CS205 · C/C++ Programming

# Matrix multiplication

何泽安 (He Zean)
12011323
Sep. 26, 2021

## Contents

# 1 需求分析

本程序通过命令行参数获取两个存有需要相乘的矩阵的 txt 文件，进行矩阵乘法后需要将结果以类似于输入文件的格式保存到 txt 文件中。考虑到课程定位及进度，我认为本项目注重的是矩阵乘法后结果每一位的精度问题，而暂不需要考虑溢出，同时，本程序的定位是不需要处理数 GB 的特大矩阵——其难以加载到内存中，需要用特殊的方式直接对文件进行读写且较为复杂（类似的问题在《编程珠玑》中有所讨论），故可以选择直接将输入文件的内容读取到内存中。要求中提到“分别为 double/float 实现矩阵乘法”，但现阶段我们并没有学到处理这两种基本数据类型的特殊优化方式，即两种乘法除矩阵内存储数据类型不同，其余均一致，故我使用模版类来方便切换数据类型。本程序还具有以下 features。

## 1.1 文件输入输出

除竞赛中可能较常用的 FILE* 等写法，使用 *fstream* 进行文件读写更为常用且规范。但在写本程序时，注意到其并不会对指定的输入路径抛出显式异常，而仅以 *good()* 等方法标识出来。因此，我们首先需要一个函数来判断是否成功加载了两个矩阵 txt 文件（此项目偏重于计算，而非特别完备的异常处理机制，故省略检查文件内是否均为数字）。此外，输出时若目标路径下无指定文件，则创建之；否则将其内容覆盖写入。

## 1.2 矩阵可乘性判断

虽然给出的测试文件均为方阵，且矩阵规模出现在文件名中，此时一种投机取巧的方法就是直接读取文件名中的数字并开辟对应大小的数组，但鲁棒的程序必须假设输入的名字中包含的大小信息是错误的，需要自己判断（实际上，这也使得我们的程序不再受输入文件名的规范性影响）。同时，根据矩阵运算规则，在判断完两个矩阵的规模后，若不符合可以直接退出程序。

## 1.3 答案正确性判定 *

项目要求比较 float 和 double 型矩阵的运算精度，为此我写了一个简单的脚本，使用 NumPy 计算“标准答案”[1]与本程序结果进行分析。

## 1.4 计时器

修饰器是 Python 中的一个极为好用的语法糖，为了以类似的优雅方式实现此功能，在参考了 StackOverflow[2]的思想后，通过定义类的构造与析构方法，并定义宏，实现了比函数首尾手动计算时间差优雅的计时方法。

## 1.5 随机矩阵生成

为了对比矩阵乘法的不同实现的性能差异，现有的三组样例不足获取足够对比数据，且在计时上可能存在较大误差，因此需要使用自定的矩阵更全面的测试性能与程序鲁棒性。

[1]除非特别实现了高精度的数据结构，计算机进行小数运算有不可避免的误差。NumPy 默认使用的是 64 位的浮点数（相当于 double）类型来存储数据，故其计算结果可用于比较本程序算出结果是否有错误（较大偏差），也用于分析 float 较 double 的误差。

[2]How to implement decorators in C and C++ (stackoverflow.com/questions/4667293/how-to-implement-decorators-in-c-and-c)

# 2 代码实现

本项目路径下包含以下文件：

① util.hpp util.cpp 用于检测输入数据 ② Timer.hpp Timer.cpp 优雅的计时器实现

③ Mat.hpp Mat.tpp 定义矩阵模版类，便于切换 float/double

④ check.py NumPy 实现答案检验 ⑤ ThreadPool.hpp 线程池的实现[3]（未放入报告）

⑥ main.cpp, CMakeLists.txt 及测试文件

关于各关键函数的说明请阅读第 2.3 节。

## 2.1 Util

```hpp
// util.hpp

#pragma once

#include <iostream>
#include <fstream>
#include <string>
#include <sstream>

void check_input(std::ifstream &, std::ifstream &);
size_t file_rows(std::ifstream &);
size_t file_cols(std::ifstream &);
```

```cpp
// util.cpp

#include "util.hpp"

void check_input(std::ifstream &file1, std::ifstream &file2) {
    if (!file1.is_open() || !file2.is_open()) {
        if (!file1.good())
            std::cerr << "Error on "
                      << "Mat 1 (argv[1]) : "
                      << strerror(errno) << std::endl;
        if (!file2.good())
            std::cerr << "Error on "
                      << "Mat 2 (argv[2]) : "
                      << strerror(errno) << std::endl;
        throw std::invalid_argument("Invalid input file name");
    }
}

size_t file_rows(std::ifstream &f) {
    size_t row_cnt = 0;
    std::string tmp;
```

[3] A simple C++11 Thread Pool implementation (github.com/progschj/ThreadPool)

```
    while (getline(f, tmp, '\n')) row_cnt++;
    f.clear();
    f.seekg(0L, std::ios_base::beg);
    return row_cnt;
}

size_t file_cols(std::ifstream &f) {
    size_t col_cnt = 0;
    std::string line, tmp;
    std::getline(f, line, '\n');
    std::stringstream ssl(line);
    while (ssl >> tmp) col_cnt++;
    f.clear();
    f.seekg(0L, std::ios_base::beg);
    return col_cnt;
}
```

*check_input* 在主函数尝试打开 ifstream 后检查两个输入流的状态，如果有错误，通过 *strerror(errno)* 提示用户[4]，并通过抛出异常供主函数捕获的方式退出程序。

*file_rows* 和 *file_cols* 通过快速移动光标的方式检查文件的行数，及每行的元素数（空格分隔），在做了输入一定是矩阵（且均为数字）的假设后，不必逐行检查。

## 2.2 Timer

```
// Timer.hpp

#pragma once

#include <iostream>
#include<iomanip>
#include <chrono>
#include <unistd.h>

#define TIMER Timer stopwatch;

using namespace std;

class Timer {
private:
    chrono::time_point<chrono::system_clock> start_;
    constexpr static auto unit_ =
            static_cast<double>(chrono::microseconds::period::num)
            / chrono::microseconds::period::den;

public:
    Timer();
    ~Timer();
```

[4]How to get error message when ifstream open fails (stackoverflow.com/questions/17337602/how-to-get-error-message-when-ifstream-open-fails)

```
};
```

```cpp
// Timer.cpp

#include "Timer.hpp"

Timer::Timer() {
    this->start_ = chrono::system_clock::now();
}

Timer::~Timer() {
    auto end = chrono::system_clock::now();
    cout << "Time spent: " << setiosflags(ios::fixed) << setprecision(8)
         << static_cast<double>((end - this->start_).count()) * unit_
         << " sec" << endl;
}
```

这里利用了构造函数和析构函数管理时间变量算出 Timer 实例从生成到销毁的时间间隔并打印出来，也利用了函数中声明的变量（Timer 实例）存放在栈内存中，会在函数 return 时释放（调用析构函数）。此外，利用宏定义方便调用。

### 2.3 Mat

```cpp
// Mat.hpp

#pragma once

#include <cblas.h>
#include <immintrin.h>
#include <iostream>
#include <fstream>
#include <random>
#include <sstream>
#include <string>
#include <thread>

#include "Timer.hpp"
#include "ThreadPool.hpp"

#define THREADS thread::hardware_concurrency()

template<typename T>
class Mat {
private:
    size_t col_{};
    size_t row_{};
    T **data_;

```

```
    void show_ln(size_t);
    static Mat<T> strassen(const Mat<T> &, const Mat<T> &);

public:
    [[nodiscard]] size_t getCol() const;
    [[nodiscard]] size_t getRow() const;
    T **getData() const;

    Mat(size_t, size_t);
    Mat(size_t, size_t, ifstream &);
    ~Mat();

    Mat<T> operator+(const Mat<T> &);
    Mat<T> operator-(const Mat<T> &);

    static Mat<T> sub_mat(const Mat<T> &, size_t, size_t, size_t, size_t);
    static Mat<T> merge(Mat<T> &, Mat<T> &, Mat<T> &, Mat<T> &);

    static Mat<T> dot_n3(const Mat<T> &, const Mat<T> &);
    static Mat<T> dot_strassen(const Mat<T> &, const Mat<T> &);
    static Mat<T> dot_change_ord(const Mat<T> &, const Mat<T> &);
    static Mat<T> _mm_dot_float(const Mat<T> &, const Mat<T> &);
    static Mat<T> dot_mul_threads(const Mat<T> &, const Mat<T> &);
    static Mat<T> dot_blas(const Mat<T> &, const Mat<T> &);

    static void rand(size_t, size_t, const string &);

    void show();
    void save(const string &);
};

#include "Mat.tpp"
```

```
// part of <Mat.tpp>

template<typename T>
size_t Mat<T>::getCol() const {
    return col_;
}

template<typename T>
size_t Mat<T>::getRow() const {
    return row_;
}

template<typename T>
T **Mat<T>::getData() const {
    return data_;
}
```

```cpp

template<typename T>
Mat<T>::Mat(size_t row, size_t col) {
    this->col_ = col;
    this->row_ = row;
    this->data_ = new T *[row];
    for (size_t i = 0; i < row; ++i) {
        this->data_[i] = new T[col];
        for (size_t j = 0; j < col; ++j) this->data_[i][j] = 0;
    }
}

template<typename T>
Mat<T>::Mat(size_t row, size_t col, ifstream &f) {
    TIMER  // it prompts the user how long IO cost: load a Mat from a txt
    this->col_ = col;
    this->row_ = row;
    this->data_ = new T *[row];
    for (size_t i = 0; i < row; ++i) {
        this->data_[i] = new T[col];
        string line;
        std::getline(f, line, '\n');
        std::stringstream ssl(line);
        int col_i = 0;
        while (ssl >> this->data_[i][col_i++]);
    }
    std::cout << "Initialize Mat (" << col << "*" << row << ") finished. ";
    // the timer info will be attached here
    f.clear();
    f.seekg(0L, std::ios_base::beg);
}

template<typename T>
Mat<T>::~Mat() {
    for (size_t i = 0; i < this->row_; ++i)
        delete[] this->data_[i];
    delete[] this->data_;
}

template<typename T>
Mat<T> Mat<T>::operator+(const Mat<T> &op) {
    if (this->col_ != op.getCol() || this->row_ != op.getRow())
        throw invalid_argument("size not same");
    Mat<T> sum(this->row_, this->col_);
    for (size_t i = 0; i < this->row_; ++i)
        for (size_t j = 0; j < this->col_; ++j)
            sum.getData()[i][j] = this->data_[i][j] + op.getData()[i][j];
    return sum;
}

```

```cpp
template<typename T>
Mat<T> Mat<T>::operator-(const Mat<T> &op) {
    if (this->col_ != op.getCol() || this->row_ != op.getRow())
        throw invalid_argument("size not same");
    Mat<T> sum(this->row_, this->col_);
    for (size_t i = 0; i < this->row_; ++i)
        for (size_t j = 0; j < this->col_; ++j)
            sum.getData()[i][j] = this->data_[i][j] - op.getData()[i][j];
    return sum;
}
```

以下均为 <Mat.tpp> 的代码片段：

### 2.3.1 朴素矩阵乘法

```cpp
template<typename T>
Mat<T> Mat<T>::dot_n3(const Mat<T> &m1, const Mat<T> &m2) {
    TIMER
    Mat<T> prod(m1.getCol(), m2.getRow());
    for (size_t i = 0; i < m1.getRow(); ++i) {
        for (size_t j = 0; j < m2.getCol(); ++j) {
            for (size_t k = 0; k < m1.getCol(); k++)
                prod.getData()[i][j] += (m1.getData()[i][k] * m2.getData()[k][j]);
        }
    }
    cout << ">>> Product calculated: by <dot_n3>. ";
    return prod;
}
```

使用三重 for 循环嵌套，易知其复杂度为 $O(n^3)$，为本程序实现的最慢算法。但也因其是最基本的算法，我们将其引入作为性能比较的基准。

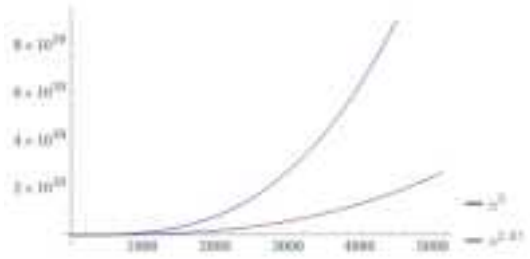
### 2.3.2 调换乘法顺序：访存优化

```cpp
template<typename T>
Mat<T> Mat<T>::dot_change_ord(const Mat<T> &m1, const Mat<T> &m2) {
    TIMER
    Mat<T> prod(m1.getRow(), m2.getCol());
    for (size_t i = 0; i < m1.getRow(); ++i) {
        for (size_t k = 0; k < m2.getRow(); ++k) {
            auto op = m1.getData()[i][k];
            for (size_t j = 0; j < m2.getCol(); ++j)
                prod.getData()[i][j] += op * m2.getData()[k][j];
        }
    }
    cout << ">>> Product calculated: by <dot_change_ord>. ";
    return prod;
}
```

矩阵乘法的性能瓶颈主要在于 IO，而非 CPU 算力。在本程序中，矩阵数据使用二维数组存储，除某一列外，乘法所需访问的元素大部分在内存中是不连续的（尤其是当其作为被乘矩阵时，需要按列访问），而每次计算中都尝试将当前访问内存地址的后一段内存这造成搬入缓存，矩阵朴素矩阵乘法造成了大量的缓存未命中。因此减少读取（访问内存地址的跳转）能提升乘法效率[5]。使用一维数组能更好的减少跳转次数，但考虑到可能输入测试样例过大，即当矩阵为 n×m 时，一维数组需要连续的长度为 $n \times m \times \text{sizeof(T)}$ 的空闲内存，在计算机内存紧张时，OS 难以找到这样的内存地址，可能会造成（暂时不清楚是什么）错误；而二维数组将数据分散开来，降低了这种风险，也将矩阵的表达更符合直观认知、规范，方便后期实现其他方法。

### 2.3.3 Strassen 算法

Strassen 算法和 Coppersmith–Winograd 算法是矩阵乘算法优化的两只最常用的算法。本程序实现了较易编写的 Strassen 算法。其不断的将矩阵分块（以中线分割，上下、左右分割为四块，因此限制了两个相乘的矩阵必须均为方阵，且大小为 2 的幂）并递归直至子矩阵足够小，将复杂度将到了 $O(n^{log7}) \approx O(n^{2.81})$。



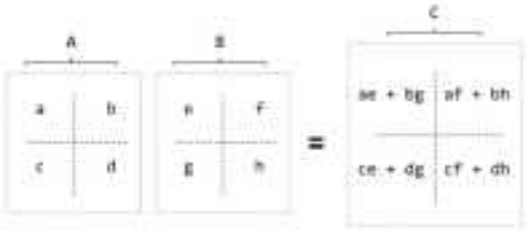
```cpp
template<typename T>
Mat<T> Mat<T>::dot_strassen(const Mat<T> &m1, const Mat<T> &m2) {
    TIMER
    if (m1.getRow() != m1.getCol() || m2.getRow() != m2.getCol()) {
        cout << "Strassen algo can only handle square matrices" << endl;
        return Mat<T>(0, 0);
    }
    size_t n = m1.getRow();
    if (n & (n - 1)) {  // a method to check whether n is 2^x
        cout << "Matrices' size must be a power of two" << endl;
        return Mat<T>(0, 0);
    }

    cout << ">>> Product calculated: by <dot_strassen>. ";
    return Mat<T>::strassen(m1, m2);
}

template<typename T>
Mat<T> Mat<T>::strassen(const Mat<T> &m1, const Mat<T> &m2) {
    size_t n = m1.getCol();

    if (n <= 256) {
        Mat<T> prod(m1.getRow(), m2.getCol());
```

[5]调整循环顺序加速矩阵乘法 (zhuanlan.zhihu.com/p/146250334)

```
        for (size_t i = 0; i < m1.getRow(); ++i) {
            for (size_t k = 0; k < m2.getRow(); ++k) {
                auto op = m1.getData()[i][k];
                for (size_t j = 0; j < m2.getCol(); ++j)
                    prod.getData()[i][j] += op * m2.getData()[k][j];
            }
        }
        return prod;
    }
    n /= 2;
    auto A11 = Mat<T>::sub_mat(m1, 0, 0, n, n);
    auto A12 = Mat<T>::sub_mat(m1, 0, n, n, n);
    auto A21 = Mat<T>::sub_mat(m1, n, 0, n, n);
    auto A22 = Mat<T>::sub_mat(m1, n, n, n, n);

    auto B11 = Mat<T>::sub_mat(m2, 0, 0, n, n);
    auto B12 = Mat<T>::sub_mat(m2, 0, n, n, n);
    auto B21 = Mat<T>::sub_mat(m2, n, 0, n, n);
    auto B22 = Mat<T>::sub_mat(m2, n, n, n, n);

    auto S1 = B12 - B22;
    auto S2 = A11 + A12;
    auto S3 = A21 + A22;
    auto S4 = B21 - B11;
    auto S5 = A11 + A22;
    auto S6 = B11 + B22;
    auto S7 = A12 - A22;
    auto S8 = B21 + B22;
    auto S9 = A11 - A21;
    auto S10 = B11 + B12;

    auto P1 = strassen(A11, S1);
    auto P2 = strassen(S2, B22);
    auto P3 = strassen(S3, B11);
    auto P4 = strassen(A22, S4);
    auto P5 = strassen(S5, S6);
    auto P6 = strassen(S7, S8);
    auto P7 = strassen(S9, S10);

    auto C11 = P5 + P4 - P2 + P6;
    auto C12 = P1 + P2;
    auto C21 = P3 + P4;
    auto C22 = P5 + P1 - P3 - P7;

    return Mat<T>::merge(C11, C12, C21, C22);
}

template<typename T>
Mat<T> Mat<T>::sub_mat(const Mat<T> &m, size_t rowst, size_t colst, size_t rowlen, size_t collen
    ) {
```

```
    Mat<T> sub(rowlen, collen);
    for (size_t i = 0; i < rowlen; ++i)
        for (size_t j = 0; j < collen; ++j)
            sub.data_[i][j] = m.getData()[i + rowst][j + colst];
    return sub;
}

template<typename T>
Mat<T> Mat<T>::merge(Mat<T> &m11, Mat<T> &m12, Mat<T> &m21, Mat<T> &m22) {
    Mat<T> mer(m11.getRow() * 2, m11.getCol() * 2);
    for (size_t i = 0; i < m11.getRow(); ++i) {
        for (size_t j = 0; j < m11.getCol(); ++j) {
            mer.getData()[i][j] = m11.getData()[i][j];
            mer.getData()[i][j + m11.getCol()] = m12.getData()[i][j];
            mer.getData()[i + m11.getRow()][j] = m21.getData()[i][j];
            mer.getData()[i + m11.getRow()][j + m11.getCol()] = m22.getData()[i][j];
        }
    }
    return mer;
}
```

作为分治算法，如果简单的任其递归到子矩阵为一个数字，可想而知大量的创建和销毁 Mat 对象反而会大幅拖慢算法效率（其中分配堆内存空间占用了大量计算时间，从而掩盖了 Strassen 算法的优势）。本算法复杂度下降不多，在矩阵较小时（该界限将在下面的性能测试中讨论），可以直接使用朴素矩阵乘，算法稍慢，但节省 IO 开销。




$$
\begin{aligned}
P1 &= A(F - H)\\
P2 &= (A + B)H\\
P3 &= (C + D)E\\
P4 &= D(G - E)\\
P5 &= (A + D)(E + H)\\
P6 &= (B - D)(G + H)\\
P7 &= (A - C)(E + F)
\end{aligned}
$$

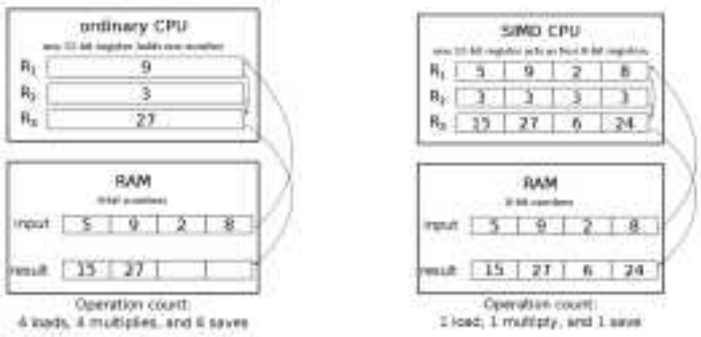
$$
AB = \begin{bmatrix} P5 + P4 - P2 + P6 & P1 + P2 \\ P3 + P4 & P1 + P5 - P3 - P7 \end{bmatrix}
$$

### 2.3.4 SIMD：硬件级优化

```
// Acknowledgement: Prof. Shiqi Yu, Speedup your program (2021 Spring)
float _mm_vec_dot(const float *v1, const float *v2, const size_t len) {
    float s[8] = {0};
    __m256 a, b;
    __m256 c = _mm256_setzero_ps();

    for (size_t i = 0; i < len; i += 8) {
        a = _mm256_load_ps(v1 + i);
        b = _mm256_load_ps(v2 + i);
        c = _mm256_add_ps(c, _mm256_mul_ps(a, b));
    }
    _mm256_store_ps(s, c);

```

```
14      auto sum = s[0] + s[1] + s[2] + s[3] + s[4] + s[5] + s[6] + s[7];
15      for (size_t i = len - 1; i >= len - len % 8; i--) sum += v1[i] * v2[i];
16      return sum;
17  }
18
19  template<>
20  Mat<float> Mat<float>::_mm_dot_float(const Mat<float> &m1,
21                                       const Mat<float> &m2) {
22      TIMER
23      Mat<float> prod(m1.getRow(), m2.getCol());
24      for (size_t i = 0; i < m1.getRow(); ++i)
25          for (size_t j = 0; j < m2.getCol(); ++j) {
26              auto v1 = static_cast<float *>(std::aligned_alloc(256,
27                                                                max(static_cast<int>(m1.getCol() *
                                                                    sizeof(float)), 256)));
28              auto v2 = static_cast<float *>(std::aligned_alloc(256,
29                                                                max(static_cast<int>(m2.getRow() *
                                                                    sizeof(float)), 256)));
30              memcpy(v1, m1.getData()[i], m1.getCol() * sizeof(float));
31              for (size_t k = 0; k < m2.getRow(); ++k) v2[k] = m2.getData()[k][j];
32              prod.data_[i][j] = _mm_vec_dot(v1, v2, m2.getRow());
33              delete[] v2;
34          }
35
36      cout << ">>> Product calculated: by <_mm_dot_float>. ";
37      return prod;
38  }
```

本机为 Intel x86 架构，CPU 设计有专门的寄存器可以一次保存 8 个 float[6]，使用该类寄存器可以使数据向量化，并使用一个控制器控制多个处理器，同时对一组数据中的每一个分别执行相同的操作从而实现空间上的并行性，即*单指令流多数据流 (Single Instruction Multiple Data)*[7]。对于 $\mathrm{Vec}(1,k)\cdot\mathrm{Vec}^T(1,k)$，这从原来的需要循环 k 次降低到了循环 $\frac{k}{8}$ 次。




这里有一点需要特别注意，即 26、27 行必须使用 aligned_alloc 使得内存对齐，否则（当矩阵规模较小，本机实验为 128×128）在将数据载入寄存器时会出现 EXC_BAD_ACCESS (code=EXC_I386_GPFLT) 的问题，经查阅[8]发现此问题是由从未对齐的内存地址中读入 SSE 寄存器导致的。

[6]Speedup your program | C/C++：从基础语法到优化策略 (xuetangx.com/course/sustc08091004451/7753997)
[7]SIMD (en.wikipedia.org/wiki/SIMD)
[8]What's the meaning of exception code "EXC_I386_GPFLT"? (stackoverflow.com/questions/19651788/whats-the-meaning-of-

### 2.3.5 BLAS

```cpp
template<typename T>
Mat<T> Mat<T>::dot_blas(const Mat<T> &m1, const Mat<T> &m2) {
    TIMER
    Mat<T> prod(m1.getRow(), m2.getCol());
    for (size_t i = 0; i < m1.getRow(); ++i)
        for (size_t j = 0; j < m2.getCol(); ++j) {
            auto v2 = new T[m2.getRow()];
            for (size_t k = 0; k < m2.getRow(); ++k)
                v2[k] = m2.getData()[k][j];
            prod.data_[i][j] = cblas_sdot(m2.getRow(), m1.getData()[i], 1, v2, 1);
            delete[] v2;
        }

    cout << ">>> Product calculated: by <dot_blas>. ";
    return prod;
}
```

本程序调用 OpenBLAS 库，其是一种优化了的 BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) 实现并会在编译时根据目标硬件进行优化，生成运行效率很高的程序。简单起见，我们仅使用 Blas 运算向量点积：其集多种优化方法（如向量化、内存对其、分块）于一体，性能优于 2.3.5 节只使用向量化（BLAS）。显然有更好的调用方法（sgemm 等），但需要修改 Mat 中的数据结构，工程量较大故暂未考虑。

### 2.3.6 多线程

```cpp
template<>
Mat<float> Mat<float>::dot_mul_threads(const Mat<float> &m1, const Mat<float> &m2) {
    TIMER
    Mat<float> prod(m1.getRow(), m2.getCol());
    // due to the time limit, I reused _mm_vec_dot, thus only support float
    /*
     * rather than using the manual way like the following:
     *      auto *threads = new thread[THREADS];
     *      for (int i = 0; i < THREADS; ++i) ...
     * I use ThreadPool, see: https://github.com/progschj/ThreadPool
     */
    ThreadPool pool(THREADS);
    for (size_t i = 0; i < m1.getRow(); i++)
        for (size_t j = 0; j < m2.getCol(); j++)
            pool.enqueue(calc_tar_pos, &prod, &m1, &m2, i, j);
        cout << ">>> Product calculated: by <dot_mul_threads>. ";
        return prod;
}

static void calc_tar_pos(Mat<float> *tar, const Mat<float> *m1,
                         const Mat<float> *m2, size_t row, size_t col) {
    auto v1 = static_cast<float *>(std::aligned_alloc(256,
```

exception-code-exc-i386-gpflt)

```
                                                    max(static_cast<int>(m1->getCol() * sizeof
                                                        (float)), 256)));
    auto v2 = static_cast<float *>(std::aligned_alloc(256,
                                                    max(static_cast<int>(m2->getRow() * sizeof
                                                        (float)), 256)));
    for (size_t k = 0; k < m2->getRow(); ++k) v2[k] = m2->getData()[k][col];
    tar->getData()[row][col] =
            _mm_vec_dot(v1, v2, m1->getCol());
    delete[] v2;
}
```

矩阵乘法并不会改变两个输入矩阵的数，也即计算结果矩阵的不同位置的元素的过程是互不影响的。上文指出 IO 为主要运算瓶颈，指的是相较于 CPU 乘法运算的时间，IO 读取两个被乘数的时间开销占比较大。但此时 CPU、RAM 占用率依然不高。多线程[9]的实现相当于将计算矩阵乘法细分为多个任务并均匀下发给多个计算单元，效率预计大幅提高。

## 2.4 main.cpp

```
#include "Mat.hpp"
#include "util.hpp"

#define MAT_TYPE double
//#define MAT_TYPE float

using namespace std;

int main(int argc, char **argv) {
    // rand matrix generator, can commit the following code to ignore the necessary args
//    Mat<float>::rand(2, 3, "mat-2x3.txt");
//    Mat<float>::rand(3, 6, "mat-3x6.txt");
//    Mat<float>::rand(8, 8, "mat-8x8.txt");

    if (argc != 4) {
        cerr << "3 arguments expected (input 1, input 2, output), got "
             << argc - 1 << endl;
        return -1;
    }

    // attempting to receive two input matrices
    ifstream matf1(argv[1]);
    ifstream matf2(argv[2]);
    try {
        check_input(matf1, matf2);
    } catch (const invalid_argument &) {
        return -1;
    }

```

[9]请注意，为了方便线程管理，我从 GitHub 上找到了 C++11 标准实现的线程池，而非手动创建线程，但可能正因如此，后面演示 O3 时使得编译器难以优化。

```
    // checking multiplication validity
    size_t mat1_c = file_cols(matf1), mat2_c = file_cols(matf2);
    size_t mat1_r = file_rows(matf1), mat2_r = file_rows(matf2);
    if (mat1_c != mat2_r) {
        cerr << "The input two matrices cannot be multiplied: "
             << "Mat 1 (" << mat1_r << "*" << mat1_c << ")\t"
             << "Mat 2 (" << mat2_r << "*" << mat2_c << ")";
        return -1;
    }

    auto m1 = Mat<MAT_TYPE>(mat1_r, mat1_c, matf1);
    auto m2 = Mat<MAT_TYPE>(mat2_r, mat2_c, matf2);
    cout << endl;

    for (int i = 0; i < 10; i++)
        Mat<MAT_TYPE>::dot_n3(m1, m2);
    cout << endl;
    auto prod1 = Mat<MAT_TYPE>::dot_n3(m1, m2);
    prod1.show();

    for (int i = 0; i < 10; i++)
        Mat<MAT_TYPE>::dot_change_ord(m1, m2);
    cout << endl;
    auto prod2 = Mat<MAT_TYPE>::dot_change_ord(m1, m2);
    prod2.show();
    prod2.save(argv[3]);

    for (int i = 0; i < 10; i++)
        Mat<MAT_TYPE>::dot_strassen(m1, m2);
    cout << endl;
    auto prod3 = Mat<MAT_TYPE>::dot_strassen(m1, m2);
    prod3.show();

    for (int i = 0; i < 10; i++)
        Mat<MAT_TYPE>::_mm_dot_float(m1, m2);
    cout << endl;
    auto prod4 = Mat<MAT_TYPE>::_mm_dot_float(m1, m2);
    prod4.show();

    for (int i = 0; i < 10; i++)
        Mat<MAT_TYPE>::dot_blas(m1, m2);
    cout << endl;
    auto prod5 = Mat<MAT_TYPE>::dot_blas(m1, m2);
    prod5.show();

    for (int i = 0; i < 10; i++)
        Mat<MAT_TYPE>::dot_mul_threads(m1, m2);
    cout << endl;
    auto prod6 = Mat<float>::dot_mul_threads(m1, m2);
    prod6.show();
```

```
80
81      prod6.save(argv[3]);
82
83      matf1.close();
84      matf2.close();
85      return 0;
86  }
```

① 头部的宏定义是为了方便切换 float/double 模式：只需在此注释其中之一，另一个即替换 main 中 Mat<T> 的数据类型，使模版类切换模式。但要注意 <_mm_dot_float>，<dot_mul_threads> 和 <dot_blas> 由于寄存器类型及调用第三方库的原因只支持 float 型矩阵的运算。

② 11 行附近代码为生成测试数据用，一般情况下保持被注释。

③ 包含基本的检查：输入参数个数，输入矩阵，大小等。

④ 六个重复的乘法运算在单次运行程序时只需保留一个，其余注释。用 for 循环预计算 10 次的目的主要是将数据载入缓冲以减小误差和多次采样以计算平均时间。

⑤ 81 行的 save 仅展示将数据存入文件，实际搭配上方唯一未被注释的函数作变量名的修改。

### 2.5 check.py

```python
import numpy as np

def txt2arr(path: str, delimiter: str = ' ') -> np.array:
    with open(path, 'r', encoding='utf-8') as f:
        mat = f.read()
    row_list = mat.splitlines()
    data_list = [[float(i)
                  for i in row.strip().split(delimiter)]
                 for row in row_list]
    return np.array(data_list)

def RMSE(x: np.array, y: np.array) -> float:
    return (np.sum((x - y)**2) / len(x)**2)**0.5

if __name__ == '__main__':
    mat1 = txt2arr('mat-A-2048.txt')
    mat2 = txt2arr('mat-B-2048.txt')
    my_prod = txt2arr('out2048.txt')
    # print(np.dot(mat1, mat2))  # to check if the answer is generally correct
    print('RMSE = ', RMSE(np.dot(mat1, mat2), my_prod))
```

在对比 double 与 float 的精度差异时，我想到以拟合标准差（RMSE）作为指标：

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\mathrm{MSE}} = \sqrt{\frac{\mathrm{SSE}}{n}} = \sqrt{\frac{1}{n}\Sigma i}$$

其中，MSE（均方方差）是数理统计中均方误差是指参数估计值与参数值之差平方的期望值，即本程序运算结果与作为参考答案的 NumPy 运算结果的差异。RMSE 的值越小，说明本程序结果越接近 NumPy 结果。

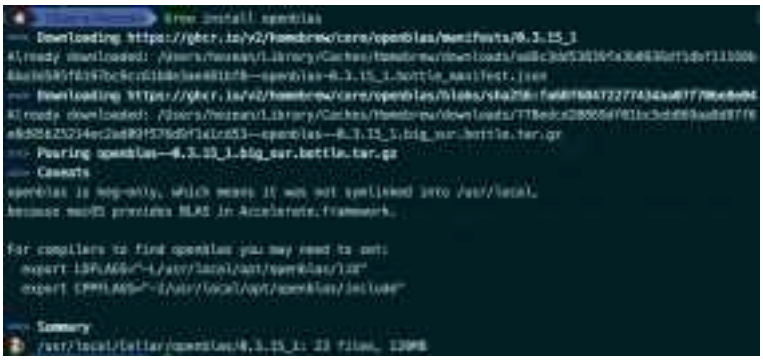
另一种一种方法是用 Java 的 BigDecimal 类计算，获得极为精确的的参考答案，但不是本项目的重点，后因耗时过多而放弃。

```java
import java.math.BigDecimal;

public class Mat {
    public static BigDecimal[][] mul(BigDecimal[][] matrix1, BigDecimal[][] matrix2) {
        int row1, row2, col1, col2;
        row1 = matrix1.length;
        row2 = matrix2.length;
        col1 = matrix1[0].length;
        col2 = matrix2[0].length;
        BigDecimal[][] mulMatrix = new BigDecimal[row1][col2];
        assert row2 == col1 : "Math Error";

        for (int i = 0; i < row1; i++)
            for (int j = 0; j < col1; j++)
                for (int k = 0; k < col1; k++)
                    mulMatrix[i][j] = mulMatrix[i][j].add(matrix1[i][k].multiply(matrix2[k][j]))
                        ;
        return mulMatrix;
    }
}
```

## 3 测试样例及分析

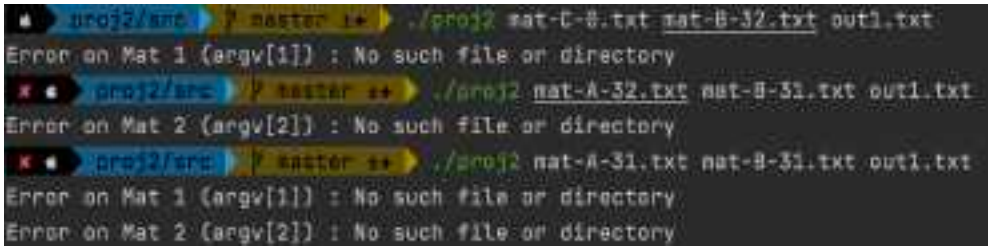
```
Platform: CMake 3.20.4 OpenBLAS 0.3.15_1
Hardware: MacBook Pro 13, 2020 (2 GHz Quad-Core Intel Core i5, 16 GB 3733 MHz LPDDR4X)
$ cd /path/to/project/ && cmake . && make && ./matmul <3 args>
```

运行此程序需要安装 OpenBLAS，并配置 CMake 使之 include 相关文件。并因为 AVX2 指令集，本程序的 _mm_dot_float 只能运行在 intel 芯片的计算机上。



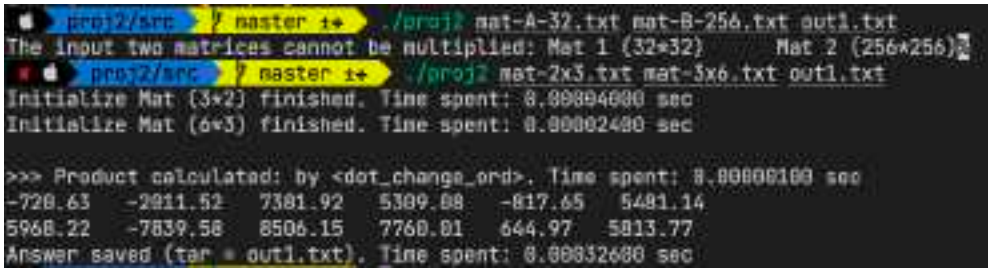
关于精度和性能的测试样本均为 Mat<T>::rand 生成，以 NumPy 运算结果作为参考。

### 3.1 程序附加功能

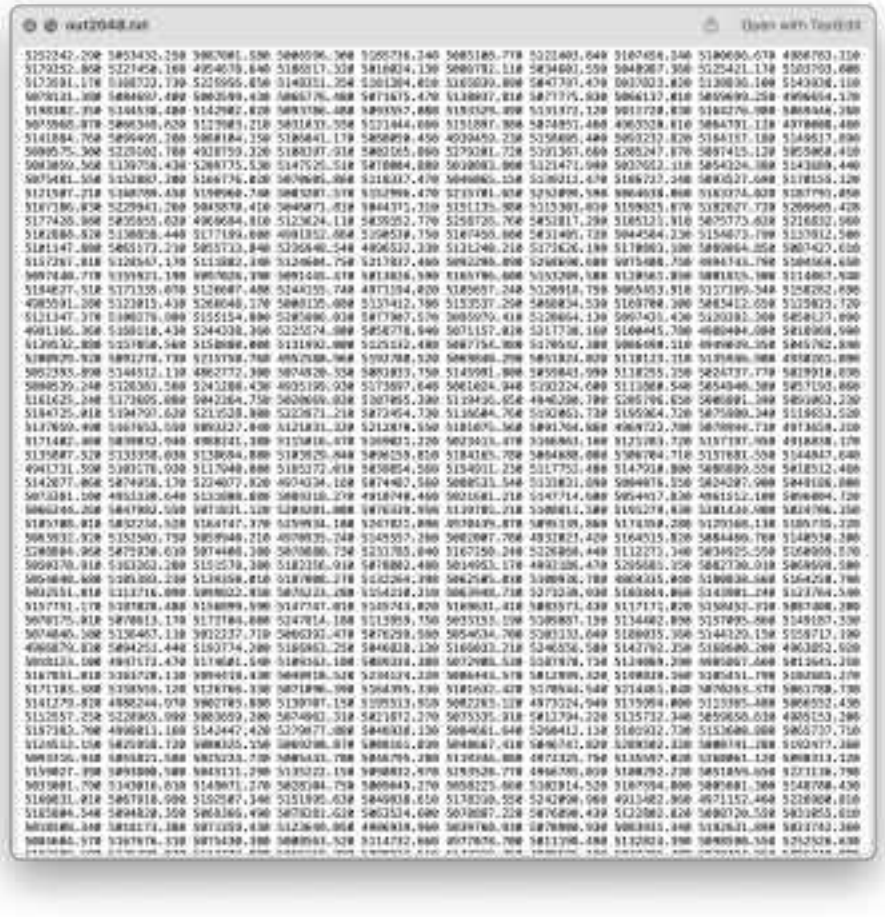



检测输入文件是否有效

随机测试矩阵生成



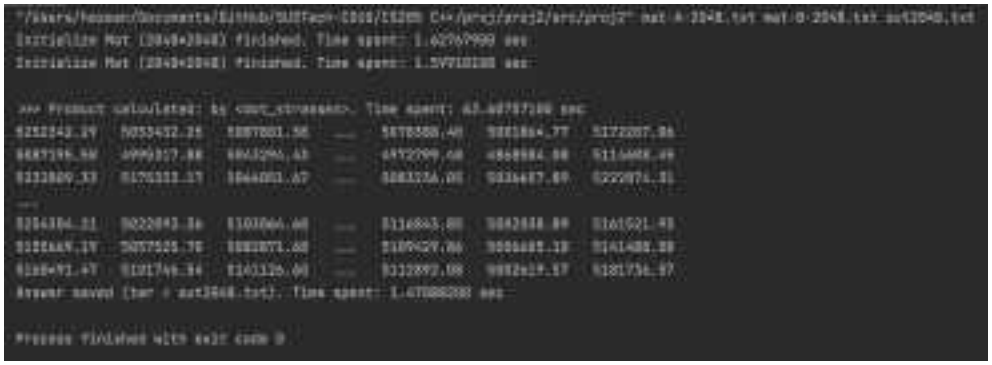

矩阵可乘性判断



计算结果保存为文件

## 3.2 正确性验证

本程序所有函数实现（均选择 float 或 double）算出结果在小数点后两位无明显差异，故不重复附图。



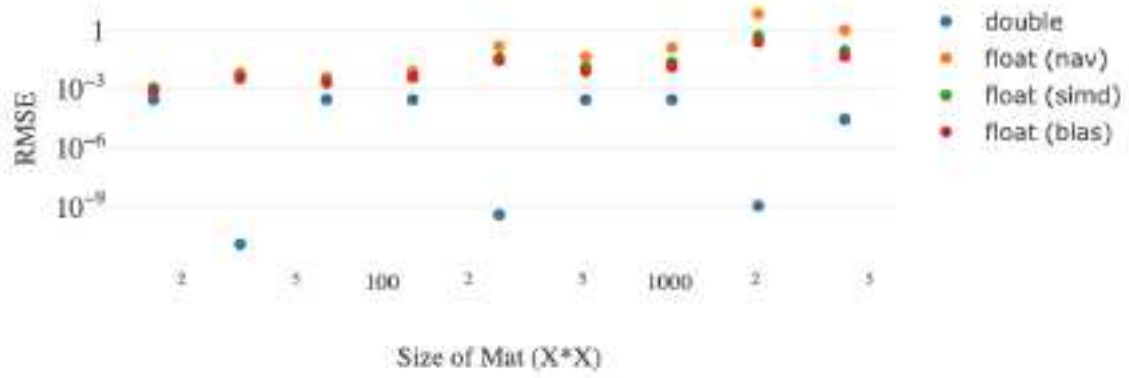
double 模式下的结果部分预览

```
[[5252342.29 5053432.25 5087801.58 ... 5078388.4  5001864.77 5172287.06]
 [5087195.58 4995317.88 5043294.43 ... 4972799.48 4868584.08 5114698.45]
 [5232809.33 5175333.17 5066051.67 ... 5083236.05 5026657.89 5222874.31]
 ...
 [5254364.21 5022093.36 5103064.68 ... 5116843.85 5002038.89 5161521.93]
 [5155669.19 5057525.7  5082871.68 ... 5109429.86 5006605.1  5141488.58]
 [5160491.47 5101746.54 5141126.6  ... 5112892.08 5002619.57 5181736.57]]
RMSE =  1.1736362226873855e-09
```

与 NumPy 的结果对比，小数点后两位均一致，RMSE 可见 $10^{-9}$ 级，即认为两者一致（程序正确性有保障）

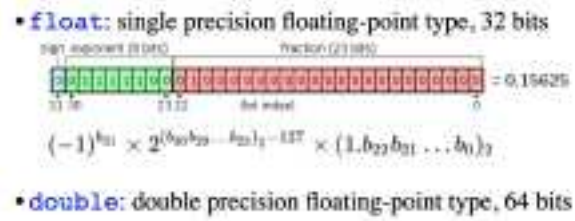
float 模式下的结果部分预览，RMSE=6.601，显著大于 double 模式

### 3.3 精度




| | 16 | 32 | 64 | 128 | 256 | 512 | 1024 | 2048 | 4096 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| double | 2.88e-4 | 1.32e-11 | 2.91e-4 | 2.89e-4 | 4.09e-10 | 2.88e-4 | 2.89e-4 | 1.17e-9 | 2.89e-5 |
| float (NAV) | 1.16e-3 | 6.89e-3 | 3.97e-3 | 7.82e-3 | 1.53e-1 | 4.40e-2 | 1.26e-1 | 6.60e+0 | 1.00e+0 |
| float (SIMD) | 1.09e-3 | 4.35e-3 | 2.38e-3 | 3.98e-3 | 3.73e-2 | 1.23e-2 | 2.32e-2 | 5.03e-1 | 8.81e-2 |
| float (BLAS) | 7.67e-4 | 3.45e-3 | 2.05e-3 | 4.17e-3 | 2.84e-2 | 7.71e-3 | 1.33e-2 | 2.53e-1 | 4.59e-2 |

以上数据为不同大小的矩阵使用不同模式算出结果与 NumPy 结果差异的 RMSE，RMSE 越小指标越好。其中使用 OpenBLAS 和 SIMD（AVX2 指令集）只在 float 模式下开启[10]（否则编译错误），但可能 OpenBLAS 做了特殊优化，其计算误差是 float 模式下最小的（见 float (BLAS)）、其次是向量化（见 float (SIMD)），但整体上所有 float 模式的精度不会相差过多，手动实现的乘法（见 float (NAV)）精度最差，且与 double 相差了至少一个数量级。除去 SIMD 和 BLAS 的优化，单论 float 与 double 的精度差别，主要在于其位数不同。




可见 float 存底数的部分只有 23 位，$2^{23} = 8388608$，即 float 有七到八位的有效数字（底数部分超过 $1.8388608 \times 10^n$ 时只能再牺牲一位精度，表示为 $x \times 10^{n+1}$），这也解释了为什么上图（float 模式下的结果预览）小数点后均为 50 或 00——超过有效数字位数。同理，double 的底数能表示更多的有效位数，这时小数点后仍有较多的有效位，更精确。

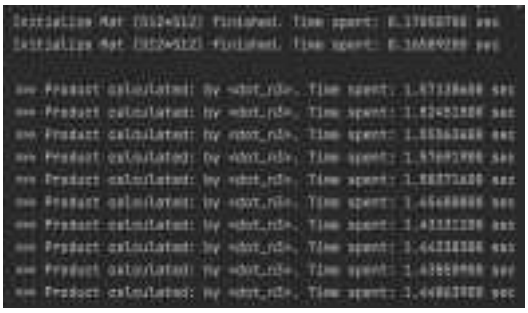
注意到有三个样本点（官方三组测试样例，double 模式）的误差远小于其余样本，分析输入数据易发现，三个题目样例均为一位小数正数，而自己生成的测试文件为随机数输出的三位小数，有正有负，这也造成了 double 能很好的保存官方样例的矩阵计算的中间数据，在保存三位小数的结果时损失较少，而其余

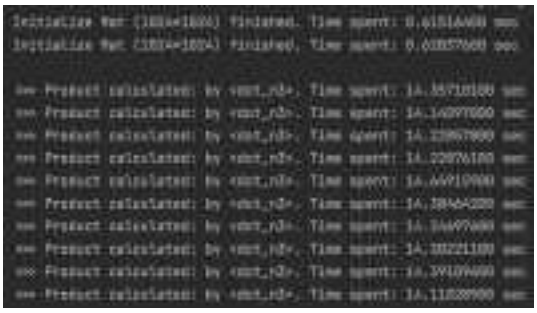
[10]2021.9.29 更新：在 StackOverflow 上了解到可以通过 _mm256_add_pd 对 __m256 寄存器进行 double 类型的运算，但此时一个寄存器只能存 4 个 double。时间原因，未再对程序进行修改。

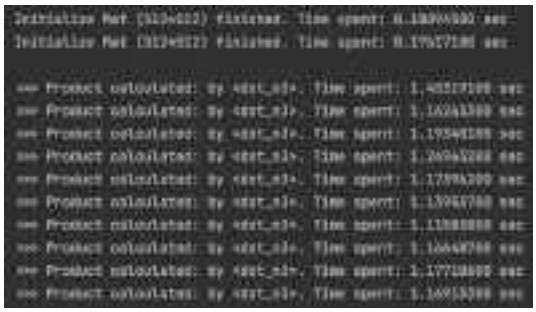
测试数据本身在计算过程中就有较多损失，故有三个样本点与其余精度数据相差较大。

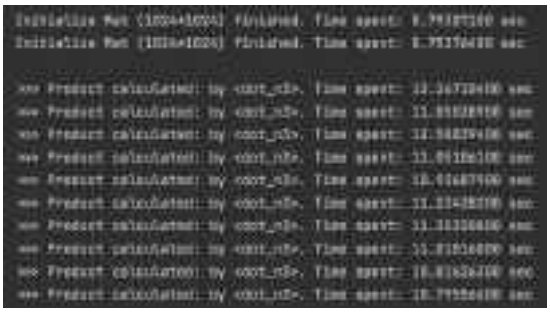
## 3.4 效率

### 3.4.1 double 与 float 对比









控制变量，为了体现时间差异，（不开启编译器优化的情况下）使用朴素乘法分别计算 512，2048 大小的矩阵 10 次。

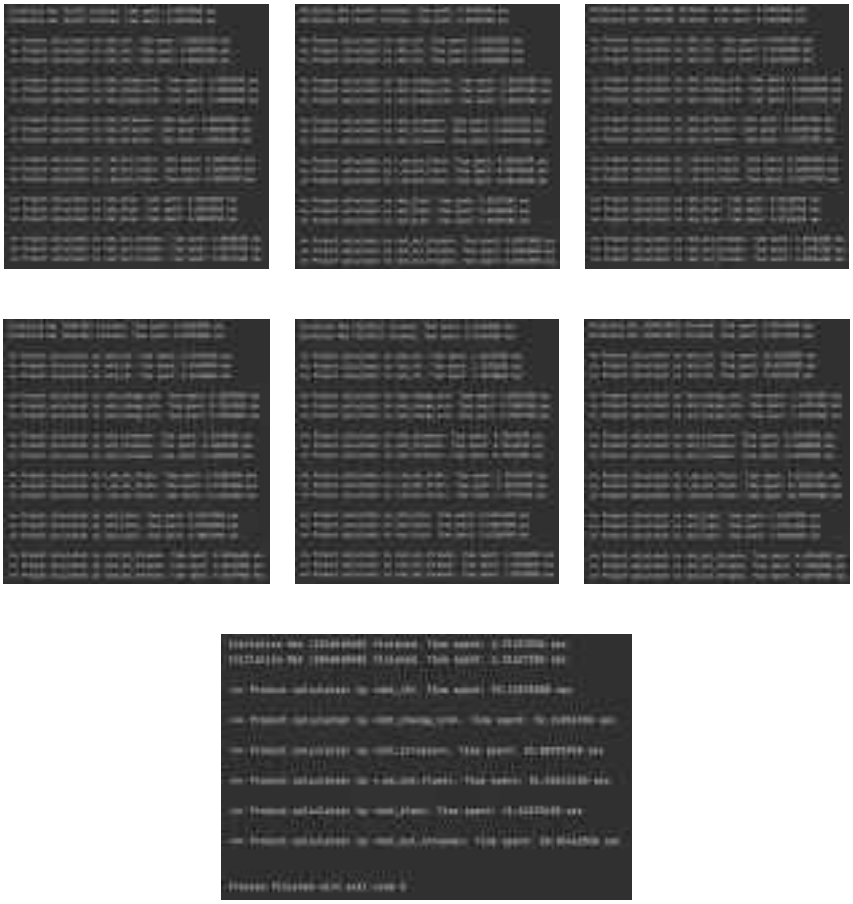
| | 512 | 1024 |
|---|---|---|
| double (avg / ms) | 1502.88 | 14304.77 |
| float (avg / ms) | 1192.39 | 11311.13 |

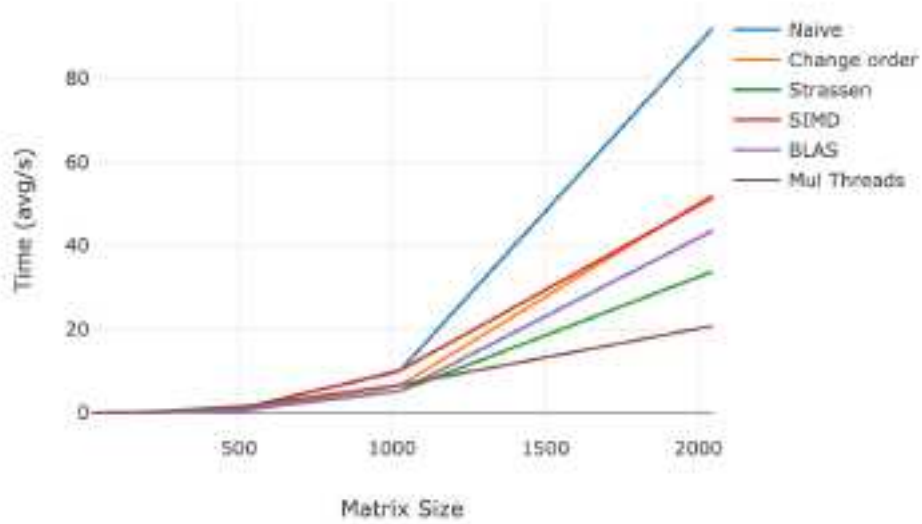
对于 512 规模的方阵，使用 float 比 double 节省了 20.66% 的时间，对于 1024 规模的方阵，使用 float 比 double 节省了 20.92% 的时间。关于此现象，一个合理的解释是 float 的 byte 数只有 double 的一半，在将数据从内存中取出供 ALU 运算时（包括存入缓存）的 IO 开销更少——CPU 在等待数据时被闲置，而使用 float 有益于内存密集的数据结构（主要是访问第一个被乘矩阵的一整行时），就 ALU 来说计算 float 和 double 的耗时没有太大差别。

本程序未实现 double 的 SIMD 运算，若实现，可以分析的是寄存器一次能存的 float 数量是 double 的两倍。

### 3.4.2 优化提升

关于 float 和 double 的效率分析主要见上，为了方便在此部分只使用 float 对比不同的乘法实现存在的显著差异。






其中朴素乘法的时间复杂度为 $O(n^3)$，耗时增长最快，与之对应的是 Strassen 算法凭借复杂度的优势在大矩阵运算时耗时明显减少（这里设置边界条件 256，对于小矩阵，Strassen 使用访存优化的方法计算）。对于将朴素乘法三重 for 循环（记为 ijk），通过调换乘法顺序（ikj）减少了 IO 开销也能做到很好的效率提升，若使用一维数组提升更加明显。SIMD 理论上计算向量点乘时性能能提升 8 倍，但在此例中因为需要创建新数组，将在内存中不连续了矩阵 B 的某列放入，这一步拖低了其效率。BLAS 的耗时虽没有 Strassen 短，但其精度更高，同样也是由于创建了新的临时数组存矩阵 B 的列而增加了耗时。多线程的方法使得 CPU 和 RAM 的利用率达到了最大（如下图所示，前面是单线程的方法，后面是多线程），因此大幅度提升效率（对于 2048 阶的矩阵，多线程的效率比朴素乘法提升了 77.39%），但在小矩阵运算时反而耗时更长，这是因为线程池

每次需要花费时间开辟线程，对于小矩阵，甚至做每一个向量点乘的时间都要小于开线程的时间，得不偿失。

#### 3.4.3 编译器 O3 优化

相比起手动进行向量化等优化，g++ 自带的 O3 优化可以在编译时加入*-O3* 参数打开。这将降低编译速度并改变代码逻辑，当工程较为复杂时甚至可能导致逻辑改变错误而程序运行异常。本程序在使用 O3 优化后并无错误，结果正确。


| 2048 阶矩阵乘法 | 初始化矩阵 | 朴素乘法 | 访存优化 | Strassen | SIMD | BLAS | 多线程 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 优化前 / s | 2.614 | 92.134 | 52.241 | 33.883 | 51.556 | 43.623 | 20.835 |
| 开启 O3 / s | 1.319 | 17.794 | 2.103 | 0.702 | 18.017 | 18.226 | 11.477 |
| 性能提升 / % | 49.54 | 80.69 | 95.97 | 97.93 | 65.05 | 58.22 | 44.91 |

可见编译器集成多种优化方案确实比自己写代码更周全。但同时，自己写的一些代码（如手动分配了寄存器）影响了 O3 的选项，降低了性能提升率。对本项目起到明显提升的主要有以下几项[11]：

**l -fdefer-pop** 延迟栈的弹出时间。当完成一个函数调用，参数并不马上从栈中弹出，而是在多个函数被调用后，一次性弹出。

**l -fdelayed-branch** 这种技术试图根据指令周期时间重新安排指令。它还试图把尽可能多的指令移动到条件分支前，以便最充分的利用处理器的治理缓存。

**l -fcprop-registers** 因为在函数中把寄存器分配给变量，所以编译器执行第二次检查以便减少调度依赖性(两个段要求使用相同的寄存器) 并且删除不必要的寄存器复制操作。

[11] gcc -O0 -O1 -O2 -O3 四级优化选项及每级分别做什么优化 (blog.csdn.net/zgaoq/article/details/83039511)

**l -fforce-mem** 在做算术操作前，强制将内存数据 copy 到寄存器中以后再执行。这会使所有的内存引用潜在的共同表达式，进而产出更高效的代码，当没有共同的子表达式时，指令合并将排出个别的寄存器载入。

**l -foptimize-sibling-calls** 优化相关的以及末尾递归的调用。

**l -finline-functions** 内联简单的函数到被调用函数中。由编译器启发式的决定哪些函数足够简单可以做这种内联优化。

# 4 困难及解决

## 4.1 模版类的使用

对于模版类 Mat<T>，我一开始使用了常规的 hpp 和 cpp 文件，但是在编译阶段会报错：*Undefined symbols for architecture x86_64*。这是因为在编译过程中实例化模板时，编译器使用给定的模板参数 <typename T> 创建一个新类——模板不能编译为代码，只能编译实例化模板的结果。网上常见的解决方法是将.cpp 里的内容直接放进 hpp 里（使用内联函数），但这样不规范且不优雅。最终发现可以将 cpp 文件改为 tpp 文件[12]，开头不引用 hpp，并在 hpp 文件的下方使用 include 将其预编译进去。其实本质依然是前者，但这样更为优雅。

## 4.2 指针、引用与栈内存

一开始我忘记用指针或引用向函数传递参数，结果容易导致函数返回后栈内存释放，析构函数在尝试 delete 数组时产生异常。经过本次项目，我现在牢记 C++ 默认使用按值传递，合理的使用引用和指针也有助于提升程序速度，这点我在以后的编程中牢记并善加运用。

# 5 总结

在人工智能热潮的今天，为了提升神经网络等模型的精度，计算机科学家们竭尽一切的研究提升矩阵乘法这类底层的、大量基础运算的性能。相比起经过优化的 NumPy 等成熟的计算库（在验证答案时，计算 2048 规模矩阵只用将近 1 sec），本程序依然存在许多可以优化的方面，如二维数组改一维以更好的实现访存优化、使用 void 函数（传入指针）减少按值传递的时间开销等，有些优化方案也是在完成了大部分代码时查资料了解到的，受时间限制暂未能实现。

完成本项目的过程中探索了一些新的语言特性（如第四节所讨论），对 C++ 的掌握更加深入，更激动人心的是我在本项目中第一次真正用上了硬件级优化，其大幅提升了计算效率（将 2048 矩阵乘法从最长大约需要 92 秒，优化至最快仅需 0.7 秒！），带来了纯算法所无法比拟的性能提升，这也展现出了现代计算机科技的强大。但是自己的代码优化能力依旧有待提升，手写的 SIMD 和多线程仍不如编译器开启 O3 优化后效率高。本次项目打开了硬件优化极致提升性能的新大门，也为接下来的学习注入动力。

[12]Why can templates only be implemented in the header file? (stackoverflow.com/questions/495021/why-can-templates-only-be-implemented-in-the-header-file)