PA081: Programování numerických výpočtů

8. Lineární algebra rychle

Aleš Křenek

jaro 2012

Motivace

- proč má smysl optimalizovat právě algoritmy lineární algebry?
- frekventované problémy
  - řešení lineárních rovnic, včetně velkých
  - řešení nelineárních rovnic
  - optimalizace
  - metoda konečných prvků
  - ...

Motivace

- proč má smysl optimalizovat právě algoritmy lineární algebry?
- frekventované problémy
  - řešení lineárních rovnic, včetně velkých
  - řešení nelineárních rovnic
  - optimalizace
  - metoda konečných prvků
  - ...
- cíle této přednášky
  - zdánlivě jednoduché algoritmy (násobení matic) lze výrazně vylepšit
  - problematika se stále vyvíjí
  - naznačíme směry, kterými se lze vydat
  - rafinované algoritmy už jednou někdo vymyslel a implementoval
  - nemá smysl učit se je nazpaměť
  - stačí o nich vědět a rozumět základní myšlence

Vyrovnávací paměti

- hlavní paměť je řádově pomalejší než procesor
  - rychlou paměť v plné velikosti je technicky/finančně nemožné vyrobit
- hierarchie vyrovnávacích pamětí (cache)
- pro Intel Nehalem/Westmere
  - L1 – plná rychlost, 32 kB instrukce, 32 kB data/jádro
  - L2 – latence 10 cyklů, 256 kB/jádro
  - L3 – latence 40 cyklů, 8 MB/procesor (sdílená mezi jádry)

Vyrovnávací paměti

Organizace přístupu

- řádky (cache-line)
  - typicky 64 B (16× `float`, 8× `double`)
- přímo mapovaná cache
  - blok dat z hlavní paměti má dán jeden řádek v cache

    (adresa/velikost řádku) % počet řádků
  - snadno dojde ke kolizím, např. pro 32 kB

```
double pole[100][512][8];
for (i=0; i<100; i++) a += pole[i][0][0];
```

  - řešením je deklarace `pole[100][513][8]`

Vyrovnávací paměti

Organizace přístupu

- plně asociativní
  - blok dat z hlavní paměti může být umístěn v kterémkoli řádku
  - implementačně náročné, ve standardních CPU se nepoužívá
- n-cestná asociativní
  - kompromisní řešení
  - sady po n řádcích
  - blok z hlavní paměti může skončit v kterémkoli řádku sady
  - Intel Nehalem/Westmere: $n = 8$

Vyrovnávací paměti

Praktické zásady

- optimalizovat pro všechny úrovně
- využít celý řádek
  - např. může se vyplatit transponovat matici
- dovolit procesoru/kompilátoru současně přenášet data a počítat
  - dobře čitelný kód bez možných vedlejších efektů
- zabránit předčasným kolizím v jedné sadě řádků
- měřit dosažený výkon (flop/s)
- atd. . . .

Vyrovnávací paměti

Praktické zásady

- optimalizovat pro všechny úrovně
- využít celý řádek
  - např. může se vyplatit transponovat matici
- dovolit procesoru/kompilátoru současně přenášet data a počítat
  - dobře čitelný kód bez možných vedlejších efektů
- zabránit předčasným kolizím v jedné sadě řádků
- měřit dosažený výkon (flop/s)
- atd. . . .
- aplikovat jen pro skutečně kritické sekce kódu
- používat speciální optimalizované knihovny, kde to jde

Blokové algoritmy

- zjednodušený model jen s L1
- násobení vektoru maticí $\mathbf{y} := \mathbf{y} + \mathbf{A}\mathbf{x}$

načti $\mathbf{x}$ do cache
načti $\mathbf{y}$ do cache
for $i = 1, \ldots, n$
    načti řádek A_{i*} do cache
    for $j = 1, \ldots, n$
        $y_i = y_i + A_{ij}x_j$
zapiš $\mathbf{y}$ do hlavní paměti

- počet přístupů do pomalé paměti $m = 3n + n^2$
- počet aritmetických operací $f = 2n^2$
- efektivita $f/m \approx 2$
- algoritmus je limitovaný rychlostí paměti
  - pomůže recyklace řádků cache – vyplatí se ukládat vektory spojitě, ne jako sloupce matice (v C)
  - jinak se s tím nedá nic moc dělat

Blokové algoritmy

Maticové násobení

- násobení matic $\mathbf{C} = \mathbf{C} + \mathbf{AB}$

```
for i = 1,...,n
    načti řádek A_{i*} do cache
    for j = 1,...,n
        načti C_{ij} do cache
        načti sloupec B_{*j} do cache
        for k = 1,...,n
            C_{ij} = C_{ij} + A_{ik}B_{kj}
        zapiš C_{ij} do hlavní paměti
```

- přístupy do paměti $m = n^2 + n^3 + 2n^2$
- aritmetické operace $f = 2n^3$
- efektivita opět ≈ 2

Blokové algoritmy

Maticové násobení

- matice rozdělíme na N^2 bloků velikosti $b \times b, b = n/N$

```
for i = 1,...,N
    for j = 1,...,N
        načti blok C_ij do cache
        for k = 1,...,N
            načti blok A_ik do cache
            načti blok B_kj do cache
            C_ij = C_ij + A_ik B_kj (maticové násobení)
        zapiš blok C_ij do cache
```

- přístupy do paměti
  - čtení bloků **A**: $N^3 (n/N)^2 = N * n^2$
  - dtto **B**: $N * n^2$
  - čtení a zápis **C**: $2n^2$
- efektivita $f/m = \frac{2n^3}{(2N+2)n^2} \approx b$

Blokové algoritmy

Maticové násobení

- velikost reálné L1 cache je 32 kB,
- do L1 se vejdou 3 matice velikosti 36×36 (v `double`)
- L2 cache je $10\times$ pomalejší
- procesor je dobře využit
  - i při využití vektorových instrukcí
  - proto je cache právě tak velká
- žádoucí aplikovat rekurzivně i pro L2 a L3
- implementováno v optimalizovaných knihovnách
- násobení matic je na současných procesorech jeden z nejefektivnějších algoritmů
  - redukce problému na mat. násobení při řádovém zachování počtu operací téměř vždy vede k výraznému zrychlení

Knihovna BLAS

- *Basic Linear Algebra Subprograms*, `http://www.netlib.org/blas`
- základní operace, např.
  - `DOT`: $\mathbf{xy}$
  - `AXPY`: $\mathbf{y} + \mathbf{Ax}$
  - `NRM2`: $|\mathbf{x}|^2$
  - `TRMV`: $\mathbf{Ax}$
  - `TRSV`: $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{x}$
  - `GEMM`: $\beta\mathbf{C} + \alpha\mathbf{AB}$
- verze pro typy `float`,`double`,`complex`
- specializované varianty pro symetrické, trojúhelníkové, a některé řídké matice
- de-facto standardizované rozhraní
- implementace vyladěné pro konkrétní typy CPU
- využívané v knihovnách vyšší úrovně (např. LU dekompozice)

Asymptotická složitost

- časová složitost násobení matic je $O(n^3)$

Asymptotická složitost

- časová složitost násobení matic je $O(n^3)$
- Strassen (1969): $O(n^{2.81})$
- rozdělení matic na 2×2 bloky, potom

$$\mathbf{M}_1 = (\mathbf{A}_{11} + \mathbf{A}_{22})(\mathbf{B}_{11} + \mathbf{B}_{22})$$
$$\mathbf{M}_2 = (\mathbf{A}_{21} + \mathbf{A}_{22})\mathbf{B}_{11}$$
$$\mathbf{M}_3 = \mathbf{A}_{11}(\mathbf{B}_{12} + \mathbf{B}_{22})$$
$$\mathbf{M}_4 = \mathbf{A}_{22}(\mathbf{B}_{21} - \mathbf{B}_{11})$$
$$\mathbf{M}_5 = (\mathbf{A}_{11} + \mathbf{A}_{12})\mathbf{B}_{22}$$
$$\mathbf{M}_6 = (\mathbf{A}_{21} - \mathbf{A}_{11})(\mathbf{B}_{11} + \mathbf{B}_{12})$$
$$\mathbf{M}_7 = (\mathbf{A}_{12} - \mathbf{A}_{22})(\mathbf{B}_{21} + \mathbf{B}_{22})$$

$$\mathbf{C}_{11} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_4 - \mathbf{M}_5 + \mathbf{M}_7$$
$$\mathbf{C}_{12} = \mathbf{M}_3 + \mathbf{M}_5$$
$$\mathbf{C}_{21} = \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_4$$
$$\mathbf{C}_{22} = \mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_3 + \mathbf{M}_6$$

- rekurzivní aplikace, počet operací $T(n)$

$$T(n) = 7T(n/2) + 18(n/2)^2 = O(n^{\log_2 7}) = O(n^{2.81})$$

Asymptotická složitost

- časová složitost násobení matic je $O(n^3)$
- Strassen (1969): $O(n^{2.81})$
- rozdělení matic na 2×2 bloky, potom

$$\mathbf{M}_1 = (\mathbf{A}_{11} + \mathbf{A}_{22})(\mathbf{B}_{11} + \mathbf{B}_{22})$$
$$\mathbf{M}_2 = (\mathbf{A}_{21} + \mathbf{A}_{22})\mathbf{B}_{11}$$
$$\mathbf{M}_3 = \mathbf{A}_{11}(\mathbf{B}_{12} + \mathbf{B}_{22})$$
$$\mathbf{M}_4 = \mathbf{A}_{22}(\mathbf{B}_{21} - \mathbf{B}_{11})$$
$$\mathbf{M}_5 = (\mathbf{A}_{11} + \mathbf{A}_{12})\mathbf{B}_{22}$$
$$\mathbf{M}_6 = (\mathbf{A}_{21} - \mathbf{A}_{11})(\mathbf{B}_{11} + \mathbf{B}_{12})$$
$$\mathbf{M}_7 = (\mathbf{A}_{12} - \mathbf{A}_{22})(\mathbf{B}_{21} + \mathbf{B}_{22})$$

$$\mathbf{C}_{11} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_4 - \mathbf{M}_5 + \mathbf{M}_7$$
$$\mathbf{C}_{12} = \mathbf{M}_3 + \mathbf{M}_5$$
$$\mathbf{C}_{21} = \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_4$$
$$\mathbf{C}_{22} = \mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_3 + \mathbf{M}_6$$

- rekurzivní aplikace, počet operací $T(n)$

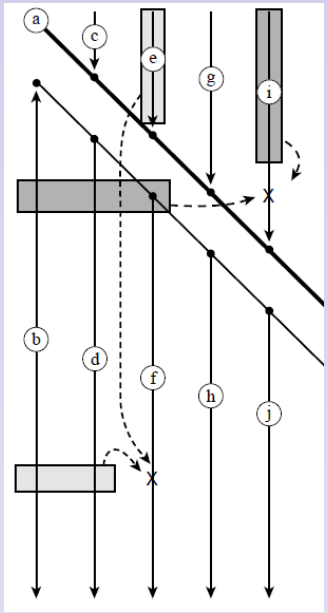
$$T(n) = 7T(n/2) + 18(n/2)^2 = O(n^{\log_2 7}) = O(n^{2.81})$$

- Coppersmith-Winograd (1987): $O(n^{2.376})$

LU dekompozice

- rekurzivní formulace algoritmu

$$\left(\begin{array}{c|cc} \mathbf{A}_{00} & \mathbf{a}_{01} & \mathbf{A}_{02} \\ \hline \mathbf{a}_{10}^T & \alpha_{11} & \mathbf{a}_{12}^T \\ \mathbf{A}_{20} & \mathbf{a}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{array}\right)$$



- skalární a bloková verze

$$\mathbf{a}_{21} = \mathbf{a}_{21} / \alpha_{11}$$
$$\mathbf{a}_{12}^T \quad \text{zůstává}$$
$$\mathbf{A}_{22} = \mathbf{A}_{22} - \mathbf{a}_{21}\mathbf{a}_{12}$$

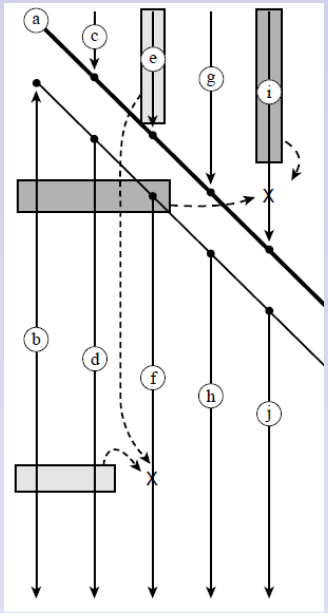
$$\left(\frac{\mathbf{A}_{11}}{\mathbf{A}_{21}}\right) = LU\left(\frac{\mathbf{A}_{11}}{\mathbf{A}_{21}}\right)$$
$$\mathbf{A}_{12} = \mathbf{L}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}$$
$$\mathbf{A}_{22} = \mathbf{A}_{22} - \mathbf{L}_{21}\mathbf{A}_{12}$$

- podstatná část operací je násobení matic
- takto implementuje knihovna LAPACK

LU dekompozice

- rekurzivní formulace algoritmu

$$\left(\begin{array}{c|cc} \mathbf{A}_{00} & \mathbf{a}_{01} & \mathbf{A}_{02} \\ \hline \mathbf{a}_{10}^T & \alpha_{11} & \mathbf{a}_{12}^T \\ \mathbf{A}_{20} & \mathbf{a}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{array}\right)$$



- skalární a bloková verze

$$\mathbf{a}_{21} = \mathbf{a}_{21} / \alpha_{11}$$
$$\mathbf{a}_{12}^T \quad \text{zůstává}$$
$$\mathbf{A}_{22} = \mathbf{A}_{22} - \mathbf{a}_{21}\mathbf{a}_{12}$$

$$\left(\frac{\mathbf{A}_{11}}{\mathbf{A}_{21}}\right) = LU\left(\frac{\mathbf{A}_{11}}{\mathbf{A}_{21}}\right)$$
$$\mathbf{A}_{12} = \mathbf{L}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}$$
$$\mathbf{A}_{22} = \mathbf{A}_{22} - \mathbf{L}_{21}\mathbf{A}_{12}$$

- podstatná část operací je násobení matic
- takto implementuje knihovna LAPACK
- problém algoritmu – „dlouhé“ matice $\mathbf{A}_{21}$ a $\mathbf{A}_{12}$
- Quintana et. al (2008): algoritmus s bloky $2p \times p$

Paralelní blokové algoritmy

- paralelismus na úrovni BLAS
  - existují optimalizované implementace
  - implicitní synchronizace na konci každého volání
  - nemusí být dosažitelný optimální výkon
- blokové operace jsou efektivní provedené vcelku
  - všechna data se dostanou naráz do cache
  - na úrovni L1/L2 se vyplatí na jednom jádru CPU
- vzájemně nezávislé blokové operace na více jádrech

Paralelní blokové algoritmy

- Quintana et. al (2008) – prototypová implementace SuperMatrix
  - konkrétní algoritmus proběhne „abstraktně“
  - blokové operace s deklarovanými závislostmi se pouze zařadí do fronty
  - následně se vyhodnotí pořadí zpracování
  - operace se provedou potenciálně paralelně
- čitelná formulace algoritmu bez explicitního paralelismu
- efektivní provedení
  - matice $n > 5000$
  - 16 jader CPU
  - LU dekompozice na více než 50 % teoretického výkonu

Vektorové instrukce

- historie – např. Cray v předsálí budovy D
- současné vektorové systémy (např. NEC SX)
  - řešení velmi specializovaných problémů
  - nízký výkon na skalárních operacích
- vektorová rozšíření v architektuře x86
  - MMX: pouze celá čísla, kolize s float registry
  - SSE: 8 (16) registrů po 128 bitech, postupně přidávané instrukce (rsqrt)
  - AVX: 256 bitové registry, 3-operandové instrukce
- snažší využití plného výkonu procesoru

Vektorové instrukce

- triviální příklad

```
        float a[4],b[4];
        int     i;
        for (i=0; i<4; i++) a[i] += b[i];
...
        movaps    32(%rsp), %xmm0
        addps     (%rsp), %xmm0
        movaps    %xmm0, 32(%rsp)
```

- vektorizaci kódu provede chytřejší kompilátor (icc)
  - musíme hlídat, abychom tomu nebránili
  - recyklace proměnných, vedlejší efekty in-line funkcí, ...
  - vyplatí se kontrola vygenerovaného assembleru

Využití GPU

- téměř vše, co platí o cache, platí také o GPU
  - rychlá paměť omezené velikosti
  - netriviální režie kopírování z/do hlavní paměti
- paralelní kód
  - daleko masivnější (desítky až stovky)
- viz PV197: GPU Programming