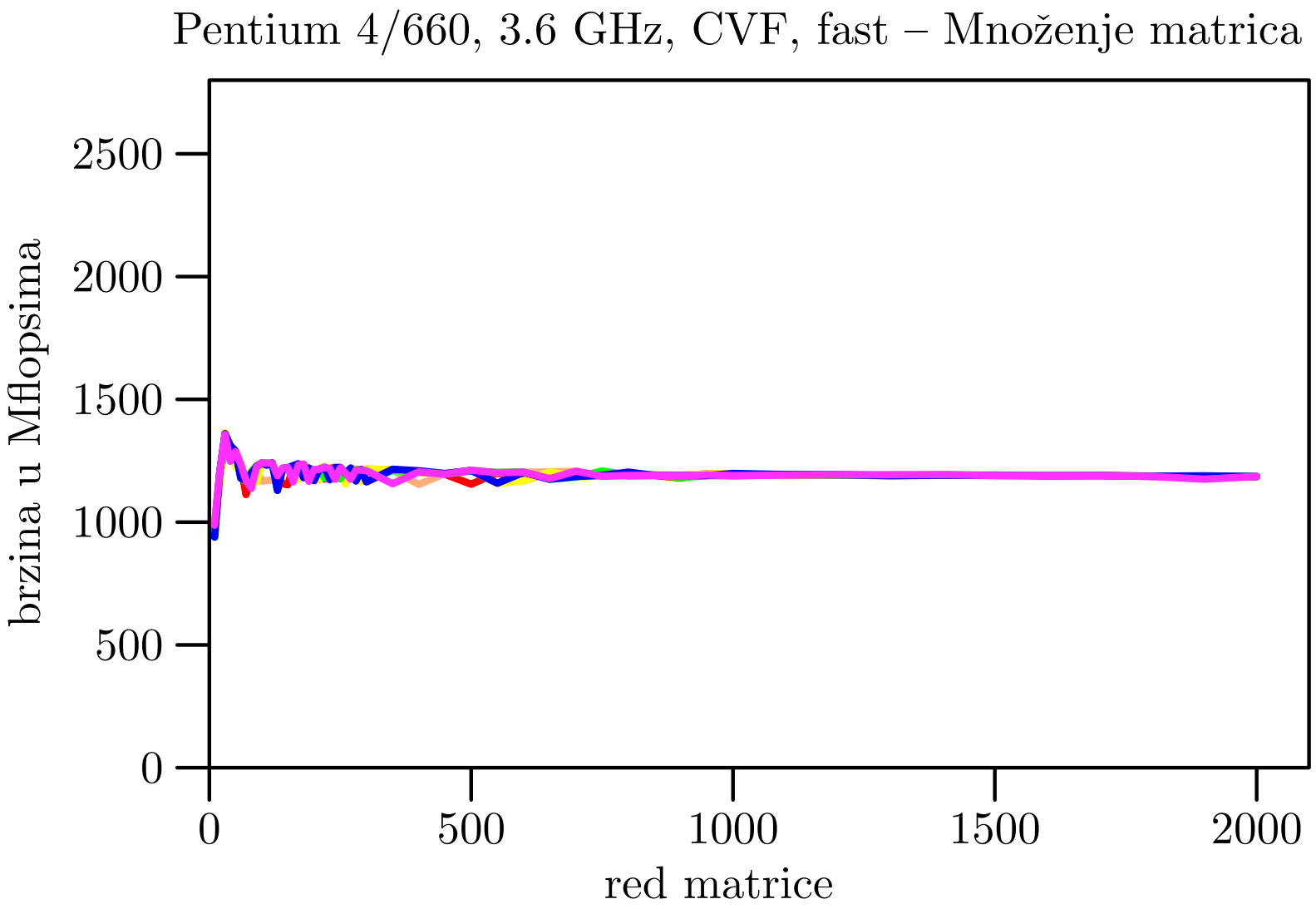
BabyBlue, CVF, normal — `kji`



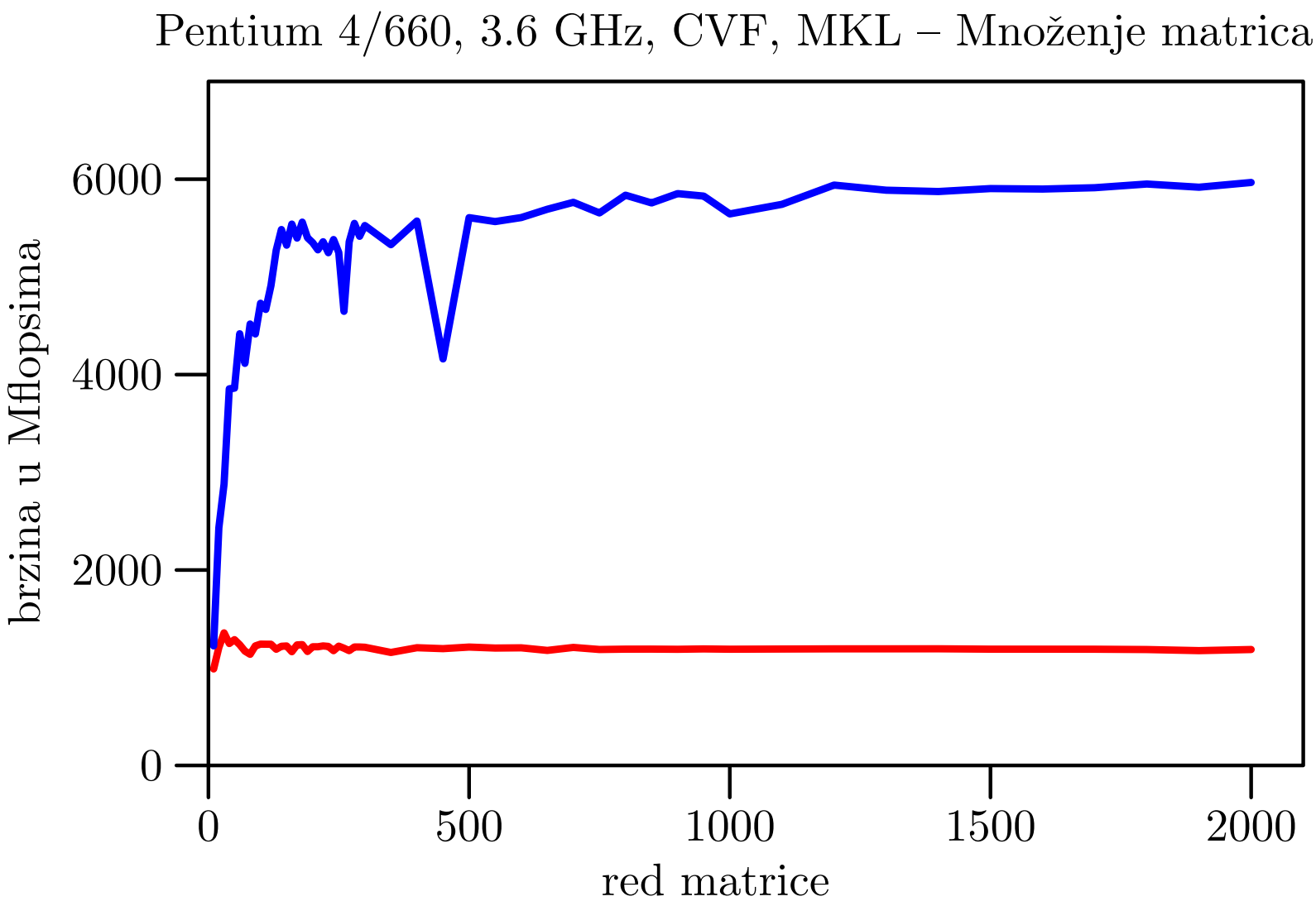
BabyBlue, CVF, normal



BabyBlue, CVF, fast



BabyBlue, CVF, fast — najbrži i MKL



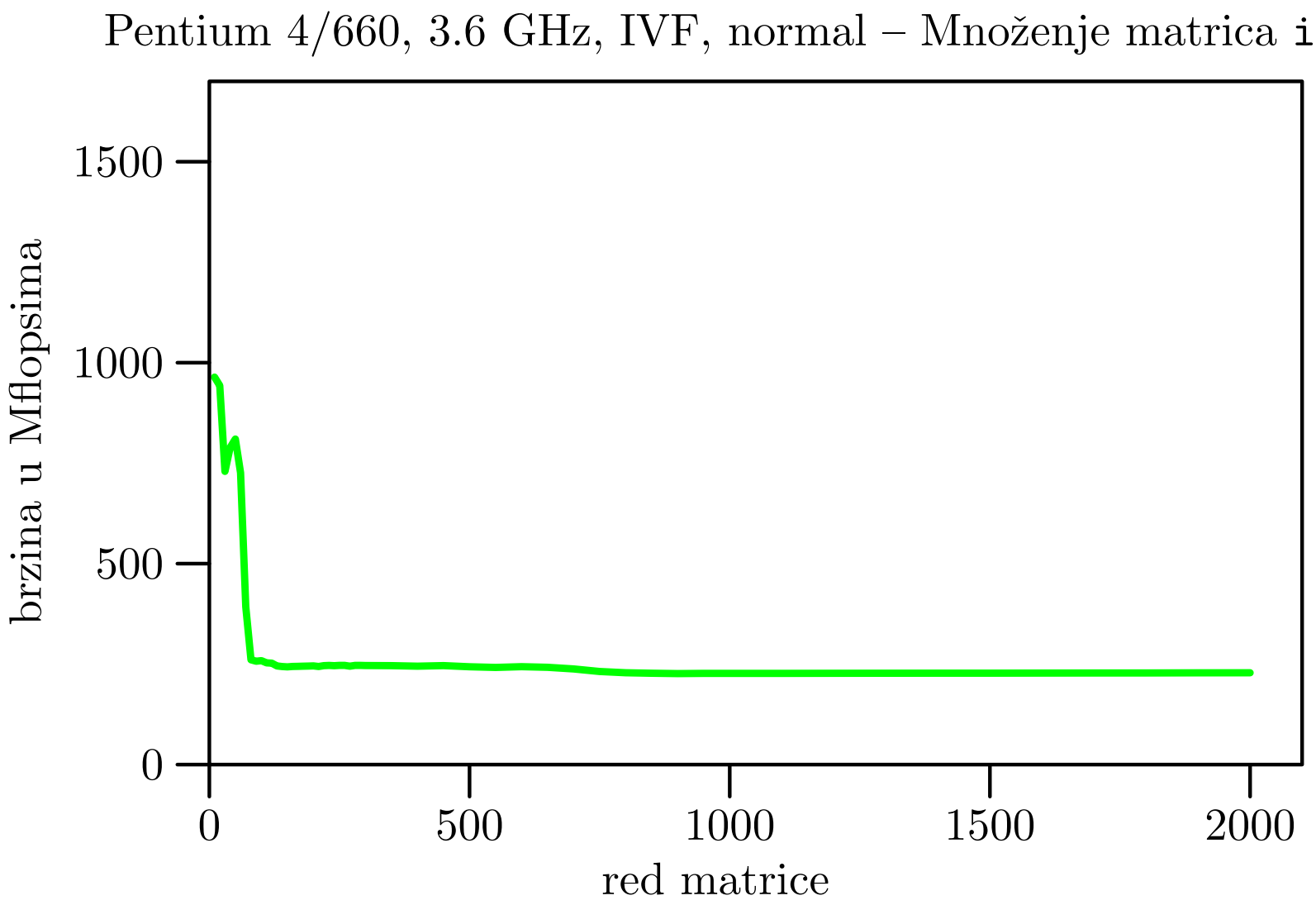
BabyBlue, IVF, normal

Intel Visual Fortran:

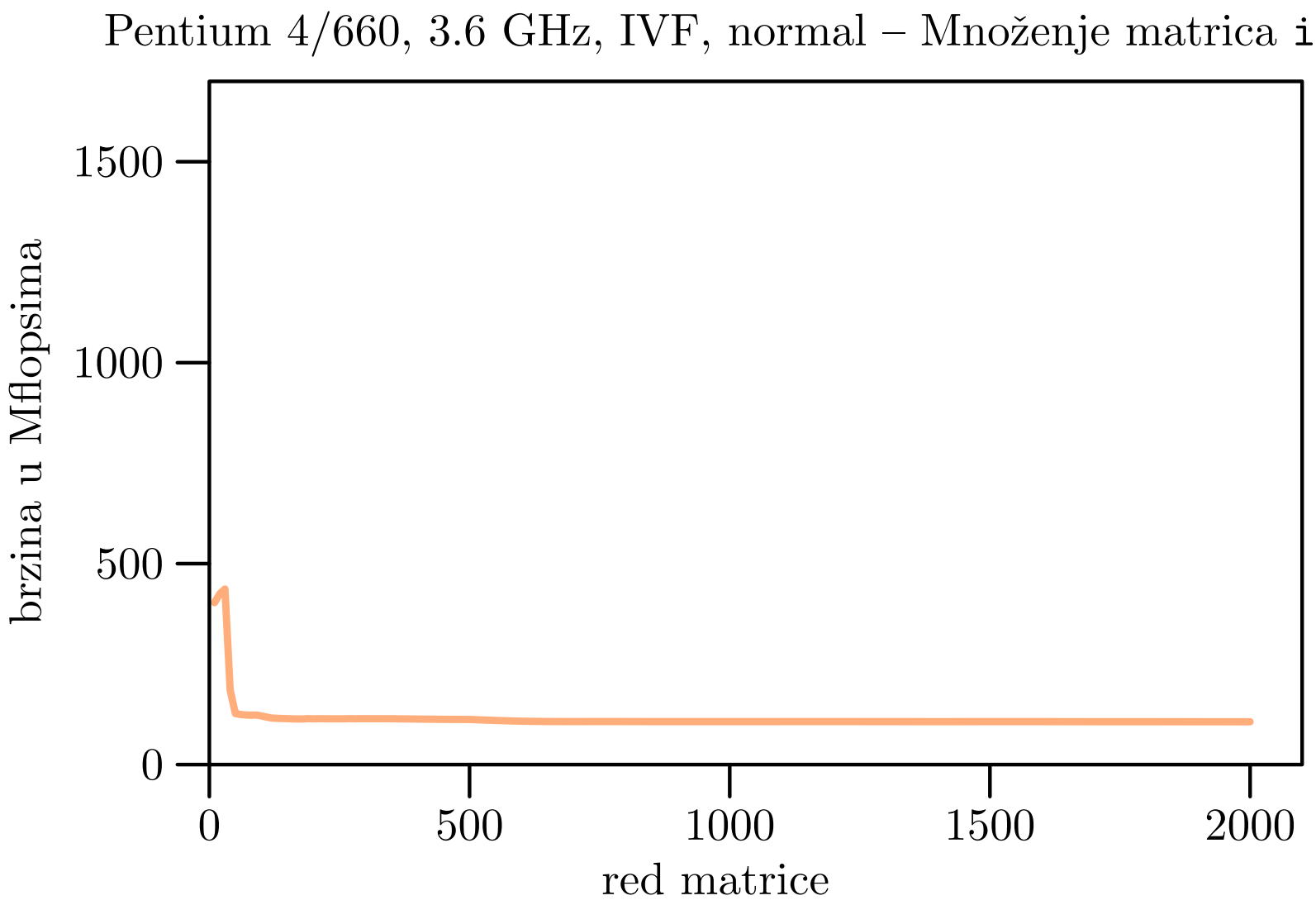
- normalna optimizacija:
  - prvo 6 pojedinačnih slika, leksikografskim redom, po petljama,
  - a zatim, zajednički graf za svih 6 petlji.
- fast optimizacija:
  - permutira petlje,

  tako da imamo 3 para petlji s gotovo istom brzinom.
- Usporedba:
  - najbrže petlje `jki` u fast optimizaciji i
  - MKL-ovog algoritma `DGEMM`.

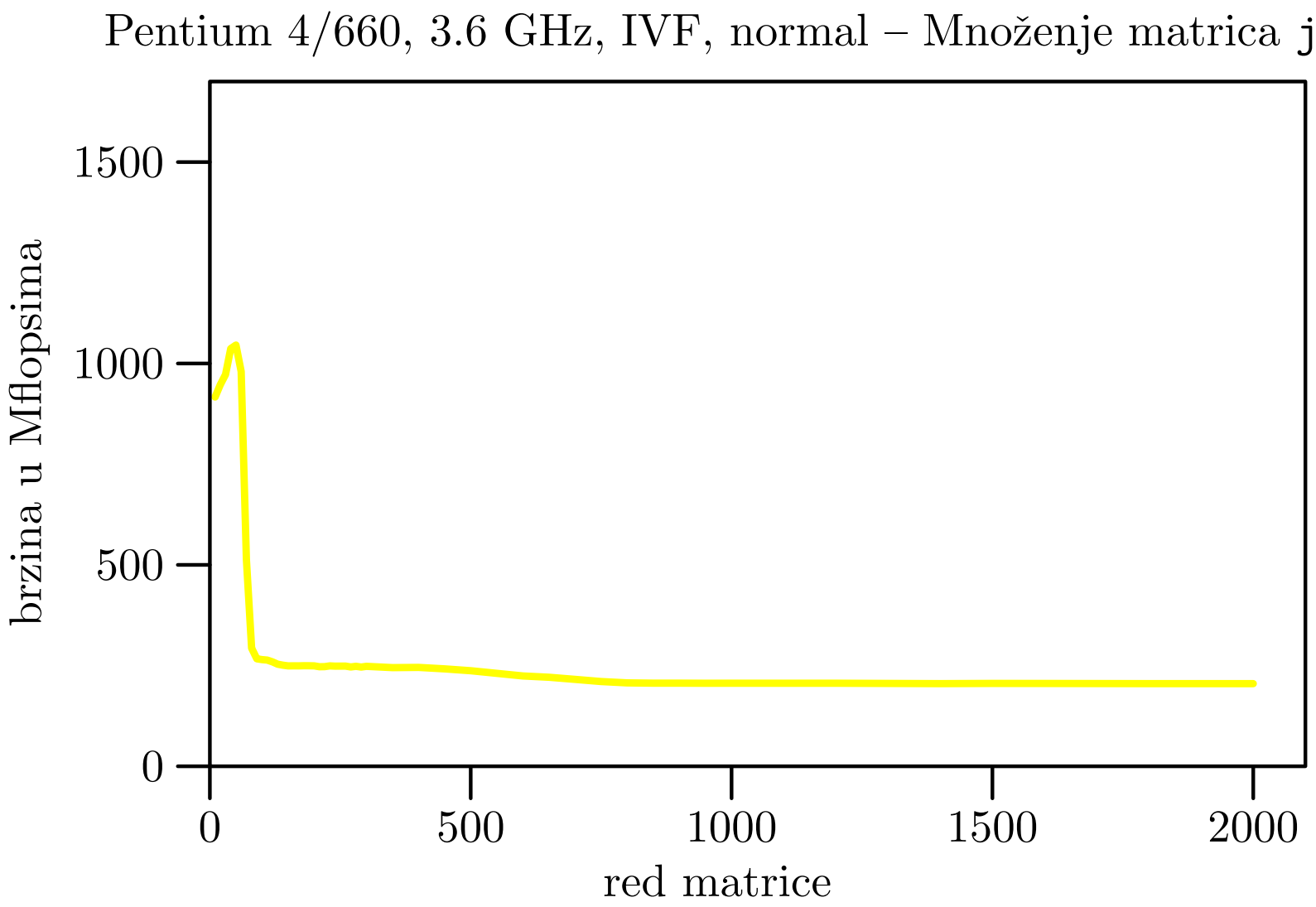
BabyBlue, IVF, normal — `ijk`



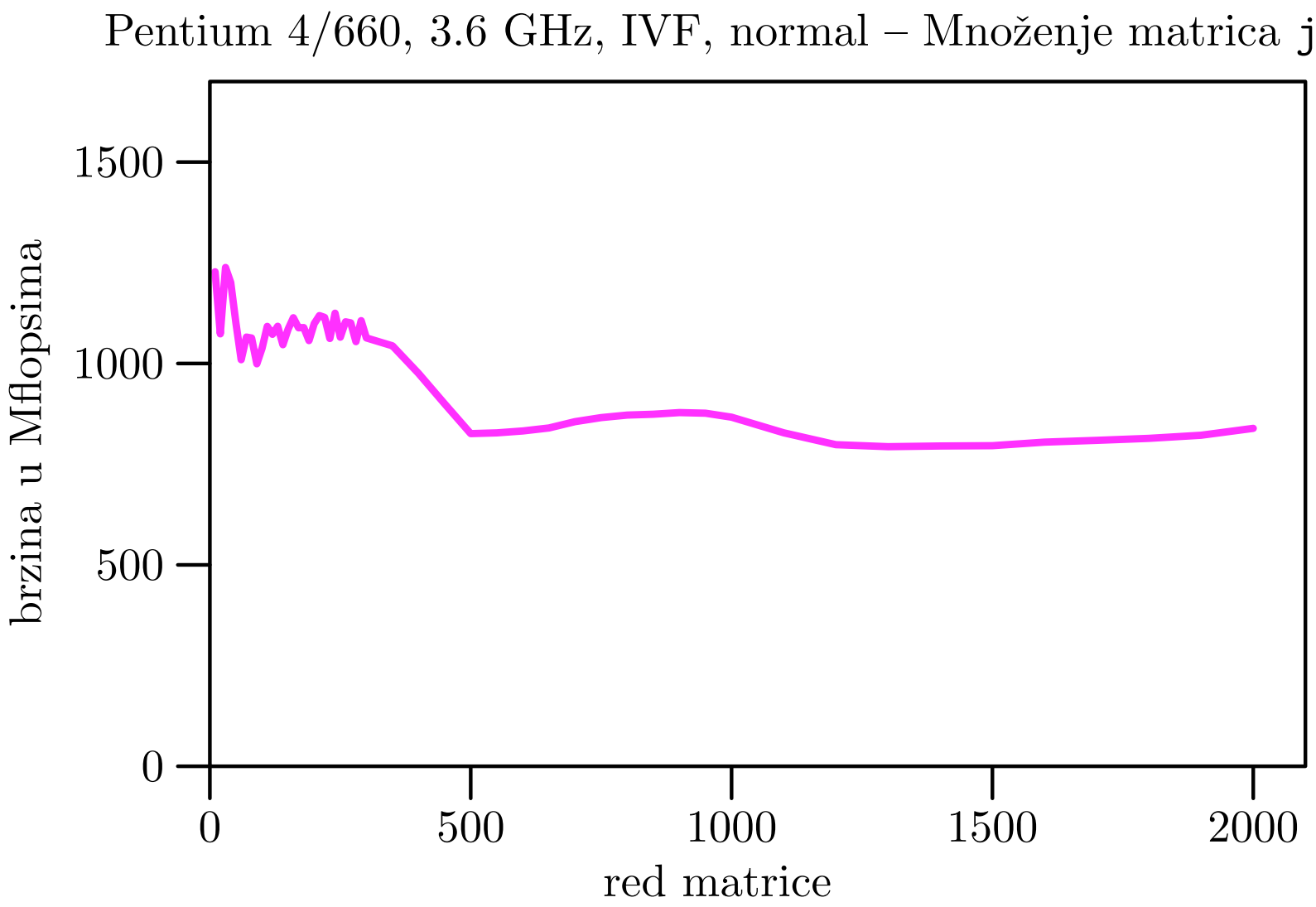
BabyBlue, IVF, normal — ikj



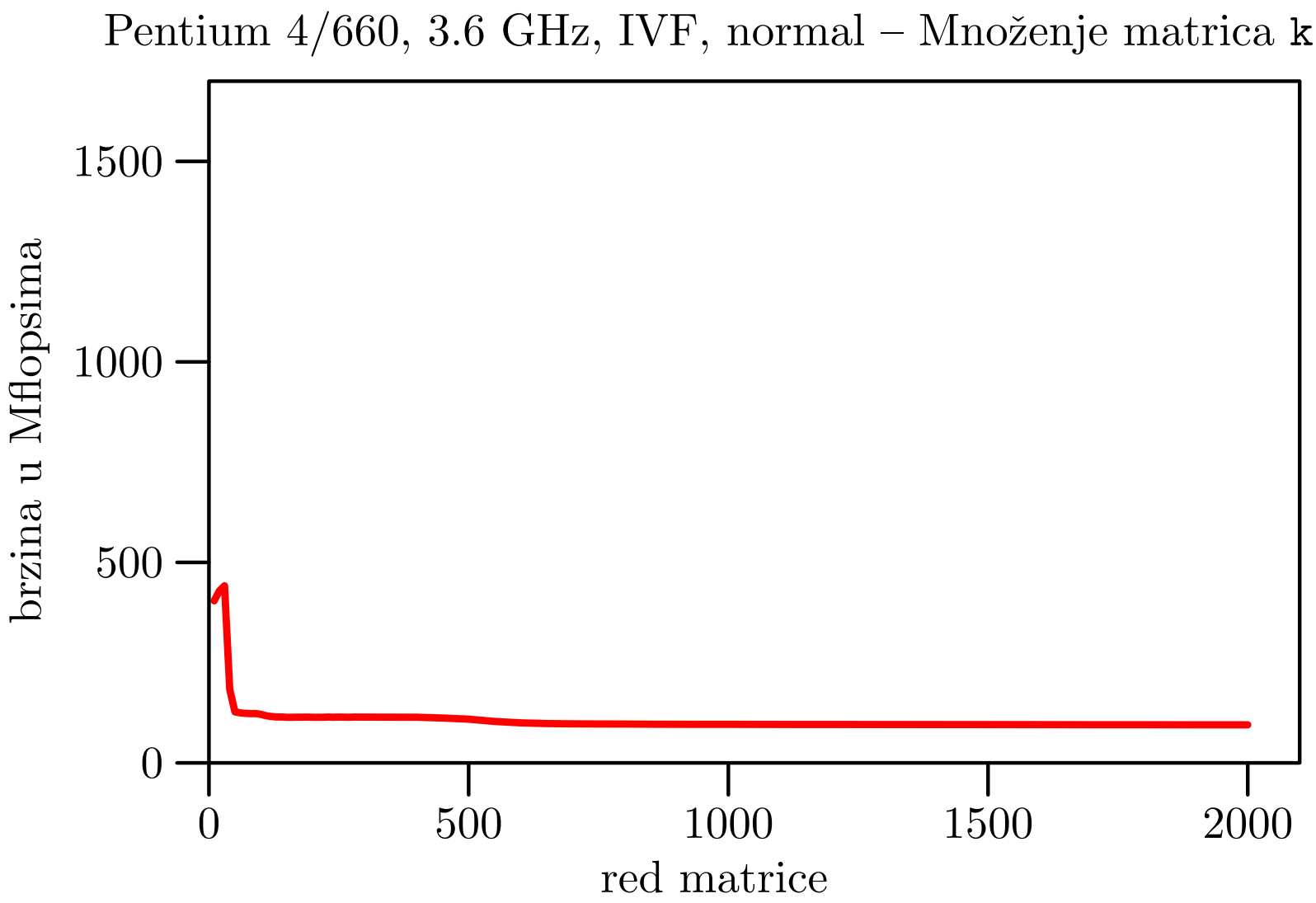
BabyBlue, IVF, normal — jik



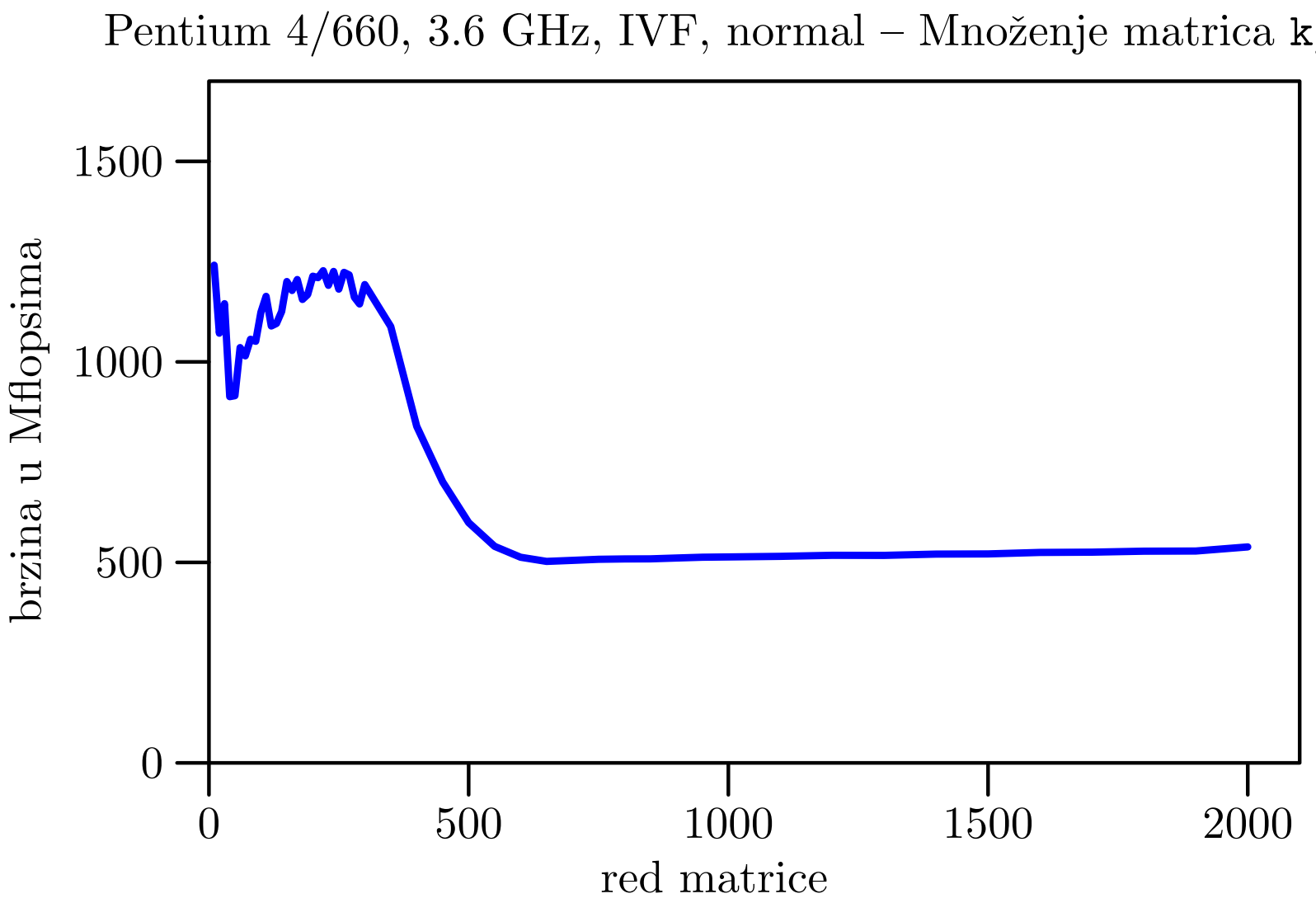
BabyBlue, IVF, normal — jki



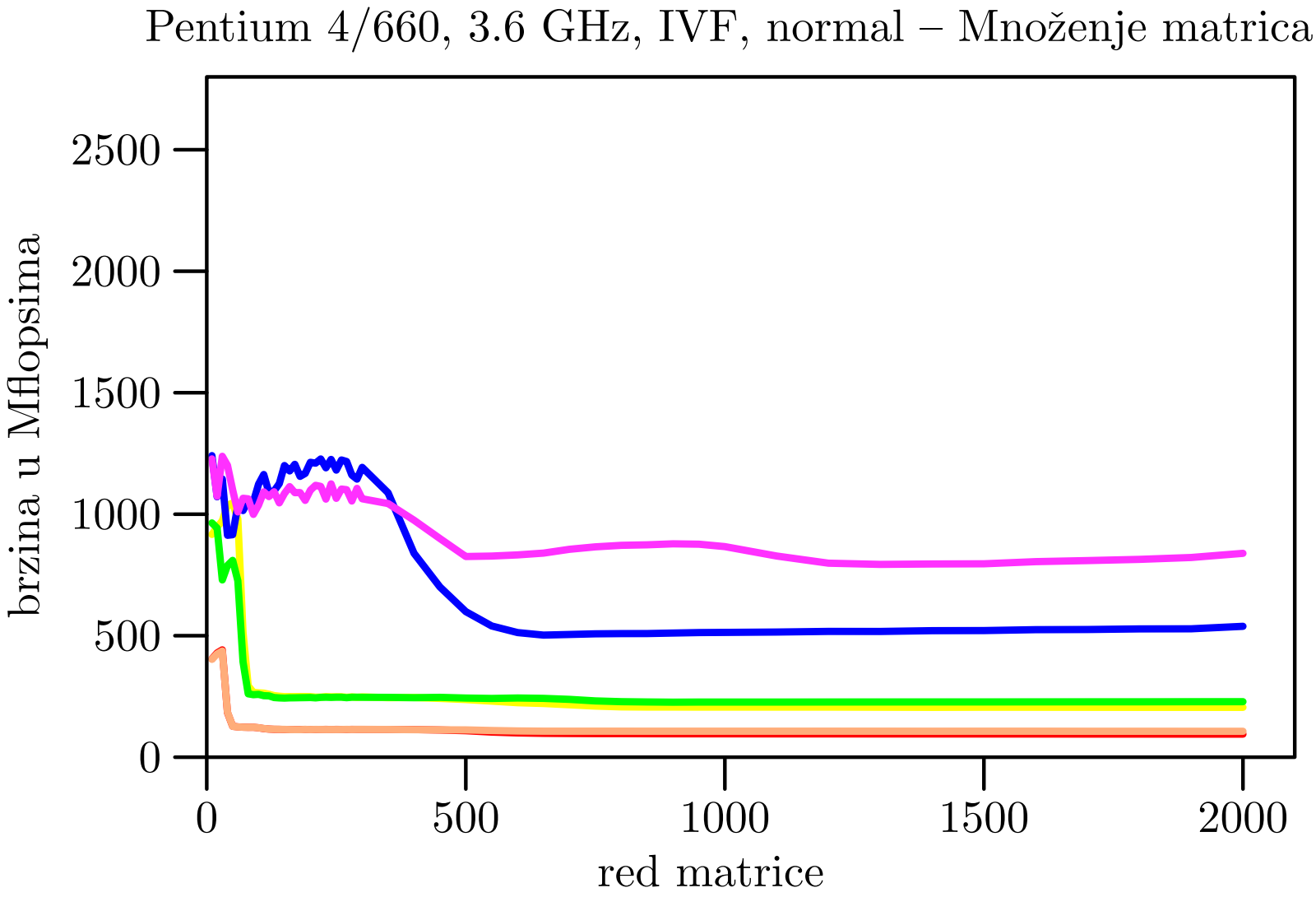
BabyBlue, IVF, normal — `kij`



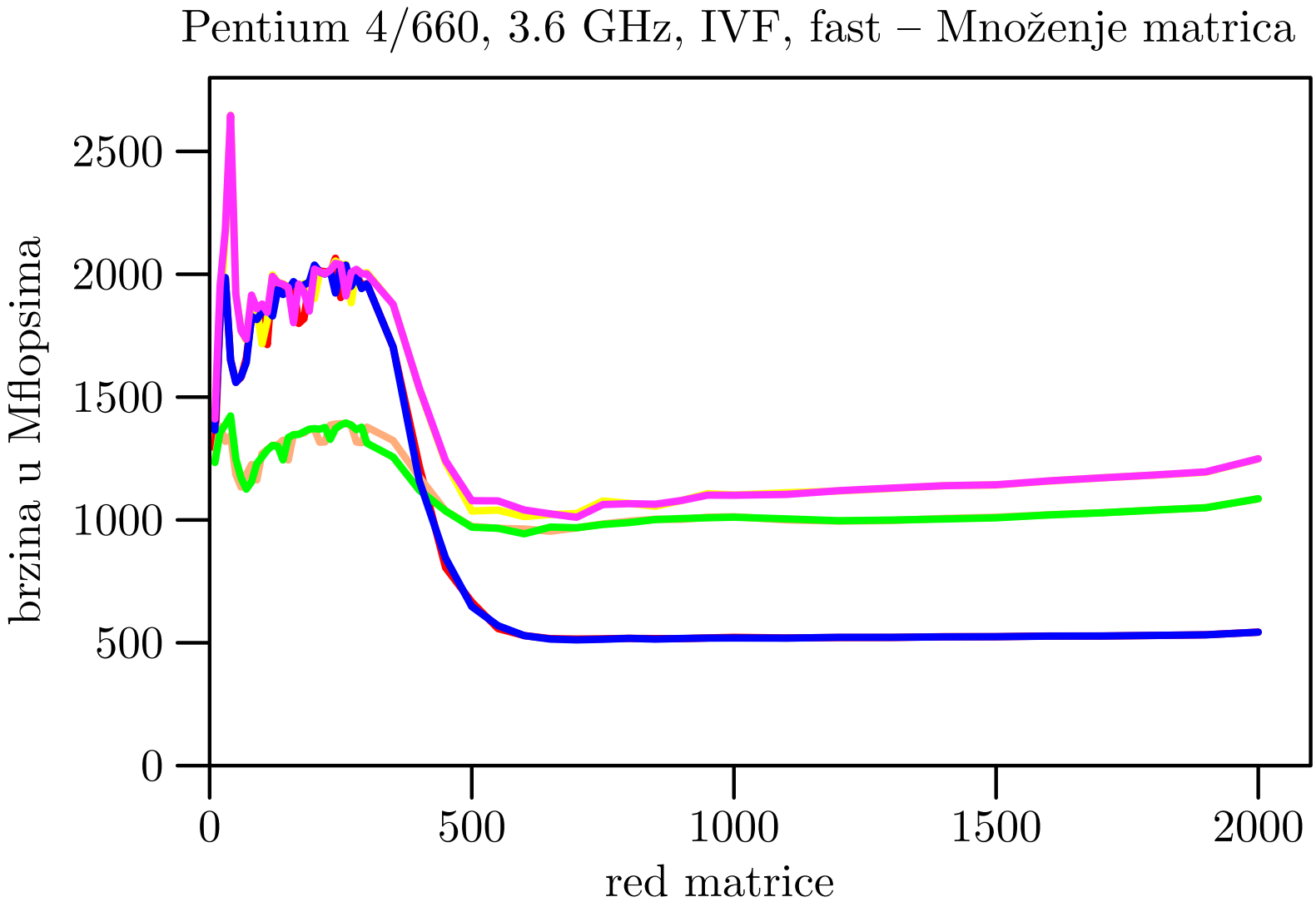
BabyBlue, IVF, normal — `kji`



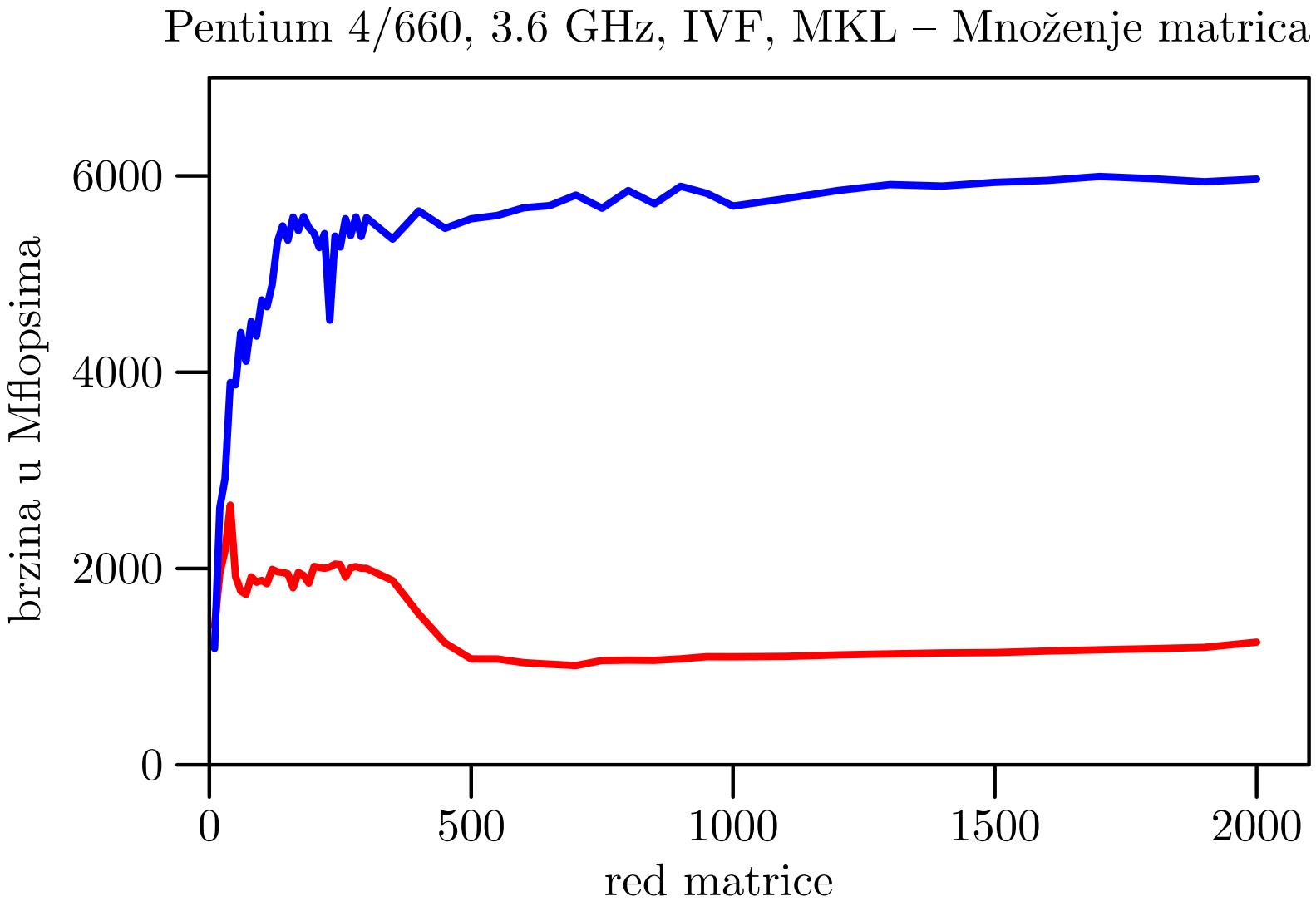
BabyBlue, IVF, normal



BabyBlue, IVF, fast



BabyBlue, IVF, fast — najbrži i MKL



Tablica brzina za velike n

Usporedba brzina (u Mflops) samo na BabyBlue:

- po petljama (uključivo i MKL),
- za normal i fast opcije kod oba compilera.

Petlja	normal CVF	normal IVF	fast CVF	fast IVF
`ijk`	229.0	228.4	1186.3	1086.4
`ikj`	106.7	106.5	1186.5	1086.0
`jik`	204.8	205.1	1185.3	1248.7
`jki`	1034.2	839.0	1186.4	1249.1
`kij`	95.0	94.9	1185.1	543.3
`kji`	544.0	538.6	1185.7	543.3
MKL	5945.7	5967.3	5966.5	5967.6

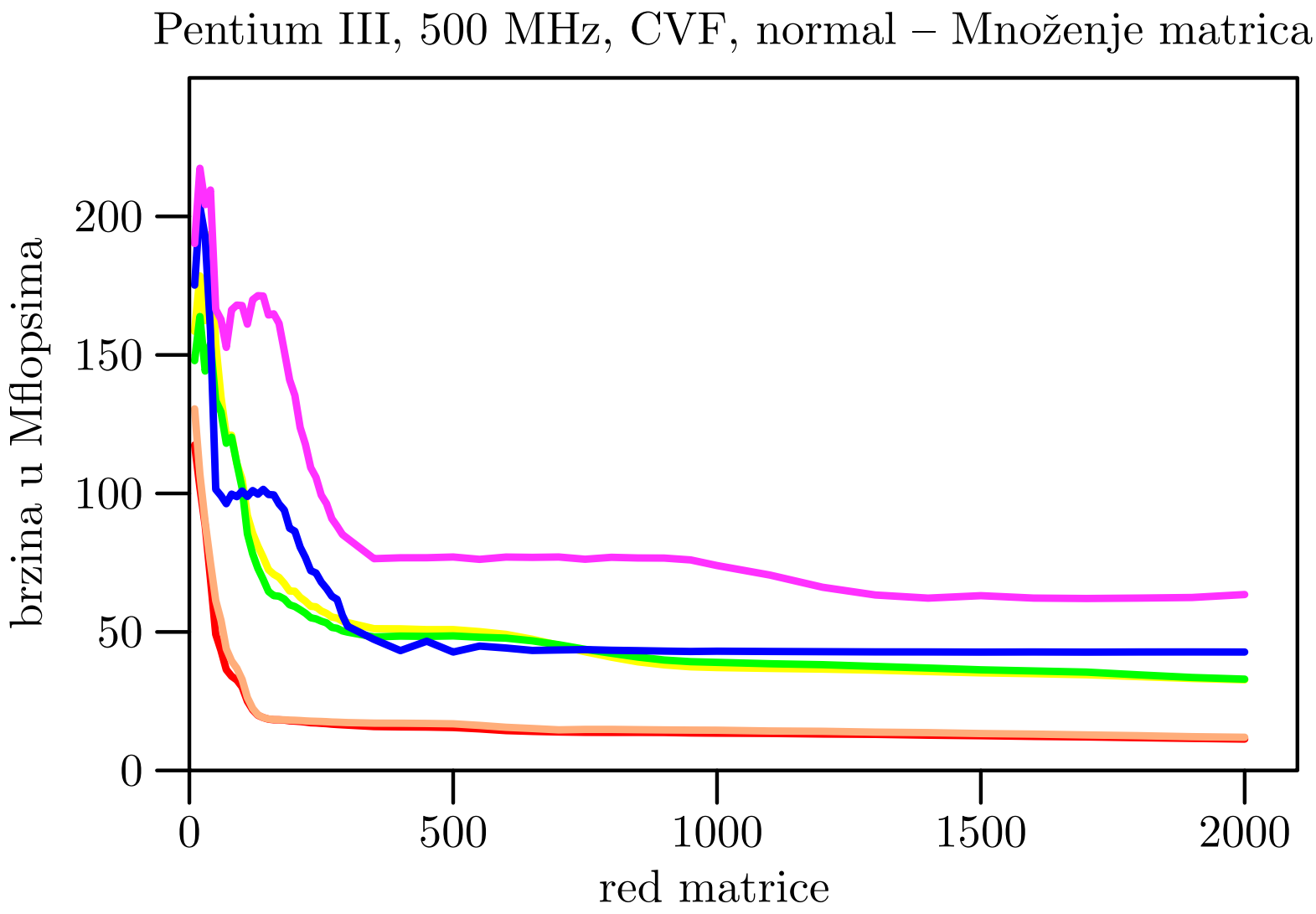
Ostala računala

Vrlo slično ponašanje brzina za petlje vidi se i na ostalim računalima.

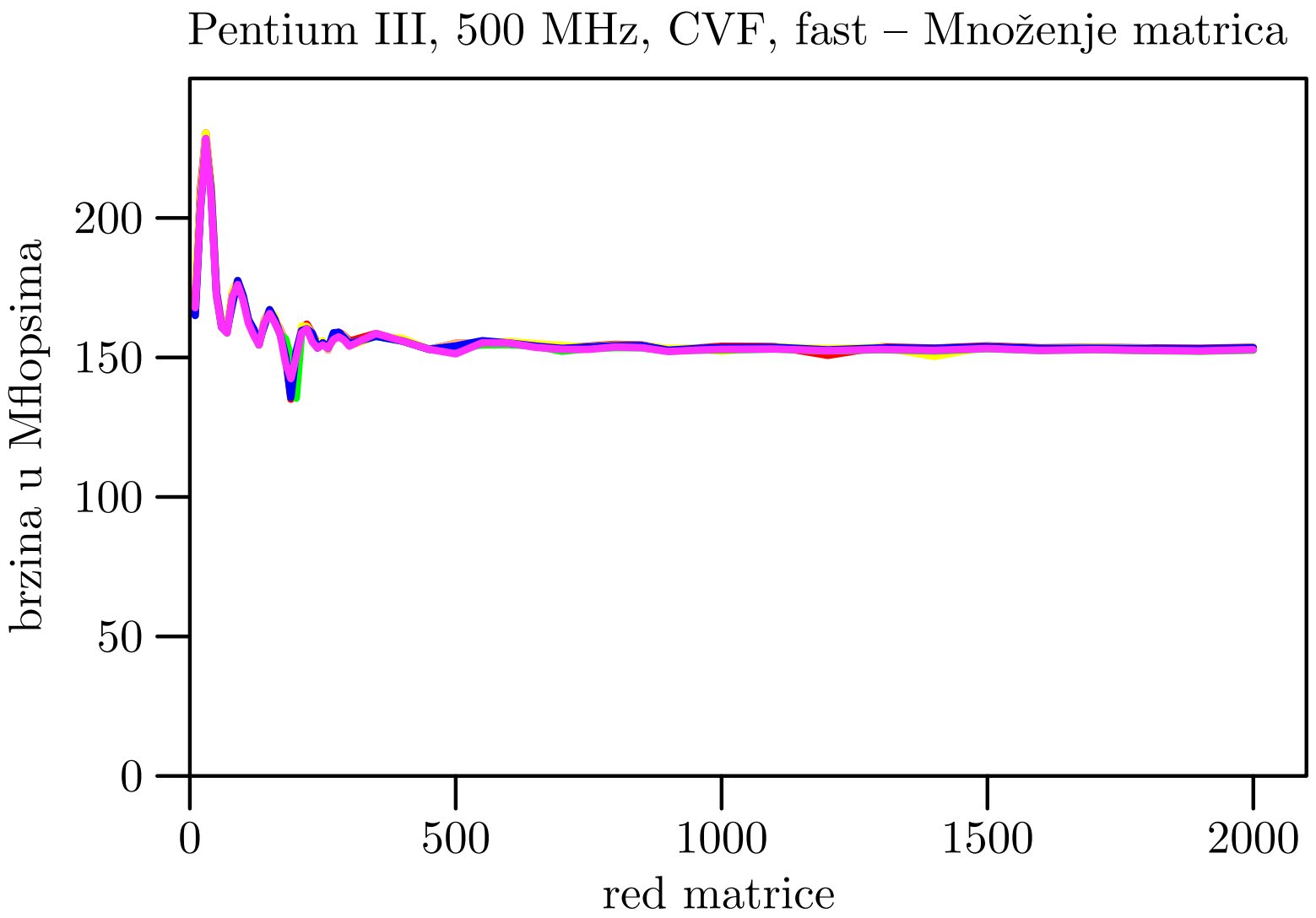
Grafovi su "skraćeni" tako da sadrže redom:

- usporedbu brzina svih 6 petlji za normal i fast opcije compilera (samo CVF),
- usporedbu najbrže fast petlje MKL-a.

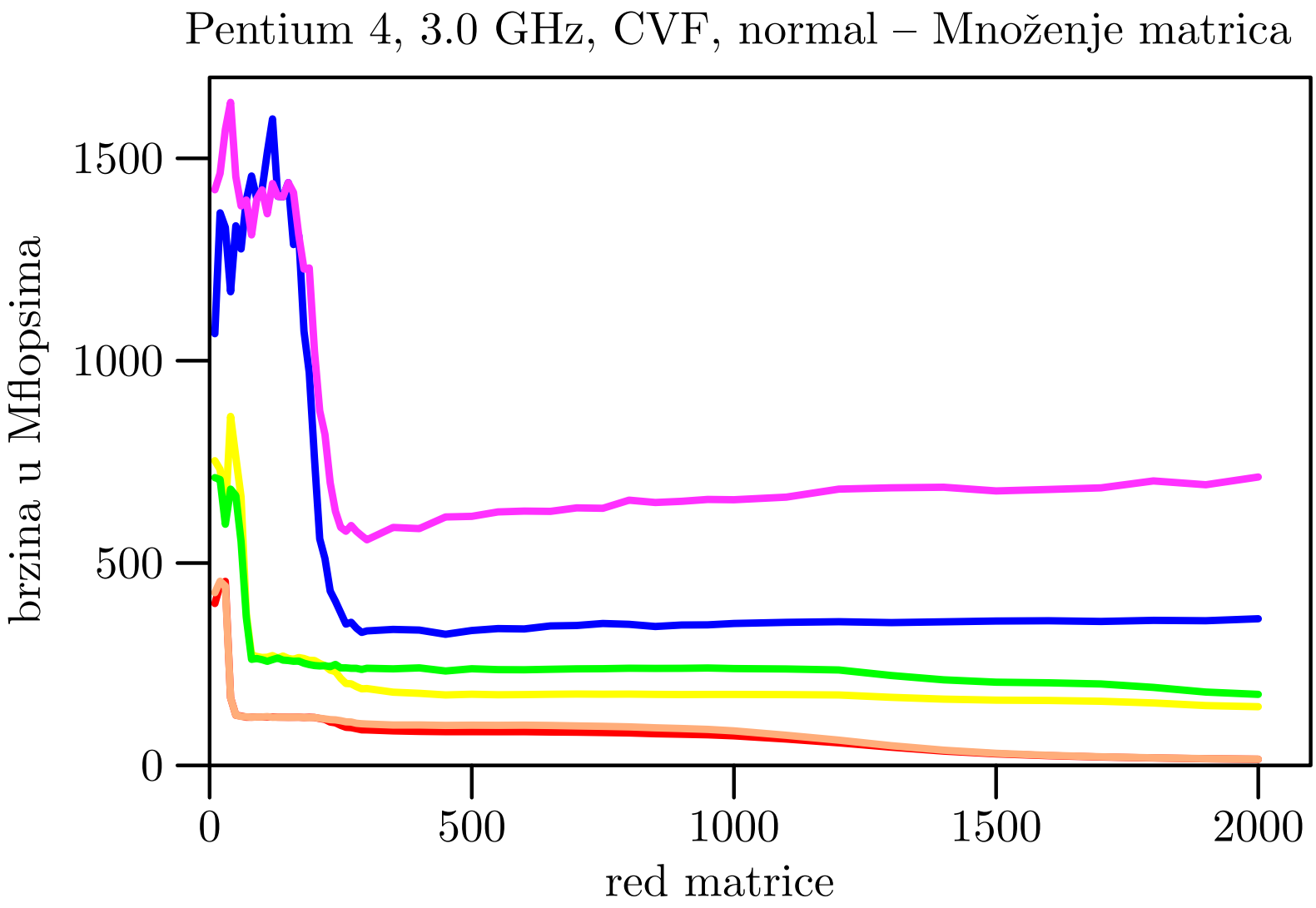
Klamath5, CVF, normal



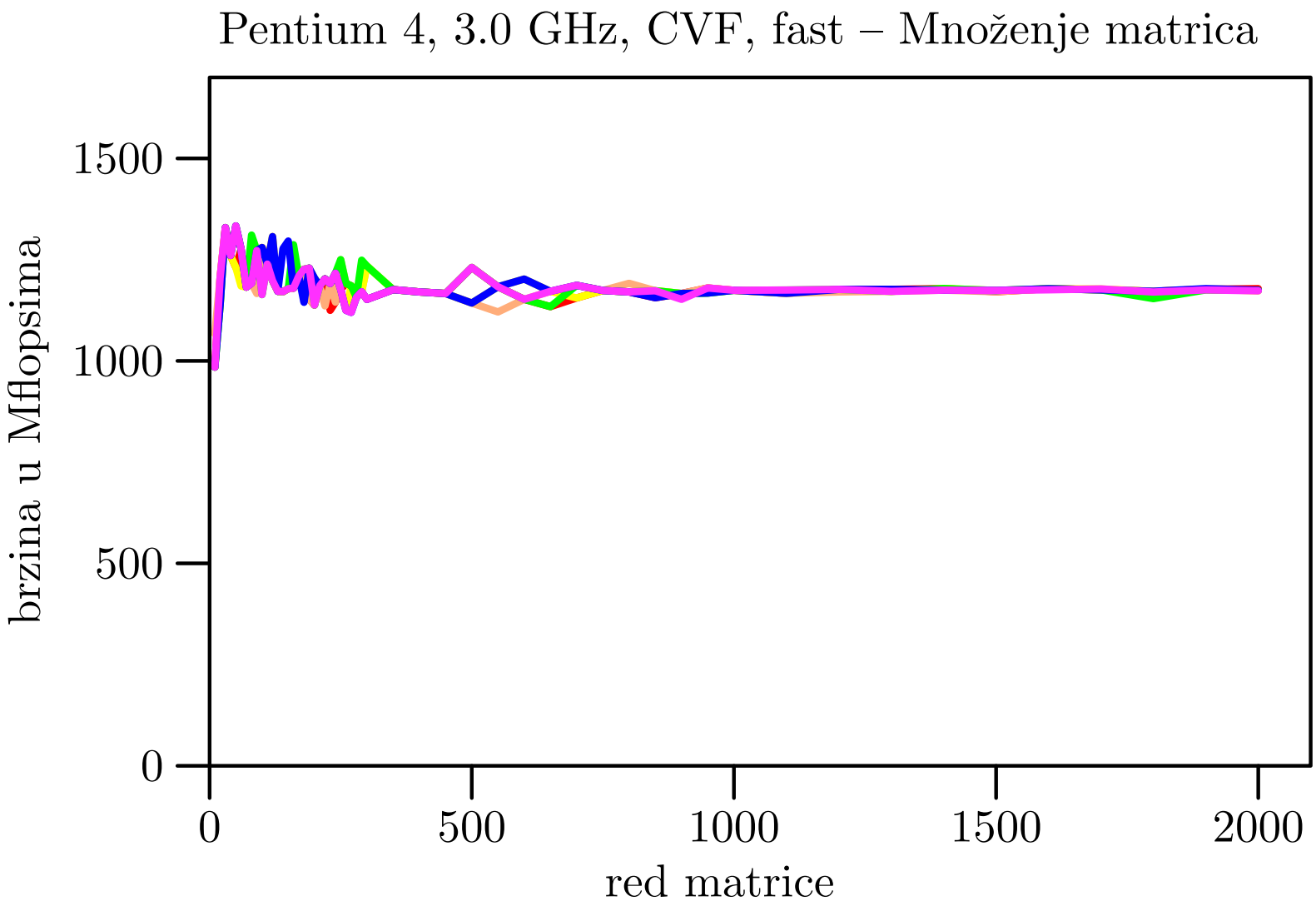
Klamath5, CVF, fast



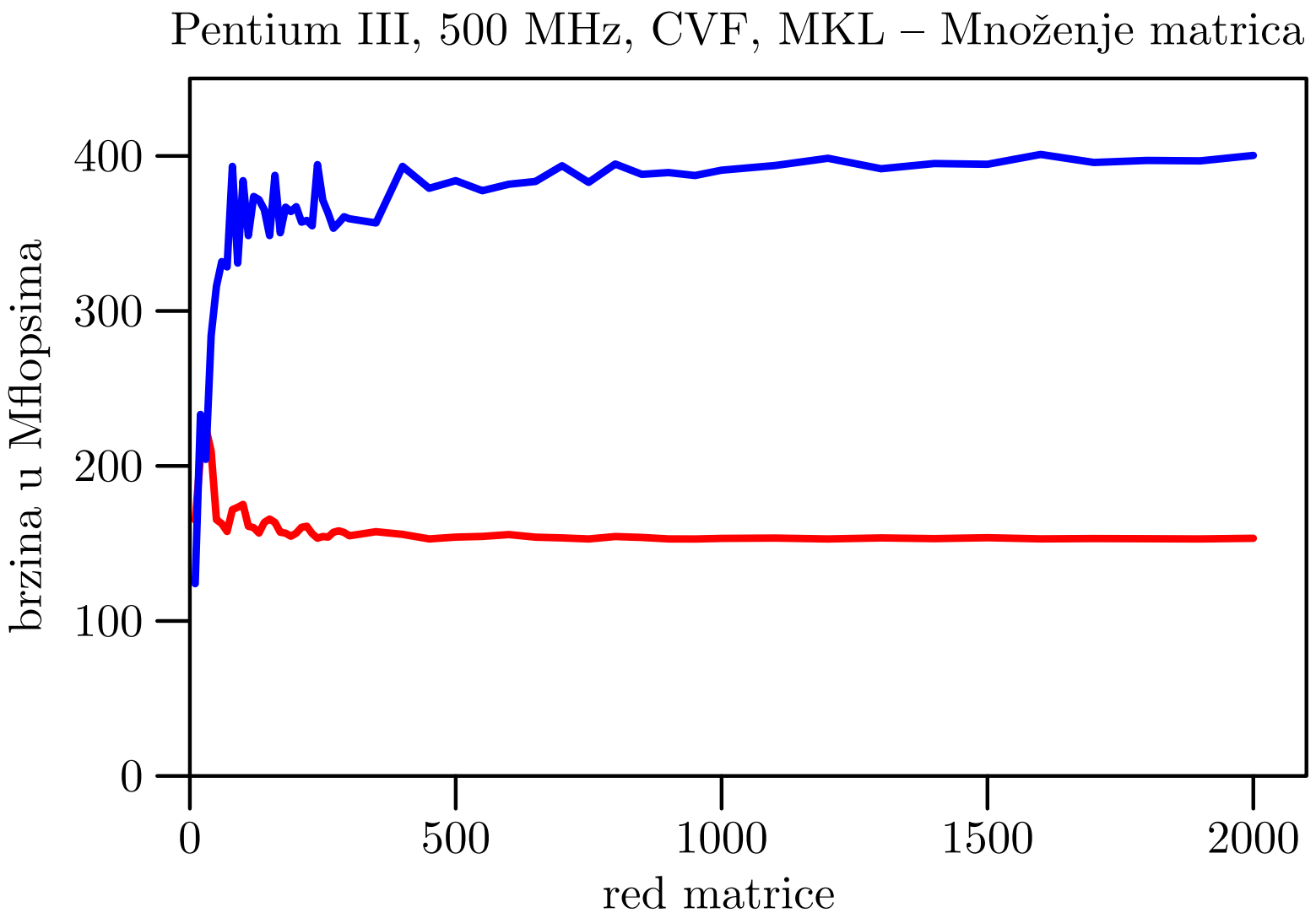
Veliki, CVF, normal



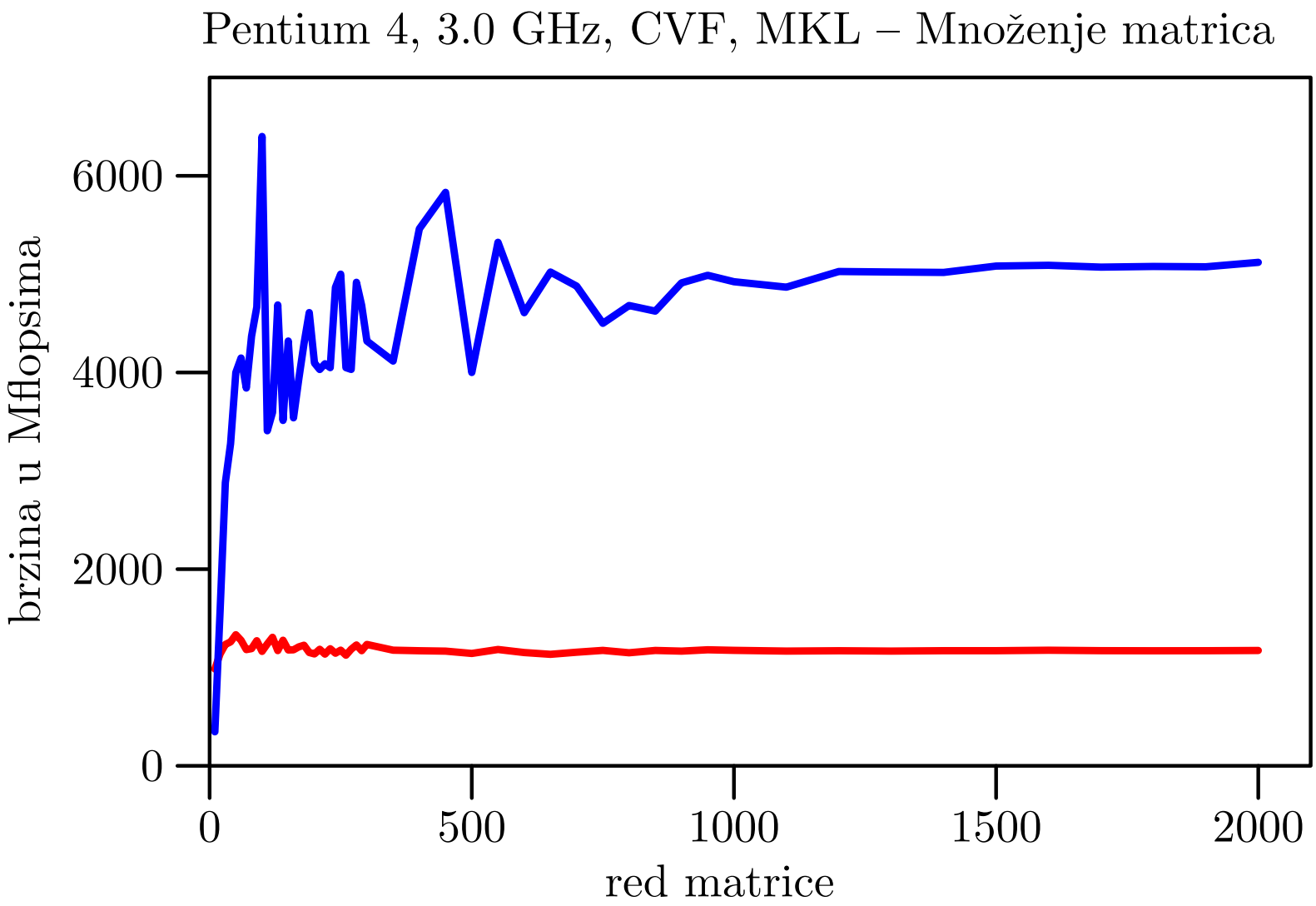
Veliki, CVF, fast



Klamath5, CVF, fast — najbrži i MKL



Veliki, CVF, fast — najbrži i MKL



Komentar rezultata

Kod množenja matrica, za razliku od zbrajanja,

- svaki ulazni podatak koristimo puno puta, (preciznije, točno n puta).

Zato brzina cache memorije može doći do izražaja, pa možemo dobiti

- bitno veće brzine nego kod zbrajanja.

Cache memorija je "glavni krivac" za:

- razlike u brzinama između raznih varijanti, i
- povećanu brzinu za male n-ove.

Ponavljanje eksperimenta ima neku ulogu samo za vrlo male redove n. Osim toga, za $n \geq 450$ nema ponavljanja.

Komentar rezultata (nastavak)

Brže su one varijante koje

- učestalije koriste iste podatke, dok su oni još u cacheu.

Dokaz: Cache se "puni" u "blokovima", kako su matrice spremljene. Najbrža bi trebala biti ona varijanta koja

- sekvencijalno prolazi kroz elemente u sve 3 matrice

u "unutarnjoj" naredbi

```
c(i, j) = c(i, j) + a(i, k) * b(k, j)
```

U Fortranu, zbog spremanja matrice po stupcima, prvi indeks se brže mijenja. Zato mora biti:

- `i` unutar `j`, `i` unutar `k`, `k` unutar `j`.

Dakle, najbrža varijanta algoritma je `jki`, što zaista i je!

Komentar rezultata (nastavak)

Zadnji argument da je "krivac" cache memorija.

Konstruktivni dokaz: "Blokovskom" realizacijom algoritma

- za velike n možemo postići gotovo iste brzine kao i za male n (tj. spriječiti pad brzine).

Ovo, naravno, ide samo onda kad

- za velike n dobijemo pad brzine.

U protivnom, compiler se "već pobrinuo" da optimalno iskoristi cache.

Primjer za IVF da to radi za normal, pa čak i za fast opciju.

Blokovsko množenje matrica primjer

Blokovsko množenje matrica — primjer

IVF s normal opcijom za `jik` petlju daje brzine:

- 1050 MFlops za $n \leq 50$,
- 205 MFlops za velike n.

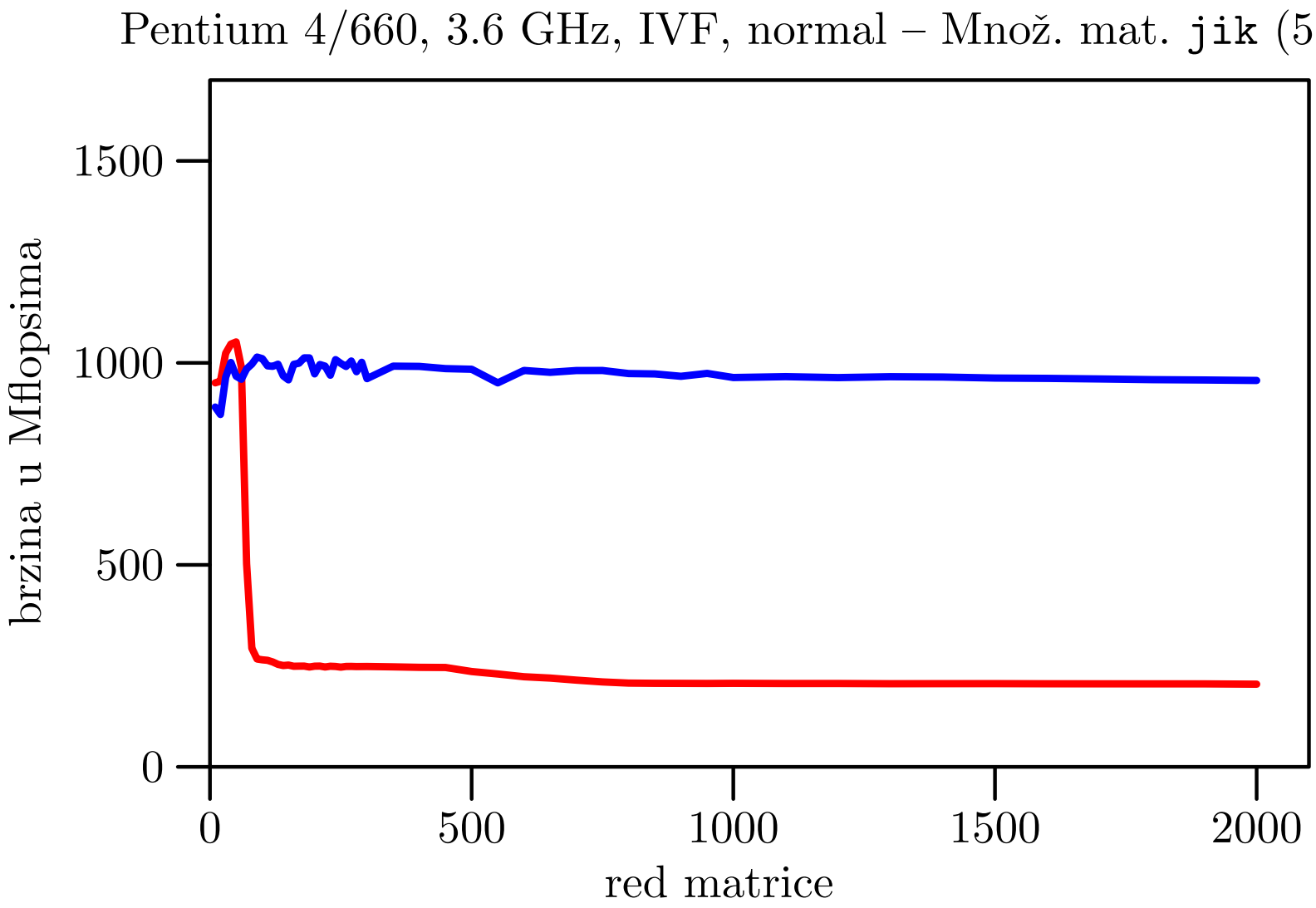
IVF s normal opcijom za `jki` petlju daje brzine:

- 1100 MFlops za $n \leq 300$,
- 840 MFlops za velike n.

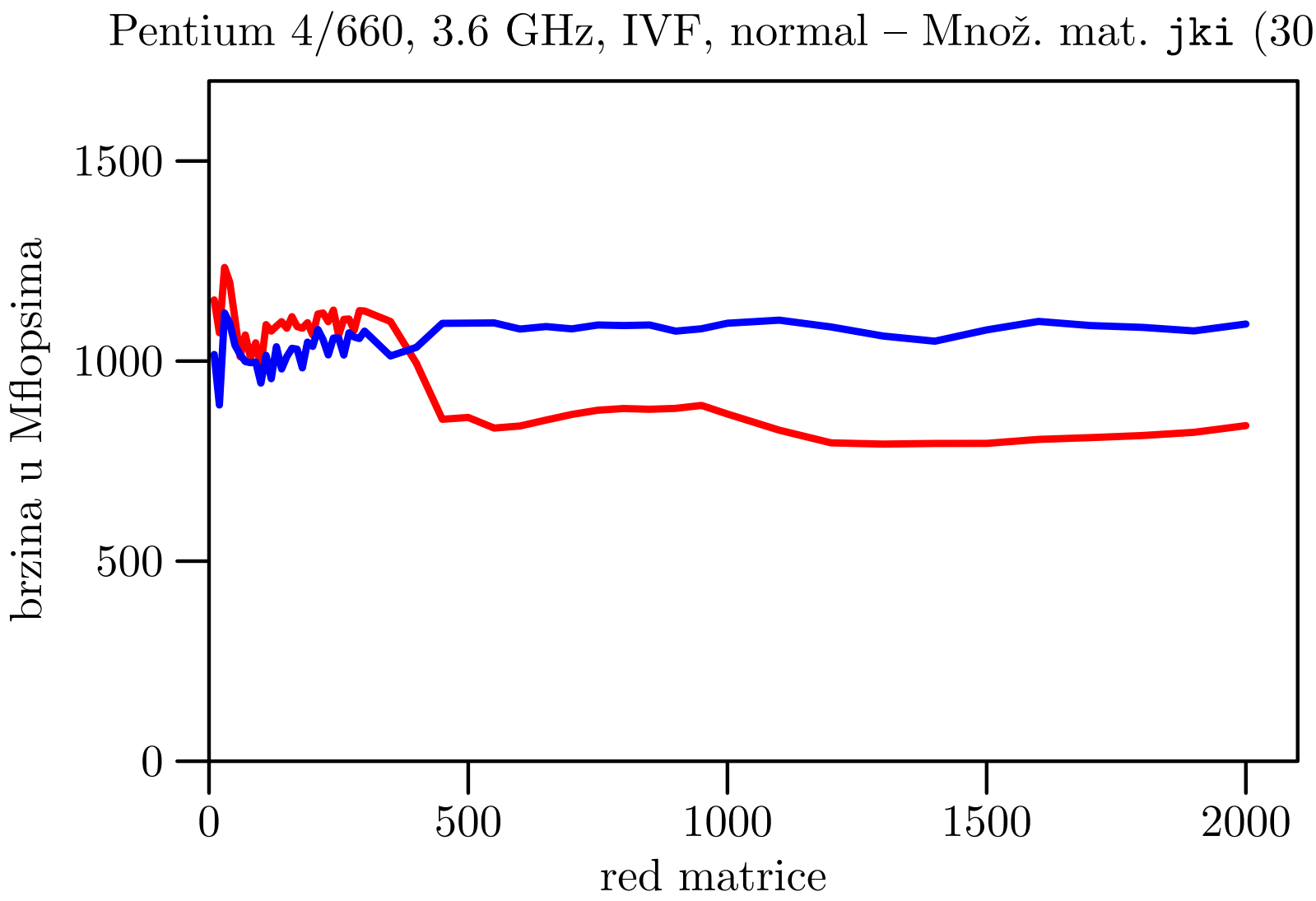
IVF s fast opcijom za `jki` petlju daje brzine:

- 2000 MFlops za $n \leq 300$,
- 1250 MFlops za velike n.

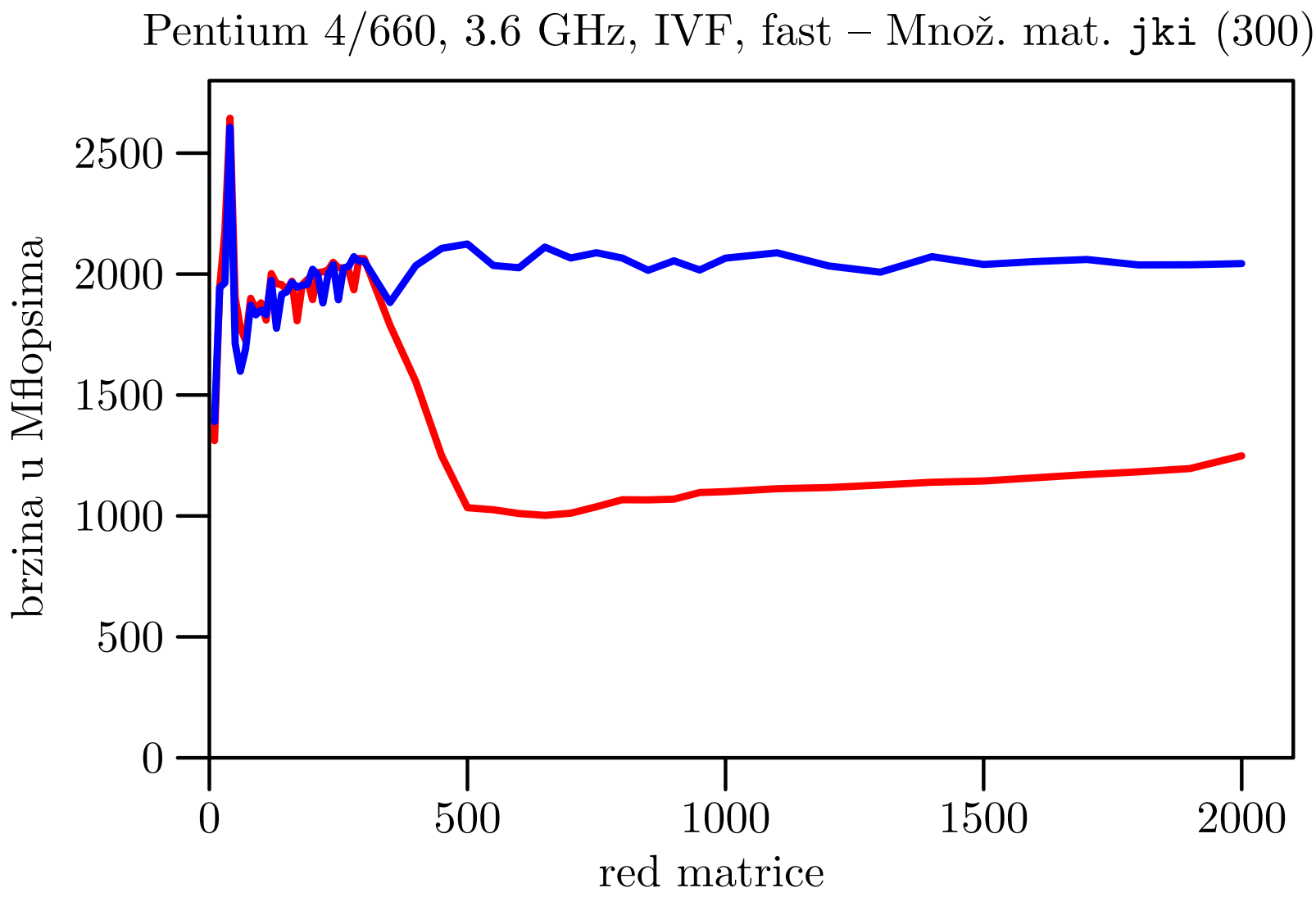
BabyBlue, IVF, normal — jik običnI i blok (50)



BabyBlue, IVF, normal — jki običnі i blok (300)



BabyBlue, IVF, fast — jki običnI i blok (300)



Blokovsko množenje matrica

Množenje matrica

Problem: Zadan je prirodni broj $n \in \mathbb{N}$ i 3 matrice A, B i C, reda n. Treba izračunati izraz

$$C := C + A * B.$$

Znamo da je realizacija po elementima trivijalna

$$c_{ij} := c_{ij} + \sum_{k=1}^{n} a_{ik} \cdot b_{kj},$$

za sve indekse

$$i = 1, \ldots, n, \quad j = 1, \ldots, n.$$

Dakle, "programski" — treba "zavrtiti" tri petlje.

Množenje matrica — realizacija po elementima

Programska realizacija na "skalarnoj" razini (po elementima) ima ovaj opći oblik:

- 3 petlje po i, j, k, svaka od 1 do n,
  - operacija unutar tih petlji je

$$c_{ij} := c_{ij} + a_{ik} \cdot b_{kj},$$

tj. množenje i zbrajanje skalara.

Ove tri petlje smijemo permutirati pa dobivamo 6 različitih varijanti osnovnog algoritma:

- `ijk`, `ikj`, `jik`, `jki`, `kij`, `kji`.

Množenje matrica — podjela na blokove

Matrice A i B možemo podijeliti na blokove

$$A = \left[\begin{array}{c|c|c|c} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1r} \\ \hline A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2r} \\ \hline \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \hline A_{p1} & A_{p2} & \cdots & A_{pr} \end{array}\right], \quad B = \left[\begin{array}{c|c|c|c} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1q} \\ \hline B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2q} \\ \hline \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \hline B_{r1} & B_{r2} & \cdots & B_{rq} \end{array}\right].$$

Ako su blokovi A_{ik} i B_{kj} takvi da se mogu množiti za sve indekse i, j, k, onda operaciju $C = C + A * B$ možemo izračunati "po blokovima", gdje je

$$C_{ij} = C_{ij} + \sum_{k=1}^{r} A_{ik} * B_{kj}, \quad i = 1, \ldots, p, \quad j = 1, \ldots, q.$$

Množenje matrica — blokovi (nastavak)

Podjela matrica A i B na blokove koji se mogu množiti inducira podijelu matrice C na blokove

$$C = \left[\begin{array}{c|c|c|c} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1q} \\ \hline C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2q} \\ \hline \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \hline C_{p1} & C_{p2} & \cdots & C_{pq} \end{array}\right].$$

Pojednostavljenje: sve tri ulazne matrice su kvadratne reda n

- pa ih dijelimo na isti način u blokove.

Dakle, $p = q = r =$ (oznaka) $= N$, gdje je N tzv. "blok–red" matrice.

Množenje matrica — blokovi (nastavak)

Podjela sve tri matrice A, B i C ima isti oblik (napisan za C)

$$C = \left[\begin{array}{c|c|c|c} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1N} \\ \hline C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2N} \\ \hline \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \hline C_{N1} & C_{N2} & \cdots & C_{NN} \end{array}\right].$$

Pojedini blokovi — podmatrice A_{ij}, B_{ij} i C_{ij} su

- matrice istog tipa, označimo ga s $n_i \times n_j$.

Uočite da blokovi ne moraju više biti kvadratne matrice — općenito su pravokutne.

Množenje matrica — blokovi (nastavak)

Za veličine blokova mora vrijediti

$$\sum_{i=1}^{N} n_i = n.$$

Kako se određuju veličine blokova n_i, za $i = 1, \ldots, N$ — malo kasnije.

Matrična operacija $C = C + A * B$ sad ima "blokovski" oblik

$$C_{ij} = C_{ij} + \sum_{k=1}^{N} A_{ik} * B_{kj}, \quad i = 1, \ldots, N, \quad j = 1, \ldots, N.$$

Množenje matrica — realizacija po blokovima

Programska realizacija na "blokovskoj" razini (po blokovima) ima ovaj opći oblik:

- 3 petlje po i, j, k, svaka od 1 do N,
  - operacija unutar tih petlji je

$$C_{ij} := C_{ij} + A_{ik} \cdot B_{kj},$$

tj. množenje i zbrajanje matrica.

Ova operacija ima isti oblik `xGEMM` kao i cijeli polazni problem ("rekurzija"), samo što matrice ne moraju biti kvadratne

$$(n_i \times n_j) = (n_i \times n_j) + (n_i \times n_k) * (n_k \times n_j).$$

Blokovsko množenje matrica — petlje

Tri petlje za blokove smijemo permutirati — pa dobivamo 6 različitih varijanti blokovskog algoritma:

- `ijk`, `ikj`, `jik`, `jki`, `kij`, `kji`.

Za "unutarnje" množenje pojedinih blokova, također, imamo odgovarajućih 6 varijanti osnovnog algoritma.

- Dakle, sve skupa, imamo 36 varijanti!

Tko hoće, neka proba sve. Ja neću.

U nastavku koristim

- istu varijantu (permutaciju petlji) i za blokovski i za osnovni (skalarni) algoritam.

Blokovsko množenje matrica — veličine blokova

Ideja: veličine blokova izabrati tako da se unutarnje množenje blokova

$$C_{ij} := C_{ij} + A_{ik} \cdot B_{kj}$$

(operacija `xGEMM`) obavlja u cacheu.

Postupak. Iz tablice brzina za odabrani osnovni algoritam

- nađemo približni maksimalni red n za koji još dobivamo punu "cache" brzinu.

Nazovimo taj red s n_{cache}.

Veličine blokova (nastavak)

Cilj podjele na blokove je

- unutarnje množenje blokova mora raditi s matricama veličine manje (ili jednake) n_{cache}.

Dakle, mora vrijediti

$$n_i \leq n_{\text{cache}}, \quad i = 1, \ldots, N.$$

Tome dodajemo raniji uvjet

$$\sum_{i=1}^{N} n_i = n.$$

Iz ovih uvjeta možemo odrediti broj blokova N.

Broj blokova N

Uvrstimo $n_i \leq n_{\text{cache}}$, za $i = 1, \ldots, N$, u relaciju za zbroj. Izlazi

$$n = \sum_{i=1}^{N} n_i \leq N \cdot n_{\text{cache}},$$

ili

$$N \geq \frac{n}{n_{\text{cache}}}.$$

Broj blokova N mora biti cijeli broj i još (prirodno) želimo da

- N bude što manji — najmanji mogući!

Onda treba uzeti

$$N = \left\lceil \frac{n}{n_{\text{cache}}} \right\rceil = \left\lfloor \frac{n + n_{\text{cache}} - 1}{n_{\text{cache}}} \right\rfloor.$$

Veličine blokova (nastavak)

Za nalaženje n_i standardno se koriste dva pristupa.

- "equal–sized" — svi n_i imaju podjednaku veličinu, tj. razlika među njima je najviše 1.
- "greedy" — svi n_i imaju maksimalnu veličinu n_{cache}, osim, eventualno, jednog od njih (prvi ili zadnji).

Ako želimo dobiti jednoznačnost rastava na blokove, zgodno je uzeti da su

- veličine blokova n_i sortirane — uzlazno ili silazno.

U nastavku uzimamo silazni poredak

$$n_1 \geq n_2 \geq \cdots \geq n_N.$$

"Equal–sized" — podjednake veličine blokova

Definiramo ostatak

$$n_r := n \bmod N.$$

Podjela na blokove izlazi iz rastava broja n oblika

$$n = \left\lfloor \frac{n}{N} \right\rfloor \cdot N + n_r = (N - n_r) \cdot \left\lfloor \frac{n}{N} \right\rfloor + n_r \cdot \left(\left\lfloor \frac{n}{N} \right\rfloor + 1 \right).$$

Veličine blokova n_i u silaznom poretku su

$$n_i = \begin{cases} \left\lfloor \frac{n}{N} \right\rfloor + 1, & \text{za } i = 1, \ldots, n_r, \\ \left\lfloor \frac{n}{N} \right\rfloor, & \text{za } i = n_r + 1, \ldots, N. \end{cases}$$

"Greedy" — maksimalne veličine blokova

Definiramo ostatak

$$n_r := n \bmod n_{\text{cache}}.$$

Podjela na blokove izlazi iz rastava broja n oblika

$$n = \left\lfloor \frac{n}{n_{\text{cache}}} \right\rfloor \cdot n_{\text{cache}} + n_r.$$

Veličine blokova n_i u silaznom poretku su

$$n_i = n_{\text{cache}}, \quad i = 1, \ldots, N-1,$$

$$n_N = \begin{cases} n_{\text{cache}}, & \text{za } n_r = 0 \text{ (tj. } n_{\text{cache}} \text{ dijeli } n), \\ n_r, & \text{za } n_r > 0. \end{cases}$$

Veličine blokova (nastavak)

U primjerima se koristi "equal–sized" podjela.

Napomena. Pravu (najbolju) vrijednost za n_{cache} određujemo

- testiranjem blokovskog algoritma!

(Taj treba biti što brži.)

Blokovsko množenje matrica — indeksi

I još, da nam se indeksi i oznake ne "pomiješaju"

- što indeksira blokove, a što elemente,

dodajemo podindeks "b" za sve što se odnosi na blokove.

Blokovsko množenje matrica — primjer

IVF s normal opcijom za `jik` petlju daje brzine:

- 1050 MFlops za $n \leq 50$,
- 205 MFlops za velike n.

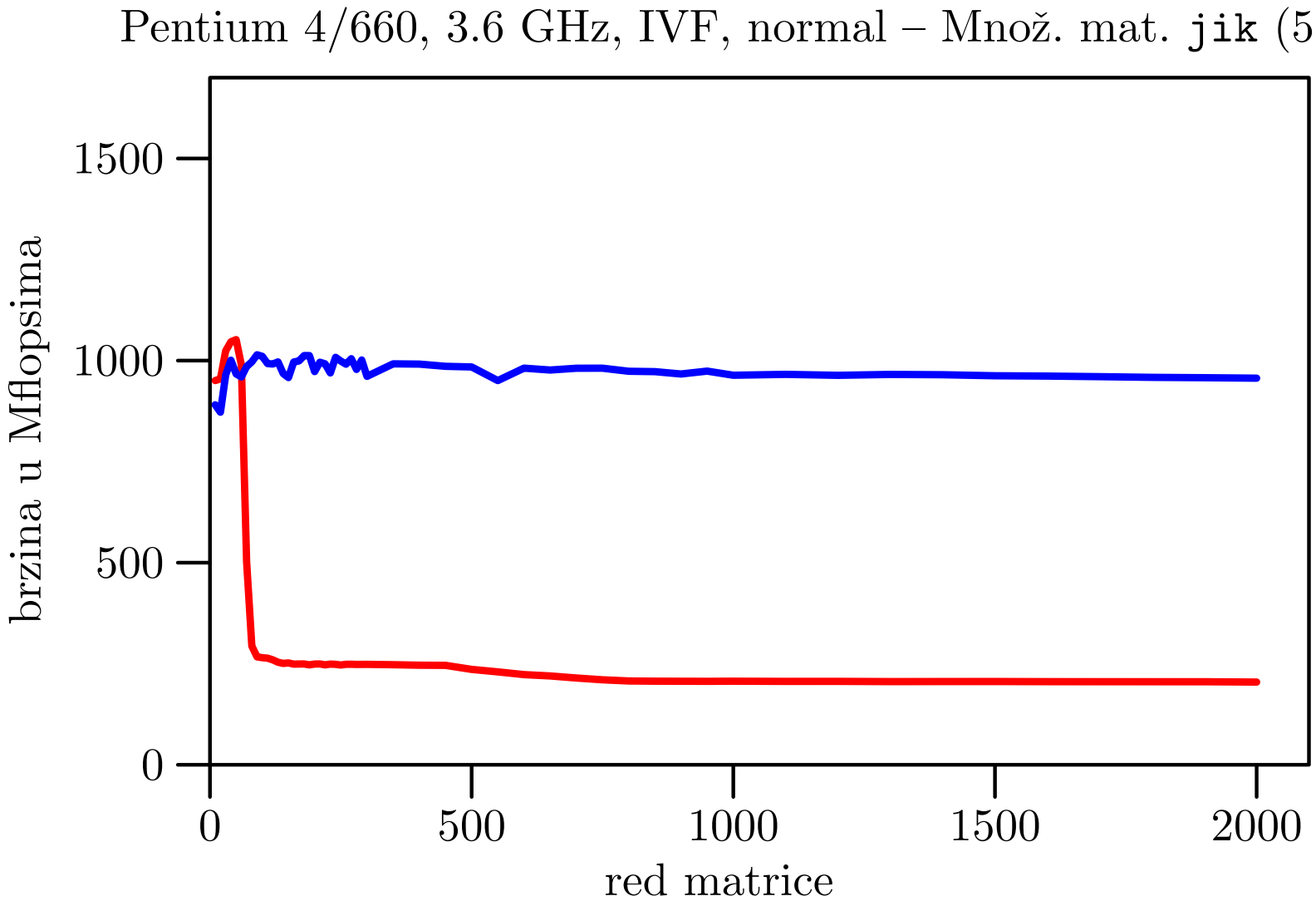
IVF s normal opcijom za `jki` petlju daje brzine:

- 1100 MFlops za $n \leq 300$,
- 840 MFlops za velike n.

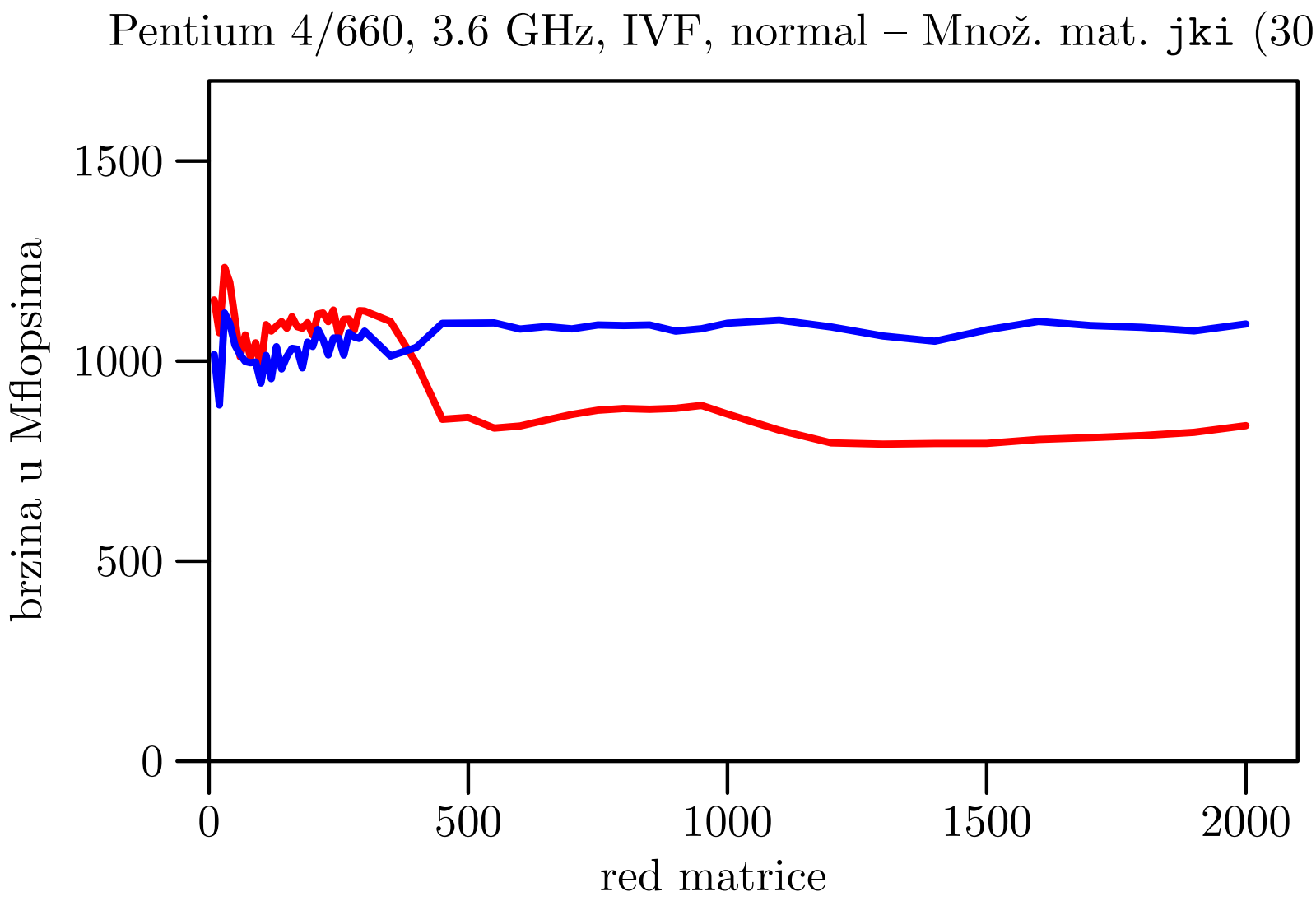
IVF s fast opcijom za `jki` petlju daje brzine:

- 2000 MFlops za $n \leq 300$,
- 1250 MFlops za velike n.

BabyBlue, IVF, normal — jik običnи i blok (50)



BabyBlue, IVF, normal — jki običnі i blok (300)



BabyBlue, IVF, fast — jki običnI i blok (300)