

- $LATEX$ of README.md may fail to display on GitHub. For better experience, pls check [report in pdf format](#).

CS205 C/ C++ Programming Project04

Matrix Multiplication in C

Name: 樊斯特(Fan Site)

SID: 12111624

项目结构

Part 1 - Analysis

题目重述&主要思路

本题目要求使用C语言实现正确而尽可能高效的矩阵乘法，使用 OpenMP, SIMD 等工具提升效率，并与 OpenBLAS 库中的矩阵乘法在各平台进行效率比较。

根据题目描述，题目要求的矩阵乘法需要支持的主要功能为：

1. 实现朴素乘法，用于检验高效矩阵乘法的正确性
2. OpenMP, SIMD 等工具实现提升效率的矩阵乘法
3. 测试 16×16 、 128×128 、 $1k \times 1k$ 、 $8k \times 8k$ 、 $64k \times 64k$ 等尺寸的矩阵乘法效率
4. 与 OpenBLAS 进行效率比较
5. 进行 ARM、x86 等多平台效率测试

本项目完成了上述基础要求，并在其中几项进行了拓展，本次报告将侧重于矩阵乘法的优化过程，与上次报告重复处将略讲，详见下文。

模型假设

本项目按题设要求继承了前一项目的数据类型，在实现矩阵乘法时以效率为主，小幅降低了安全性检查的严格程度。

- 单个元素均为4字节 float 类型，有效位数默认为6位，数据范围约 $-3.4 * 10^{-38} < val < 3.4 * 10^{38}$
- 参与运算的矩阵均为方阵，且阶数为8的倍数
- 可接受 <0.01 的单精度浮点数计算误差

Part 2 - Code

宏与结构体

```
//matrix.c
#define float_equal(x, y) ((x-y)<1e-3&&(y-x)<1e-3)

typedef struct Matrix_
{
    size_t row;
    size_t col;
    float *data;
} Matrix;
```

在题设条件下，矩阵尺寸默认 $row = col$ (其实可以存成一个，但部分矩阵乘法函数简单修改后可支持非方阵情况)，使用 `size_t` 存储，满足跨平台需求。

使用浮点型指针指向存储数据，采用行优先方式存储，空间由创建函数动态分配，分配后可通过释放函数释放。

创建、释放与合法性检查

```
//matrix.c
Matrix *createMatFromArr(size_t row, size_t col, float *src)
{
    if (row==0 || col==0)
    {
        fprintf(stderr, "Rows/cols number is 0.\n");
        return NULL;
    }
    if(src==NULL)
    {
        fprintf(stderr, "Source array is NULL.\n");
        return NULL;
    }
    Matrix *pMatrix = malloc(sizeof(Matrix));
    if (pMatrix == NULL)
    {
        fprintf(stderr, "Failed to allocate memory for a matrix.\n");
        return NULL;
    }
    pMatrix->row = row;
    pMatrix->col = col;
    pMatrix->data = malloc(sizeof(float) * row * col);
    if (pMatrix->data == NULL)
    {
        fprintf(stderr, "Failed to allocate memory for the matrix data.\n");
        free(pMatrix);
        return NULL;
    }
    memcpy(pMatrix->data, src, sizeof(float)*row*col);
    return pMatrix;
}
```

以从数组创建矩阵为例，本项目该部分与前一项目的差别在于：优化了安全性检查与报错，使用 `fprintf` 的 `stderr` 报错，使其变得更加合理和规范，同时采用了 `memcpy()` 代替手动赋值。

```

//matrix.c
bool releaseMat(Matrix **pMatrix)
{
    if (pMatrix == NULL)
    {
        fprintf(stderr, "Pointer to the pointer of matrix is NULL.\n");
        return false;
    }
    if ((*pMatrix) == NULL)
    {
        fprintf(stderr, "The pointer to the matrix is NULL.\n");
        return false;
    }
    if ((*pMatrix)->data == NULL)
    {
        fprintf(stderr, "The pointer to the matrix data is NULL.\n");
        return false;
    }
    free((*pMatrix)->data);
    free(*pMatrix);
    *pMatrix = NULL;
    return true;
}

```

释放矩阵与此前的差别同样在与报错与安全性的优化。

```

//matmul.c
bool safe_check(Matrix *src1, Matrix *src2, Matrix *dst)
{
    if (src1 == NULL)
    {
        fprintf(stderr, "File %s, Line %d, Function %s(): The 1st parameter is NULL.\n", __FILE__, __LINE__, __FUNCTION__);
        return false;
    }
    else if (src1->data == NULL)
    {
        fprintf(stderr, "%s(): The 1st parameter has no valid data.\n", __FUNCTION__);
        return false;
    }
    if (src2 == NULL)
    {
        fprintf(stderr, "File %s, Line %d, Function %s(): The 2nd parameter is NULL.\n", __FILE__, __LINE__, __FUNCTION__);
        return false;
    }
    else if (src2->data == NULL)
    {
        fprintf(stderr, "%s(): The 2nd parameter has no valid data.\n", __FUNCTION__);
        return false;
    }
}

```

```

    }
    if (dst == NULL)
    {
        fprintf(stderr, "File %s, Line %d, Function %s(): The 3rd parameter is
NULL.\n", __FILE__, __LINE__,
            __FUNCTION__);
        return false;
    }
    else if (dst->data == NULL)
    {
        fprintf(stderr, "%s(): The 3rd parameter has no valid data.\n",
__FUNCTION__);
        return false;
    }
    if (src1->row != src1->col || src1->row != src2->row || src1->col != src2-
>col || src1->row != dst->row || src1->col != dst->col)
    {
        fprintf(stderr, "The input and the output do not match, they should have
the same square size.\n");
        fprintf(stderr, "Their sizes are (%zu,%zu), (%zu,%zu) and (%zu,%zu).\n",
            src1->row, src1->col, src2->row, src2->col, dst->row, dst->col);
        return false;
    }
    return true;
}

```

在进行矩阵乘法前，本项目对三个参数矩阵都进行了安全性检查，并用更规范的形式报错和处理。此处的最后一个 `if` 限定了三个矩阵应均为方阵，修改条件后可解除方阵要求。

矩阵乘法

```

//matmul.h
bool safe_check(Matrix *src1, Matrix *src2, Matrix *dst);

bool matmul_plain(Matrix *src1, Matrix *src2, Matrix *dst);

bool matmul_divide(Matrix *src1, Matrix *src2, Matrix *dst);

bool matmul_omp(Matrix *src1, Matrix *src2, Matrix *dst);

bool matmul_avx_vec8(Matrix *src1, Matrix *src2, Matrix *dst);

bool matmul_avx_block8(Matrix *src1, Matrix *src2, Matrix *dst);

bool matmul_thread(Matrix *src1, Matrix *src2, Matrix *dst, size_t num_threads);

```

项目实现了6个矩阵乘法函数，依次为：朴素乘法，4×4分块乘法，OpenMP 优化朴素乘法，向量点乘级 SIMD 优化朴素乘法，SIMD 优化8×8分块乘法，手动多线程算法(基于 `pthread.h`)。

下文将逐个展开解析优化策略和原理，效率比较部分将在后文体现。


```

        {
            for (size_t k2 = 0; k2 < 4; k2++)
            {
                data3[(i + i2) * n + (j + j2)] += data1[(i + i2) * n
+ (k + k2)] * data2[(k + k2) + (j + j2) * n];
            }
        }
    }
}
return true;
}

```

硬件优化：在大规模矩阵乘法时，两个元素间隔可能很远，因此CPU往往需要将两个元素都加载进 `cache`，耗费大量访存时间。考虑到小矩阵的数据可以存储进 `cpu cache` 中，我们可以将原先的大矩阵按行和列切割成若干4×4的小块再进行运算。同时，通过转置矩阵将内存访问变得连续。

OpenMP优化朴素乘法

```

bool matmul_omp(Matrix *src1, Matrix *src2, Matrix *dst)
{
    if (!safe_check(src1, src2, dst))
    {
        return false;
    }
    register size_t n = src1->row;
    register size_t k, j;
#pragma omp parallel
    {
        #pragma omp for private(k, j)
        for (register size_t i = 0; i < n; i++)
        {
            size_t i_n = i * n;
            for (k = 0; k < n; k++)
            {
                float t = src1->data[i_n + k];
                size_t k_n = k * n;
                for (j = 0; j < n; j++)
                {
                    dst->data[i_n + j] += t * src2->data[k_n + j];
                }
            }
        }
    }
    return true;
}

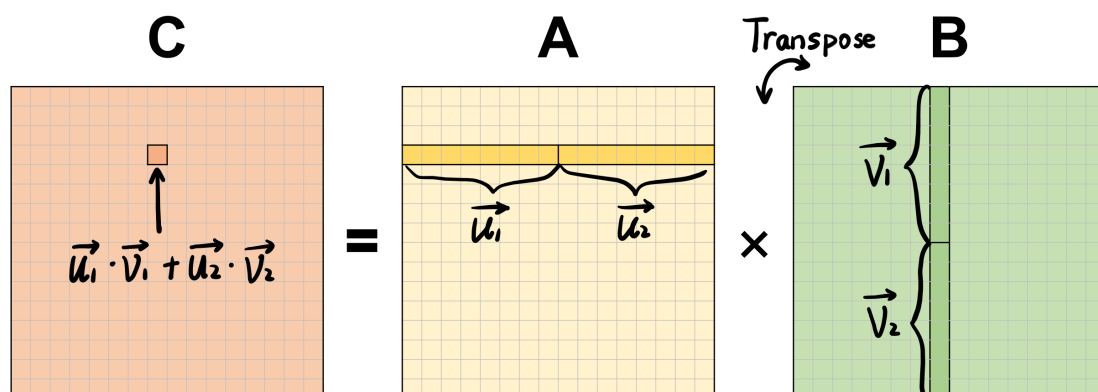
```

硬件优化：将原本串行执行的多次乘法通过 `OpenMP` 变为多线程并行，双线程效率较单线程折半，四线程较双线程接近折半，不过在线程数增加的过程中耗时减少的幅度逐渐降低，但总体而言较朴素算法有若干倍的提升，详见下文测试部分。

向量化SIMD优化

```
bool matmul_avx_vec8(Matrix *src1, Matrix *src2, Matrix *dst)
{
    if (!safe_check(src1, src2, dst))
    {
        return false;
    }
    size_t n = src1->row;
    size_t k, j;
    float *data1 = src1->data;
    float *data2 = transpose(src2->data, n);
    float *data3 = dst->data;
#pragma omp parallel
    for (size_t i = 0; i < n; i++)
    {
#pragma omp for private(k, j)
        for (j = 0; j < n; j++)
        {
            __m256 sx = _mm256_setzero_ps();
            for (k = 0; k < n; k += 8)
            {
                sx = _mm256_add_ps(sx, _mm256_mul_ps(_mm256_loadu_ps(data1 + i *
n + k), _mm256_loadu_ps(data2 + j * n + k)));
            }
            sx = _mm256_add_ps(sx, _mm256_permute2f128_ps(sx, sx, 1));
            sx = _mm256_hadd_ps(sx, sx);
            data3[i * n + j] = _mm256_cvtss_f32(_mm256_hadd_ps(sx, sx));
        }
    }
    return true;
}
```

由于计算对象矩阵默认阶数为8的倍数，因此可以将8个连续的元素使用 `__m256` 进行合并，再进行批量乘法。在使用了 OpenMP 并行优化的基础上，进行维数为8的向量乘法代替8次串行的逐元素运算，将效率再次大幅提高。



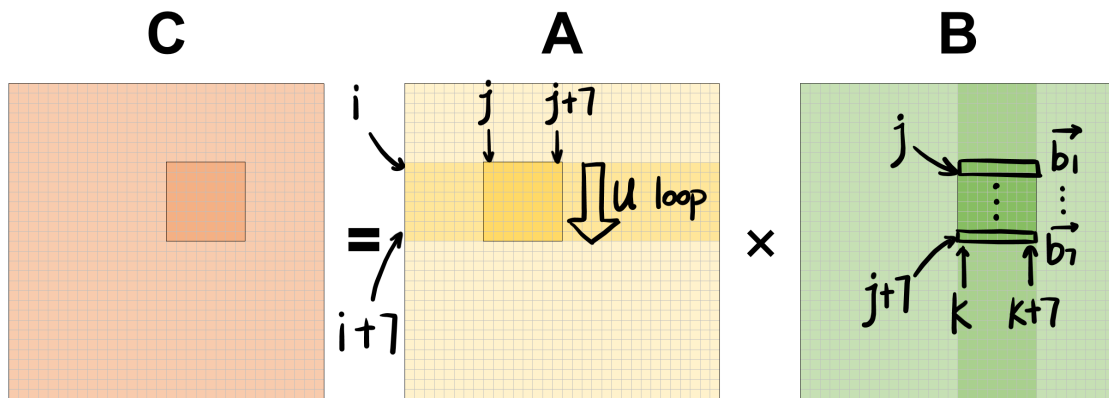

```

__m256 t_6 = _mm256_add_ps(t_3, t_4);
__m256 t_7 = _mm256_add_ps(t_5, t_6);

__m256 t_c = _mm256_loadu_ps(data3 + u * n + k);
__m256 t_8 = _mm256_add_ps(t_7, t_c);

_mm256_storeu_ps(data3 + u * n + k, t_8);
    }
    }
}
return true;
}

```



这是上述计算过程的图像解释，我们每次将 B 中的8个元素合并载入`__m256`，再将 A 中的单个元素广播载入`__m256`，二者批量相乘后再累加至对应8个元素中，通过 u 的循环就可以得到 8×8 分块的值。

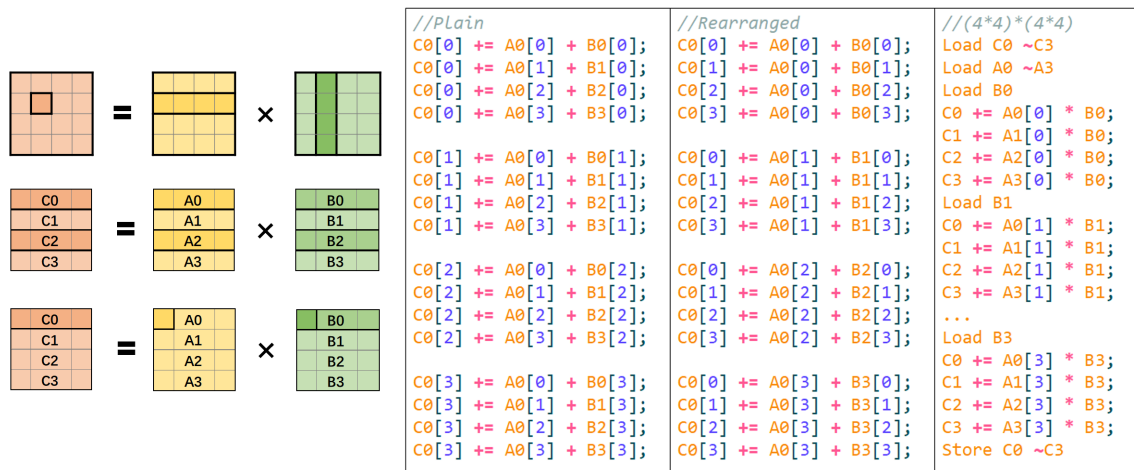
为了便于说明，我们以 4×4 的例子入手讲解，以下是计算 $c[0][0..3]$ 的式子

```

C0[0] += A0[0] + B0[0];  C0[0] += A0[1] + B1[0];  C0[0] += A0[2] + B2[0];  C0[0] += A0[3] + B3[0];
C0[1] += A0[0] + B0[1];  C0[1] += A0[1] + B1[1];  C0[1] += A0[2] + B2[1];  C0[1] += A0[3] + B3[1];
C0[2] += A0[0] + B0[2];  C0[2] += A0[1] + B1[2];  C0[2] += A0[2] + B2[2];  C0[2] += A0[3] + B3[2];
C0[3] += A0[0] + B0[3];  C0[3] += A0[1] + B1[3];  C0[3] += A0[2] + B2[3];  C0[3] += A0[3] + B3[3];

```

对于朴素乘法，我们对上述16个式子是“行优先”执行的，但如果按“列优先”的视角重排后，我们发现 A 可以一次性载入用作输出的计算，对于 B 则逐行拆分使用。利用AVX指令集，我们将四个元素的访存与计算向量化，则能达到提高效率的目的。



<pthread.h>多线程

```
#include <pthread.h>

struct PartialMatMulParams
{
    size_t fromColumn, toColumn, n;
    float *a, *b, *c;
};

void *partialMatMul(void *params)
{
    struct PartialMatMulParams *p = (struct PartialMatMulParams *)params;
    size_t n = p->n;
    float *a = p->a;
    float *b = p->b;
    float *c = p->c;

#pragma omp parallel for
    for (size_t i = p->fromColumn; i < p->toColumn; i++)
    {
        for (size_t j = 0; j < n; j++)
        {
            for (size_t k = 0; k < n; k++)
            {
                c[j * n + i] += a[j * n + k] * b[k * n + i];
            }
        }
    }
    return NULL;
}

bool matmul_thread(Matrix *src1, Matrix *src2, Matrix *dst, size_t num_threads)
{
    if (!safe_check(src1, src2, dst))
    {
        return false;
    }
    register size_t n = src1->row;
    float *data1 = src1->data;
    float *data2 = src2->data;
    float *data3 = dst->data;
    pthread_t *threads = malloc(sizeof(pthread_t) * num_threads);
    struct PartialMatMulParams *params = malloc(sizeof(struct PartialMatMulParams) * num_threads);

    for (size_t i = 0; i < num_threads; i++)
    {
        params[i].a = data1;
        params[i].b = data2;
        params[i].c = data3;
        params[i].n = n;

        params[i].fromColumn = i * (n / num_threads);
        params[i].toColumn = (i + 1) * (n / num_threads);
    }
}
```

```

        pthread_create(&threads[i], NULL, partialMatMul, &params[i]);
    }
    for (size_t i = 0; i < num_threads; i++)
    {
        pthread_join(threads[i], NULL);
    }
    free(threads);
    free(params);
}

```

以上函数是笔者对于 `<pthread.h>` 库的实验品，在浅略阅读相关讲解与教程后所写，在实际运行测试中，虽然能正确得到结果，但以16线程运行的效率甚至低于无优化的朴素算法，且笔者对于该库的线程安全问题并不了解，因此仅作为学习过程的副产品，不参与后续效率比较。

Part 3 - Test & Comparison

测试说明

`benchmark.c` 为本项目测试用代码，其中依次测试了矩阵乘法的各类实现的正确性与耗时。

矩阵尺寸由调试者输入，矩阵元素为随机生成的 $[0, 1]$ 的单精度浮点数。

乘法标准答案由 `cbblas.h` 的 `cbblas_sgemm()` 函数输出至矩阵 C ，其余函数输出至 D 并与之比较，会打印出首次误差情况。

考虑到使用了 `openMP` 提高效率，此处使用 `double omp_get_wtime()` 计算运行时间，单位为秒。

在运行一个函数前，程序会“预热”两次，即预先运行2次再计时。

下面是以 `matmul_avx_block8()` 为例的测试片段。

```

matmul_avx_block8(A, B, D);
matmul_avx_block8(A, B, D);
memset(D->data, 0, sizeof(float) * nn);
time1 = omp_get_wtime();
matmul_avx_block8(A, B, D);
time2 = omp_get_wtime();
printf("[AVX_block+openMP] %ld ms used\n", (long int)(1000 * (time2 - time1)));
printf(equals(C, D) ? "Result Accepted.\n" : "Wrong Result.\n");
memset(D->data, 0, sizeof(float) * nn);

```

x64平台测试结果

笔记本型号: Surface Pro7 孱弱的主动散热+外置风扇

系统: Linux version 5.10.16.3(WSL2), 64位系统, 基于x64处理器

处理器: Intel(R) Core(TM) i7-1065G7 CPU @ 1.30GHz 1.50 GHz

时间单位: 毫秒(ms), 0 代表1ms内完成, / 表示等待时间在作者的耐心之外(超过5分钟)

由于要预热, 超出5分钟的函数笔者要等15分钟以上

Without addition compilation option

阶数/函数	plain	divide	plain+omp	avx_vec8	avx_block8	OpenBLAS
16	0	0	0	0	0	0
128	7	7	1	0	30	0
1024	3657	1366	792	194	257	7
2048	27677	11123	6783	1835	1496	43
4096	205834	116130	61203	12968	11397	395
8192	/	/	543397	124802	107255	2940
16384	/	/	/	/	/	24763

With -O2

阶数/函数	plain	divide	plain+omp	avx_vec8	avx_block8	OpenBLAS
16	0	0	0	0	0	0
128	2	0	0	0	28	0
1024	515	165	110	32	52	6
2048	4746	1727	933	623	232	46
4096	34098	15463	11363	5395	1765	395
8192	270939	139216	89797	46394	14359	3015
16384	/	/	/	/	196830^	24433

^: 在测试16384×16384矩阵的avx_block8函数时，即便笔者使用了外置散热手段，还是无法避免CPU长期高负荷计算过热导致的降频，因此该数据效率有明显下降。

With -O3

阶数/函数	plain	divide	plain+omp	avx_vec8	avx_block8	OpenBLAS
16	0	0	0	0	6	0
128	0	0	0	115	59	2
1024	134	131	47	112	89	7
2048	1648	975	357	607	299	48
4096	13601	7905	3099	5386	1837	388
8192	112437	74809	41208	44041	14188	3069
16384	/	/	/	/	188428^	24325

笔者将电脑关闭冷却后，使用-O3编译，发现如下现象：

- 对于阶数在2048以下的矩阵，自行实现的 SIMD 优化函数效率有所下降，而对于较大矩阵，自行实现的 SIMD 优化函数效率基本不变。

- 未引入手动 SIMD 优化的函数效率有较大提高，但在大规模计算时效率低于 SIMD 优化
- 又降频了，说明效率门槛从访存速度转移至算力。

随后尝试了 -Ofast 编译，效果在误差允许范围内与 -O3 几乎相同。

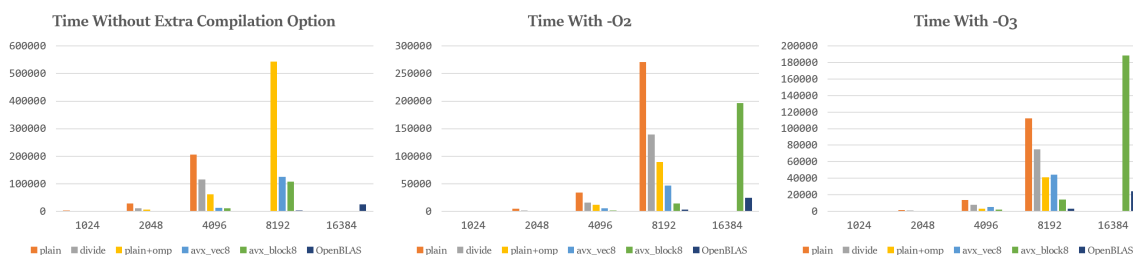
图表比较

下图是矩阵乘法的不同实现对于各规模矩阵的用时柱状图，单位 ms。

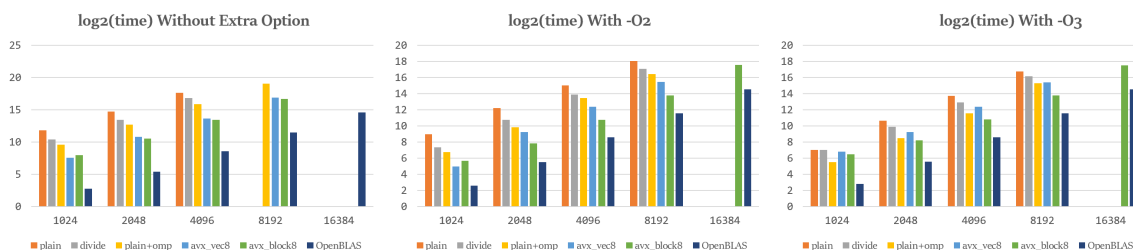
自行实现的各算法中，开启 -o2 耗时比约为：

$$T_{plain} \approx 1.95T_{divide} \approx 3.01T_{plain+omp} \approx 5.83T_{avx_vec8} \approx 18.87T_{avx_block8} \approx 89.86T_{OpenBLAS}$$

由上述原因，只看 $n=16384$ 时，自行实现的最快算法 `avx_block8` 耗时也达到了 OpenBLAS 的 8 倍左右，但在其他规模下，`avx_block8` 可以达到 OpenBLAS 的 4~5 倍。

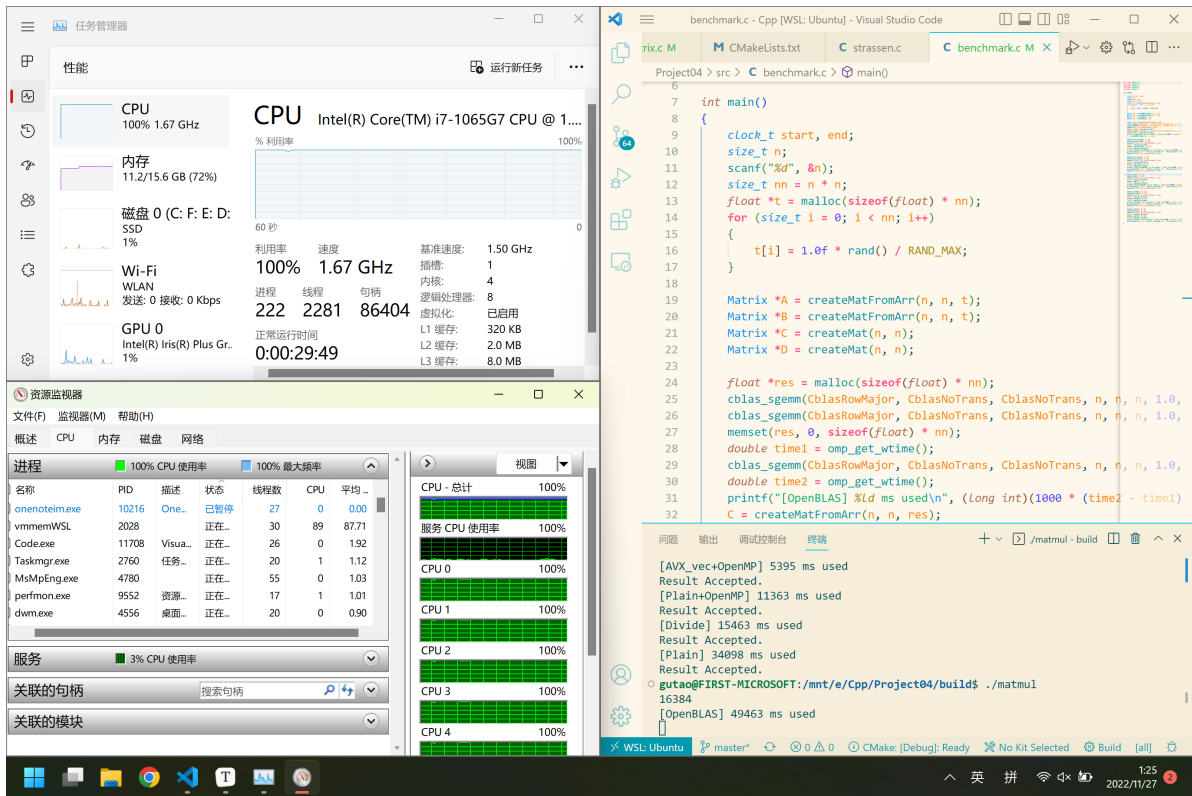


为了方便观察比较，此处对时间取 \log_2 对数，得到下图。



这张图可以观察到，在开启 -o2 编译后，`avx_block8` 的 $\log_2(\text{time})$ 与 OpenBLAS 相差只有 2 左右，即达到了约 1/4 的效率。

ARM 平台测试结果



Part 4 - Difficulties & Solutions

Difficulty I. 误差处理

笔者在测试时发现，对于规模在2048以上的矩阵乘法，很容易产生0.001的误差，(通常是OpenBLAS与自己实现的不同，而自己实现的几个往往成对相同)。下图是某个凌晨一点钟，没开风扇降频跑16k规模矩阵时得到的结果。

```
gutao@FIRST-MICROSOFT:/mnt/e/Cpp/Project04/build$ ./matmul
16384
[OpenBLAS] 49463 ms used
[AVX_block+OpenMP] 275669 ms used
difference found: 4076.764648 : 4076.774658
Wrong Result.
```

Solution

经同学提醒，可以将误差设置为数据的1%而非0.001，这样的误差要求对于进行了很多次加、乘法得到的结果也都是可以接受的。

不过为了比较时的效率，benchmark.c 依然采用旧版比较，适当放宽误差到0.01时可以验证乘法的正确性，既然保证了正确性，精确到哪一位才算正确似乎也没有那么重要了。

```
#define float_equal(x, y) ((x - y) < 1e-3 && (y - x) < 1e-3) //old
#define mx(x, y) ((x) > (y) ? (x) : (y))
#define float_equal2(x, y) (x > y ? (x - y < mx(x, 1) * 1e-3) : (y - x < mx(y, 1) * 1e-3)) // new
```

Difficulty II. Strassen

与同学讨论的过程中，笔者了解到 $O(N^{lg7}) \approx O(N^{2.81})$ 复杂度的 Strassen 算法，并且尝试自己写了一下，通过了正确性测试，但效率非常悲观，仅比朴素略快一筹。

Solution

随后笔者分析了原因：Strassen 算法将矩阵运算中的8次子矩阵乘法与4次子矩阵加法，分别变为了7次和18次，即以额外的14次加法为代价减少一次乘法，在阶数很高时才能体现差距，且笔者在实现 Strassen 时并未使用 SIMD 进行加速，导致加法运算并未得到很好的优化，而分治的截取、合并等操作导致内存访问的跳跃数较高，虽然从软件层面降低了复杂度，但在硬件层面增大了操作复杂性。

另外，该算法的优化幅度为 $O(N^{0.19})$ ，而当 $N = 16384$ 时，也只有理论上限6.32倍的提升，矩阵规模越小优化越不明显。加上访问不连续、矩阵分块等操作带来的额外复杂度，总体呈现负优化。也许加上合适的 SIMD 优化能提高其效率。

Difficulty III. Segmentation Fault

SIMD 优化过程中屡次出现段错误，笔者试图使用 memalign 函数在创建矩阵时将 data 对齐，粒度设置为32，以便后续的load等操作，但发现写入数据时会导致段错误。

Solution

查询 memalign 的用法后发现并无异常，但就是无法对申请的内存进行正常读写，于是笔者推测可能是申请的空间过大，无法通过该函数申请到一块连续、对齐的内存用于存储数据，导致并未将data指向一段合法内存，因此读写时会段错误。考虑到申请如此大块的内存的确不太现实，笔者选择在载入时牺牲一定效率，换用 loadu_ps 来对未对齐的数据进行载入，效率还算不错，借此实现了本项目最快的函数，对齐后也许还能更快。