

FlashAttention

赖俊宇 2024/01/26



相关链接

- GitHub 仓库(仓库中包含 V1、V2 的论文)
- HuggingFace
- From Online Softmax to FlashAttention (个人强烈推荐)
- FlashAttention V1 的推导细节 (个人推荐)
- FlashAttention V1、V2 差异总结(个人推荐)



FlashAttention

- Installation
- GPU Basics
- FlashAttention V1
- FlashAttention V2
- Other



Note

- 一定要先浏览一遍 GitHub 仓库中的 Installation and features
- 安装过程中会使用 ninja 做编译,一定要注意设置 MAX_JOBS 环境变量, 防止机器内存被快速用完
- 编译过程比较慢, 这是正常的
- FlashAttention 目前仅支持 Ampere、Ada、Hopper 架构的 GPU,以 91 机器为例,只有 A6000 支持, TITAN 不支持
- FlashAttention 仅支持 fp16 和 bf16 两种数据类型



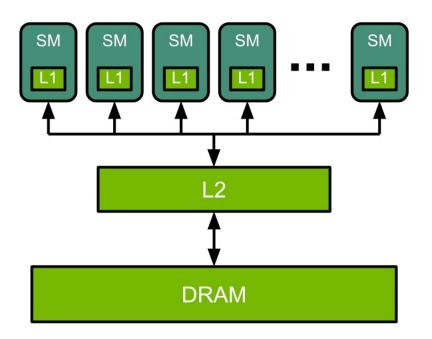
FlashAttention

- Installation
- GPU Basics
- FlashAttention V1
- FlashAttention V2
- Other



GPU Architecture

- 从 high level 的角度看, GPU 的组件包括: Streaming Multiprocessors、on-chip L2 cache、high-bandwidth DRAM
- 其中计算指令通过 SM 执行,数据和代码会从 DRAM 缓存到 cache 上
- 以 A100 为例, 包含 108 个 SM、40MB 的 L2 cache、80G 的 DRAM





Streaming Multiprocessors (SM)

- Streaming Multiprocessors (SM): GPU 内部的数据处理单元,每个SM 有自己的执行流,可以类比为多核 CPU 中的一个核,只是 GPU 的一个核能运行多个线程
- 一个 SM 的构成:
 - 多个 CUDA Core,用于做数学运算
 - 若干 special function units,用于特殊的计算场景
 - 几个 warp scheduler
- 此外, 一个 SM 还拥有:
 - 一个 read-only constant cache
 - 一个统一的 data cache 和 shared memory, 大小根据具体的设备而不同, 大概是一百多到两百多 KB, shared memory 的大小可配置,配置完后剩 余的存储空间就作为 L1 cache



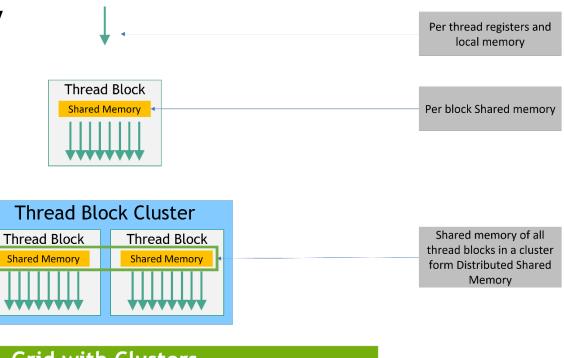
Thread Hierarchy

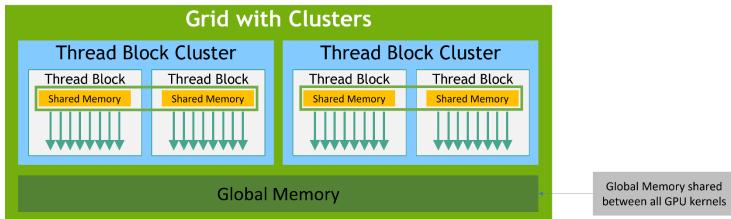
- 多个线程被组织成一个 block,在执行过程中,同一个 block 内的线程会被放在一个 SM 上执行,因此同一个 block 中的线程会共享 L1,一个 block 中最多包含 1024 个线程
- 多个 block 会被组织成一个 grid , 一个 grid 中包含多少 block 由具体的数据规模决定
- 一方面来说,我们可以让一次计算尽可能使用多个 block 来提高并行度;另一方面,我们也可以让一个 SM 并发执行多个计算任务的 block
- 从硬件执行的角度来说,SM 会把一个 block 中的线程再分成 32 个为一组,称为 warp,一个 warp 上的线程会执行完全一样的指令,所以效率最高的情况是 warp 中的线程执行路径完全相同;而当出现分支的情况下,可能会导致部分线程提前执行完指令,进而导致当前的 GPU core 空闲





Memory Hierarchy





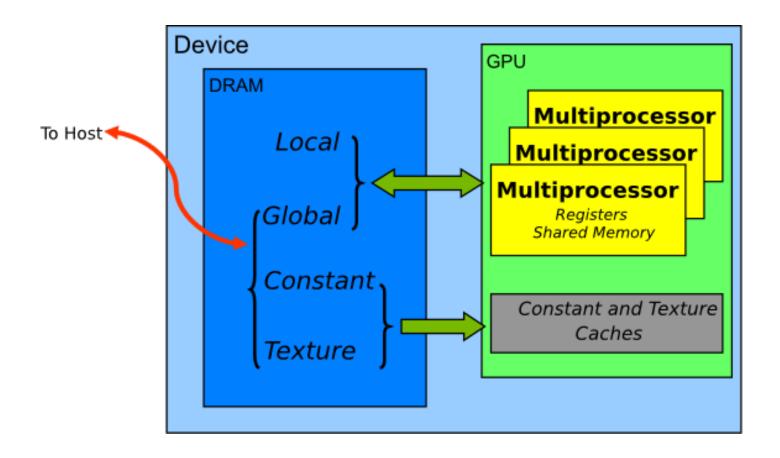




| Memory | Location on/off chip | Cached | Access | Scope | Lifetime |
|---|----------------------|--------|--------|----------------------------|--------------------|
| Register | On | n/a | R/W | 1 thread | Thread |
| Local | Off | Yes†† | R/W | 1 thread | Thread |
| Shared | On | n/a | R/W | All threads in block | Block |
| Global | Off | t | R/W | All threads + host | Host allocation |
| Constant | Off | Yes | R | All threads + host | Host allocation |
| Texture | Off | Yes | R | All threads + host | Host allocation |
| [†] Cached in L1 and L2 by default on devices of compute capability 6.0 and 7.x; cached only in L2 by default on devices of lower compute capabilities, though some allow opt-in to caching in L1 as well via compilation flags. | | | | | |
| ^{††} Cached in L1 and L2 by default except on devices of compute capability 5.x; devices of compute capability 5.x cache locals only in L2. | | | | | |



Memory Hierarchy





Memory 补充说明

- on-chip memory:包括 register 和 shared memory,所有的 on-chip memory 都是 SRAM
- off-chip memory:包括 global、local、constants、texture memory,
 所有的 off-chip memory 都是 DRAM
- Global Memory 中访问的数据总是会被缓存到 L2 中,当满足一些更严格的条件时会进一步被缓存到 L1 中
- GPU DRAM 的大小 = off-chip memory 的大小 = "显存"
- High Bandwidth Memory (HBM) : 可以认为指的就是 DRAM
- 之前提到过, L1 cache 和 shared memory 共享一块 on-chip memory, 所以我们可以认为这两者的访问速度相同。注意, cache 是程序员无法控制的,但 shared memory 可以



FlashAttention

- Installation
- GPU Basics
- FlashAttention V1
- FlashAttention V2
- Other



Basic Info

- 效果: FlashAttention 可以加速 Attention Layer 在训练和推理过程中的计算速度,并且保证计算结果准确
- 出发点: Transformer 架构的计算时间开销大
- 原理:减少存储访问开销,这与绝大数减少计算量的方法的原理是不一样的



标准 Self Attention

Algorithm 0 Standard Attention Implementation

Require: Matrices $\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times d}$ in HBM.

- 1: Load \mathbf{Q}, \mathbf{K} by blocks from HBM, compute $\mathbf{S} = \mathbf{Q}\mathbf{K}^{\mathsf{T}}$, write \mathbf{S} to HBM.
- 2: Read **S** from HBM, compute P = softmax(S), write **P** to HBM.
- 3: Load **P** and **V** by blocks from HBM, compute $\mathbf{O} = \mathbf{PV}$, write \mathbf{O} to HBM.
- 4: Return **0**.
- N 表示序列长度, d 表示 head dimension
- 在这个过程中,一共包含了 8 次需要访问 HBM 的操作
 - 第1行:读Q、K,写S
 - 第2行:读S,写P
 - 第3行:读P、V,写O
- HBM 访问成本: **O**(Nd + N²)



优化维度

Algorithm 0 Standard Attention Implementation

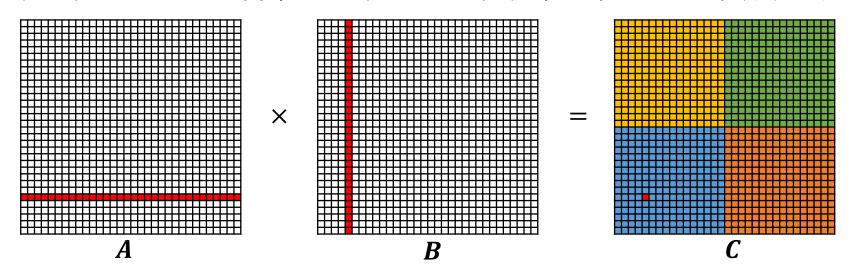
Require: Matrices $\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times d}$ in HBM.

- 1: Load \mathbf{Q}, \mathbf{K} by blocks from HBM, compute $\mathbf{S} = \mathbf{Q}\mathbf{K}^{\mathsf{T}}$, write \mathbf{S} to HBM.
- 2: Read **S** from HBM, compute P = softmax(S), write **P** to HBM.
- 3: Load **P** and **V** by blocks from HBM, compute $\mathbf{O} = \mathbf{PV}$, write \mathbf{O} to HBM.
- 4: Return **O**.
- 一种思路是:减少每一步中实际访问 HBM(global memory)的次数
- 或者:调整算法步骤,减少整体流程上访问 HBM 的次数



从 block 出发思考问题

- 以矩阵乘法 $C = A \times B$ 为例,在实际的计算过程中,线程会被组织成 block,再交由 SM 执行
- 以 C 为 32*32 的矩阵 , block 为 16*16 为例 , 一个 naive 的实现方法 :

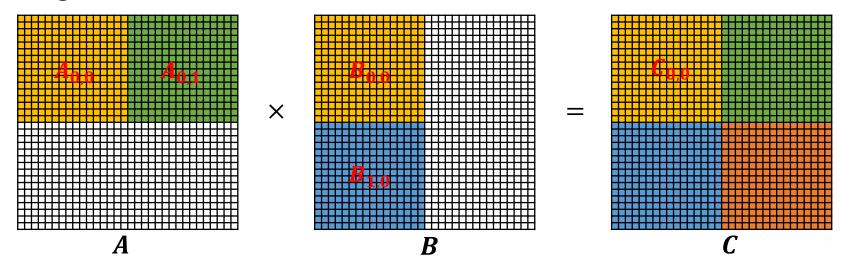


• C 中每个位置的计算需要访问 global memory 2*32 次,总共就是2*32*32 次



Tiling 技术

- 在 naive 的实现方法中,我们并没有考虑利用 shared memory,而 Tiling 技术就是通过利用 shared memory 减少 global memory 的访问
- Tiling 技术图示:



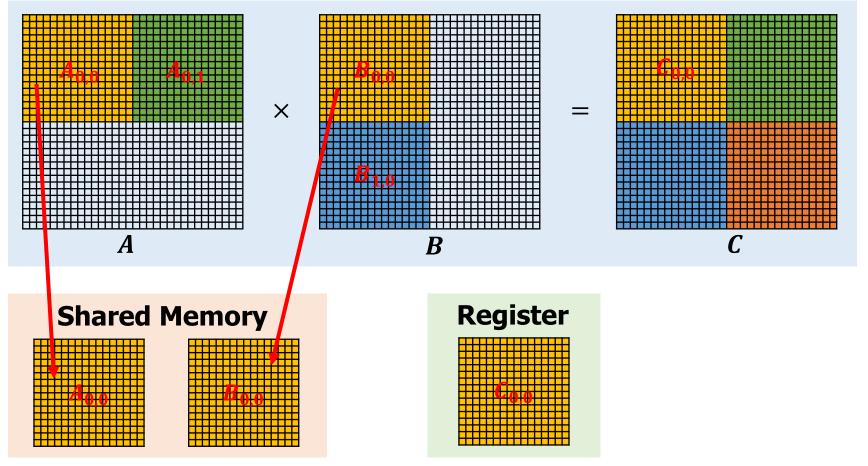
- $A_{0,0} \times B_{0,0} + A_{0,1} \times B_{1,0} = C_{0,0}$
- $A_{0,0}$ 和 $B_{0,0}$ 可以同时存储在 shared memory 上, $C_{0,0}$ 中的每个元素的值存储在 register 上



Tiling 技术 (cont'd)

• 第一轮迭代存储角度图示:

Global Memory



Global Memory



Tiling 技术 (cont'd)

• 第二轮迭代存储角度图示:

X **Shared Memory** Register



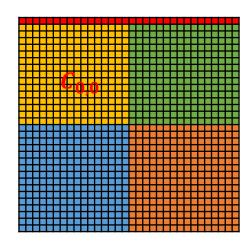
Tiling 技术 (cont'd)

- 总计算量保持不变
- 但是总的 global memory 的访问次数大大降低,我们算出 C 矩阵四分之一的结果时,访问了 16*16*4次 global memory,那么总共将访问 16*16*4*4次,一共4096次;而之前 naive 的方法访问了 65536次,减少为了原来的 1/16
- 通过调整 block 的大小,我们还可以进一步改变 global memory 的访问次数



Unfortunately

- Tiling 技术虽然可以用于矩阵乘法,但是不能直接用于 Attention 的计算
- 在 Attention Layer 的计算中,存在一次 softmax 操作,这个操作是 row-wise 的



- 在仅计算出 $c_{0,0}$ 的情况下,无法计算 softmax 的值,因为 softmax 的值还依赖于 $c_{0,1}$
- 因此 Tiling 技术仅仅减少了标准 Attention 算法中矩阵乘法的实际 global memory 访问次数,但是并没有从整体上改变标准 Attention 算法的流程



Safe Softmax

• Softmax 的公式:

softmax(
$$\{x_1, \dots, x_N\}$$
) = $\left\{\frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^N e^{x_j}}\right\}_{i=1}^N$

• 为了防止指数爆炸问题,在实际计算的时候会采用 Safe Softmax:

$$\frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^N e^{x_j}} = \frac{e^{x_i - m}}{\sum_{j=1}^N e^{x_j - m}}$$

• 一般来说,上述公式中 $m = \max_{j=1}^{N} (x_j)$,这样能保证指数项一定小于等于0



一个迭代式的 Safe Softmax 的算法(V1)

NOTATIONS

 $\{m_i\}: \max_{j=1}^i \{x_j\}, \text{ with initial value } m_0 = -\infty.$

 $\{d_i\}: \sum_{j=1}^i e^{x_j - m_N}$, with initial value $d_0 = 0$, d_N is the denominator of safe softmax.

 $\{a_i\}$: the final softmax value.

BODY

for $i \leftarrow 1, N$ do

$$m_i \leftarrow \max\left(m_{i-1}, x_i\right)$$

end

for $i \leftarrow 1, N$ do

$$d_i \leftarrow d_{i-1} + e^{x_i - m_N}$$

end

for $i \leftarrow 1, N$ do

$$a_i \leftarrow \frac{e^{x_i - m_N}}{d_N}$$

end



Online Softmax (V2)

• 优化思路:消除 d_i 对 m_N 的依赖

$$d_i' = \sum_{j=1}^i e^{x_j - m_i}$$

$$= \left(\sum_{j=1}^{i-1} e^{x_j - m_i}\right) + e^{x_i - m_i}$$

$$= \left(\sum_{j=1}^{i-1} e^{x_j - m_{i-1}}\right) e^{m_{i-1} - m_i} + e^{x_i - m_i}$$

$$= d_{i-1}' e^{m_{i-1} - m_i} + e^{x_i - m_i}$$

for $i \leftarrow 1, N$ do

$$m_i \leftarrow \max(m_{i-1}, x_i)$$

 $d'_i \leftarrow d'_{i-1} e^{m_{i-1} - m_i} + e^{x_i - m_i}$

end

for $i \leftarrow 1, N$ do

$$a_i \leftarrow \frac{e^{x_i - m_N}}{d_N'}$$

V2 版本的算法

end



Again, Unfortunately

- 这个优化对于 softmax 操作来说已经到头了,我们不可能在一次循环中把 softmax 的结果计算出来
- 原因:向量中的每个元素都是独立的,不可能在没有遍历到后续元素的情况下,确定当前元素最终的 softmax 值

But

• Attention Layer 的最终目的并不是为了计算 softmax ,而是 softmax 以后的还需要乘以矩阵 V



一个 2-pass 的 Self Attention 的算法(V1)

NOTATIONS

Q[k,:]: the k-th row vector of Q matrix.

 $K^T[:,i]$: the *i*-th column vector of K^T matrix.

O[k,:]: the k-th row of output O matrix.

V[i,:]: the *i*-th row of V matrix.

 $\{o_i\}: \sum_{j=1}^i a_j V[j,:],$ a row vector storing partial aggregation result $A[k,:i] \times V[:i,:]$

Body

for $i \leftarrow 1, N$ do

$$x_i \leftarrow Q[k,:] K^T[:,i]$$

$$m_i \leftarrow \max(m_{i-1}, x_i)$$

$$d'_i \leftarrow d'_{i-1} e^{m_{i-1} - m_i} + e^{x_i - m_i}$$

end

for $i \leftarrow 1, N$ do

$$a_i \leftarrow \frac{e^{x_i - m_N}}{d'_N}$$

 $o_i \leftarrow o_{i-1} + a_i V[i,:]$

end

仅考虑输出矩阵 O 的第 k 行

$$O[k,:] \leftarrow \mathbf{o}_N$$



改良版的 1-pass 算法 (V2)

$$\begin{split} o_i' &= \sum_{j=1}^i \frac{e^{x_j - m_i}}{d_i'} V[j,:] \\ &= \left(\sum_{j=1}^{i-1} \frac{e^{x_j - m_i}}{d_i'} V[j,:] \right) + \frac{e^{x_i - m_i}}{d_i'} V[i,:] \\ &= \left(\sum_{j=1}^{i-1} \frac{e^{x_j - m_{i-1}}}{d_{i-1}'} \frac{e^{x_j - m_i}}{e^{x_j - m_{i-1}}} \frac{d_{i-1}'}{d_i'} V[j,:] \right) + \frac{e^{x_i - m_i}}{d_i'} V[i,:] \\ &= \left(\sum_{j=1}^{i-1} \frac{e^{x_j - m_{i-1}}}{d_{i-1}'} V[j,:] \right) \frac{d_{i-1}'}{d_i'} e^{m_{i-1} - m_i} + \frac{e^{x_i - m_i}}{d_i'} V[i,:] \\ &= o_{i-1}' \frac{d_{i-1}' e^{m_{i-1} - m_i}}{d_i'} + \frac{e^{x_i - m_i}}{d_i'} V[i,:] \end{split}$$



改良版的 1-pass 算法(V2)(cont'd)

for $i \leftarrow 1, N$ do

$$x_{i} \leftarrow Q[k,:] K^{T}[:,i]$$
 $m_{i} \leftarrow \max(m_{i-1}, x_{i})$
 $d'_{i} \leftarrow d'_{i-1} e^{m_{i-1} - m_{i}} + e^{x_{i} - m_{i}}$
 $o'_{i} \leftarrow o'_{i-1} \frac{d'_{i-1} e^{m_{i-1} - m_{i}}}{d'_{i}} + \frac{e^{x_{i} - m_{i}}}{d'_{i}} V[i,:]$

end

$$O[k,:] \leftarrow \boldsymbol{o}'_N$$

- 我们会惊喜地发现,虽然 softmax 无法用 1-pass 的方式解决,但是 Self Attention 的计算可以
- 这个 1-pass 的 Self Attention 的算法就可以看作 FlashAttention V1 的原型



FlashAttention V1

• FlashAttention 在实现时,还考虑到了 Tiling 技术

NEW NOTATIONS b: the block size of the tile #tiles: number of tiles in the row, $N = b \times \#$ tiles. \boldsymbol{x}_i : a vector storing the $Q[k] K^T$ value of the i-th tile [(i-1)b:ib]. $m_i^{(local)}$: the local maximum value inside \boldsymbol{x}_i .

BODY

for $i \leftarrow 1$, #tiles do

$$egin{aligned} & m{x}_i &\leftarrow Q[k,:]K^T[:,(i-1)\,b:\,i\,b] \end{aligned}$$
 一次计算 K^T 的多列 $m_i^{(\mathrm{local})} &= \max_{j=1}^b (m{x}_i[j]) \\ &m_i &\leftarrow \max \left(m_{i-1},m_i^{(\mathrm{local})}\right) \\ &d_i' &\leftarrow d_{i-1}' e^{m_{i-1}-m_i} + \sum_{j=1}^b e^{m{x}_i[j]-m_i} \quad m{x}_i[j]$ 指的是向量 $m{x}_i$ 的第 j 列 $m{o}_i' &\leftarrow m{o}_{i-1}' rac{d_{i-1}' e^{m_{i-1}-m_i}}{d_i'} + \sum_{j=1}^b e^{m{x}_i[j]-m_i} V[j+(i-1)\,b,:] \end{aligned}$ 这里计算得到

end

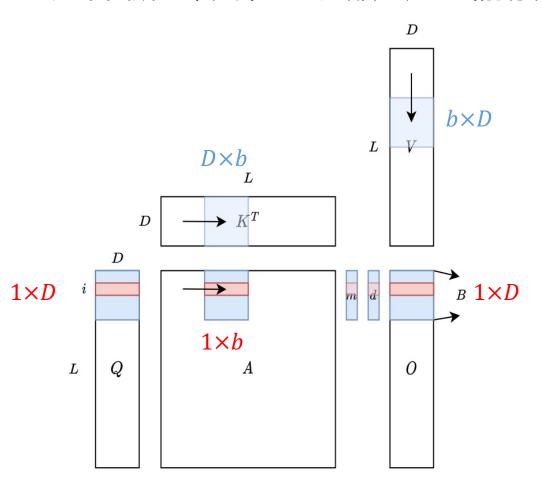
$$O[k,:] \leftarrow \boldsymbol{o}'_{N/b}$$

-个 1×D 的向量



FlashAttention V1

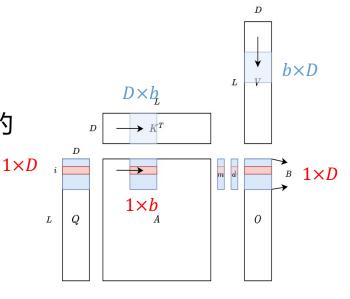
• 如下图所示,其中蓝色的部分表示当前存储在 shared memory 中的部分





补充说明

- FlashAttention 原文中的算法描述和这里存在一些差异,在原文中:
 - B_c 指的是图中的 b
 - B_r 指的是图中矩阵 Q 中蓝色区域的行数
 - 算法描述的形式是针对整个矩阵 Q 中蓝色区域的
 - 外层循环是矩阵 K,V , 内层循环是矩阵 Q,O
 - d 指的是图中的 D
 - N 指的是图中的 L
- FlashAttention 的实现是不唯一的,事实上,很多实现都没有完全采用原始论文中的方法,会有一定程度的调整
- 此处仅讨论了 forward 的情况 , backward 的情况类似



 \boldsymbol{o}_i 和 \boldsymbol{o}_i 是对应的,位置一样



原文算法描述

Algorithm 1 FlashAttention

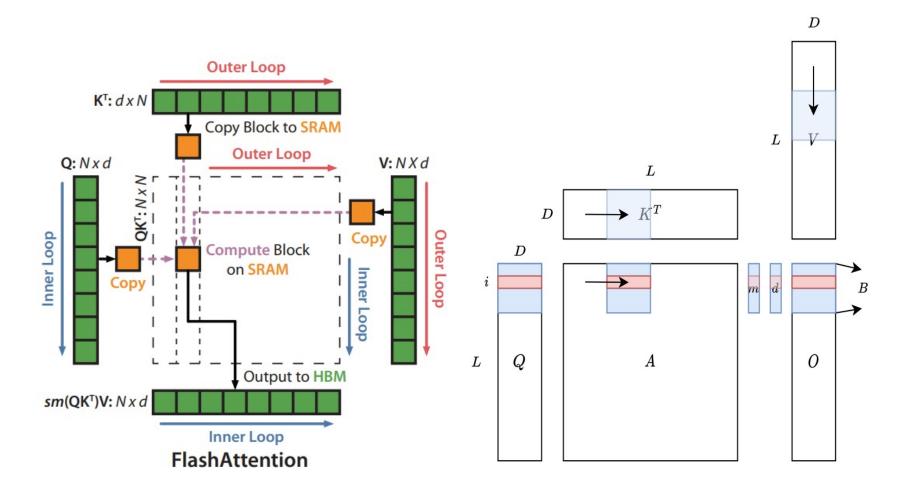
```
Require: Matrices \mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times d} in HBM, on-chip SRAM of size M.
  1: Set block sizes B_c = \left\lceil \frac{M}{4d} \right\rceil, B_r = \min\left( \left\lceil \frac{M}{4d} \right\rceil, d \right).
```

2: Initialize $\mathbf{O} = (0)_{N \times d} \in \mathbb{R}^{N \times d}, \ell = (0)_N \in \mathbb{R}^N, m = (-\infty)_N \in \mathbb{R}^N$ in HBM.

- 3: Divide **Q** into $T_r = \left[\frac{N}{B_r}\right]$ blocks $\mathbf{Q}_1, \dots, \mathbf{Q}_{T_r}$ of size $B_r \times d$ each, and divide \mathbf{K}, \mathbf{V} in to $T_c = \left[\frac{N}{B_c}\right]$ $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_{T_c}$ and $\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_{T_c}$, of size $B_c \times d$ each.
- 4: Divide **O** into T_r blocks O_i, \ldots, O_{T_r} of size $B_r \times d$ each, divide ℓ into T_r blocks $\ell_i, \ldots, \ell_{T_r}$ of size B_r each, divide m into T_r blocks m_1, \ldots, m_{T_r} of size B_r each.
- 5: for $1 \le j \le T_c$ do
- Load \mathbf{K}_i , \mathbf{V}_i from HBM to on-chip SRAM.
- for $1 \le i \le T_r$ do 7:
- Load $\mathbf{Q}_i, \mathbf{O}_i, \ell_i, m_i$ from HBM to on-chip SRAM. 8:
- On chip, compute $\mathbf{S}_{ij} = \mathbf{Q}_i \mathbf{K}_i^T \in \mathbb{R}^{B_r \times B_c}$. 9:
- On chip, compute $\tilde{m}_{ij} = \text{rowmax}(\mathbf{S}_{ij}) \in \mathbb{R}^{B_r}$, $\tilde{\mathbf{P}}_{ij} = \exp(\mathbf{S}_{ij} \tilde{m}_{ij}) \in \mathbb{R}^{B_r \times B_c}$ (pointwise), $\tilde{\ell}_{ij} = \exp(\mathbf{S}_{ij} \tilde{m}_{ij})$ 10: $\operatorname{rowsum}(\tilde{\mathbf{P}}_{ii}) \in \mathbb{R}^{B_r}$.
- On chip, compute $m_i^{\text{new}} = \max(m_i, \tilde{m}_{ij}) \in \mathbb{R}^{B_r}$, $\ell_i^{\text{new}} = e^{m_i m_i^{\text{new}}} \ell_i + e^{\tilde{m}_{ij} m_i^{\text{new}}} \tilde{\ell}_{ij} \in \mathbb{R}^{B_r}$. Write $\mathbf{O}_i \leftarrow \text{diag}(\ell_i^{\text{new}})^{-1}(\text{diag}(\ell_i)e^{m_i m_i^{\text{new}}}\mathbf{O}_i + e^{\tilde{m}_{ij} m_i^{\text{new}}}\tilde{\mathbf{P}}_{ij}\mathbf{V}_j)$ to HBM. 11:
- 12:
- Write $\ell_i \leftarrow \ell_i^{\text{new}}$, $m_i \leftarrow m_i^{\text{new}}$ to HBM. 13:
- end for 14:
- 15: end for
- 16: Return **O**.



原文算法图和此处的图的比较





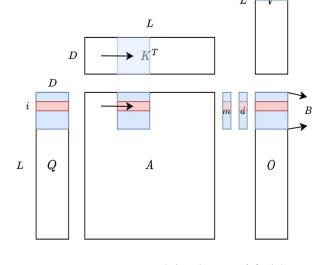
FlashAttention

- Installation
- GPU Basics
- FlashAttention V1
- FlashAttention V2
- Other



改进一:调整内外循环

• FlashAttention V1 中采用了一个不直觉的外层循环矩阵 K,V ,内层循环矩阵 Q,O 的方式,这个思路其实很奇怪,因为这样会导致矩阵 O 被 额外加载



 事实上,在 FlashAttention V2 出来之前,很多 FlashAttention 的实现就修 改了这个循环顺序



改进二:减少了非矩阵乘法的运算次数

- 原因:现代 GPU 对矩阵乘法有专门的硬件优化,矩阵乘法的 FLOP 是非 矩阵乘法的 FLOP 的 16 倍左右
- 具体实现上, FlashAttention V1 每轮迭代都有一个 rescale 操作,即:

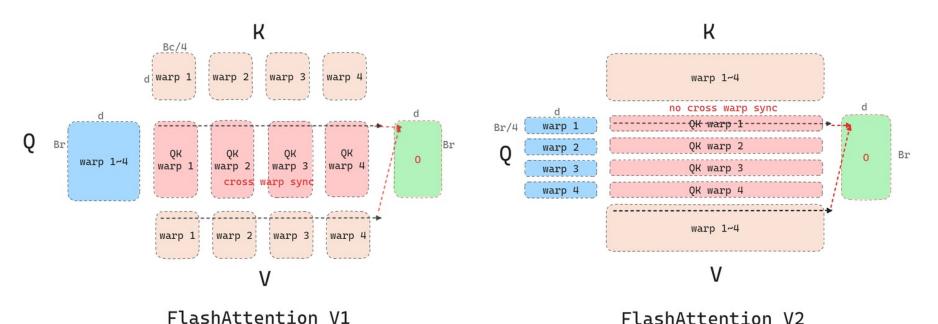
$$\begin{aligned} x_i &\leftarrow Q[k,:] \, K^T[:,i] \\ m_i &\leftarrow \max \left(m_{i-1}, x_i \right) \\ d_i' &\leftarrow d_{i-1}' e^{m_{i-1} - m_i} + e^{x_i - m_i} \\ \hline o_i' &\leftarrow o_{i-1}' \frac{d_{i-1}' e^{m_{i-1} - m_i}}{d_i'} + \frac{e^{x_i - m_i}}{d_i'} V[i,:] \end{aligned} \quad \text{rescale}$$
 end

• 在 V2 中,不再在每轮迭代中都除以 d_i' ,而是等循环体结束以后,对计算得到 的 \mathbf{o}_N' 统一除以 d_N'



改进三:Warp Level 并行度

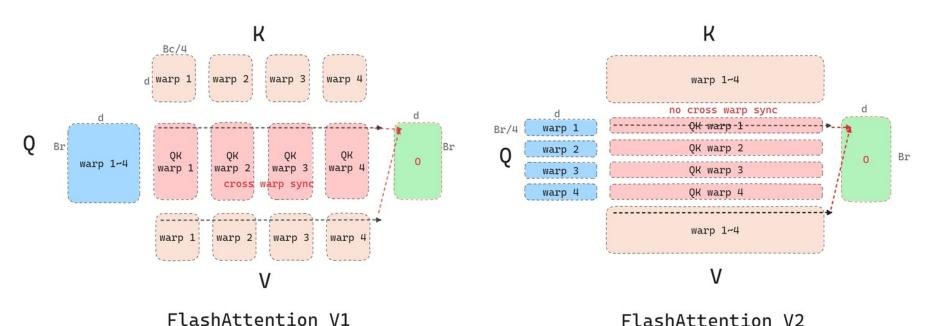
• 假设一个 block 实际上会被 SM 划分成 4 个 warp, 在 V1 版本中,矩阵 K,V 的 block 会被划分成 4 个 warp,每个 warp 计算 $\mathbf{Q}_i \mathbf{K}_j^T$ 后会得到一个 $B_r \times \frac{B_c}{4}$ 的矩阵,需要 4 个 warp 全部计算完以后,把四个矩阵排成一行(下图中 V1 版本红色的四个矩阵),才能计算 $\mathbf{Q}_i \mathbf{K}_j^T$ 真正的值,这个过程中存在 warp 之间的通信





改进三: Warp Level 并行度(cont'd)

• 在 V2 版本中,矩阵 Q 的 block 会被划分成 4 个 warp,这种情况下每个 warp 计算出来的结果就是一个 $\frac{B_r}{4} \times B_c$ 的矩阵,这个矩阵已经包含了 $Q_i K_j^T$ 中完整的 $\frac{B_r}{4}$ 行,所以整个计算就只需要在 warp 内部进行,不需要 进行 warp 之间的通信





FlashAttention

- Installation
- GPU Basics
- FlashAttention V1
- FlashAttention V2
- Other



FlashAttention 目前最方便的使用途径

- 使用官方库 flash_attn,可以通过 pip 直接安装,这种方法如果需要做一些逻辑上的修改(例如加 mask),学习和 Debug 的成本较高
- 使用 Triton Language 中的实现,实际性能也非常好
 - Triton Language 将在下一次讨论班中介绍 ☺



Thanks!

赖俊宇

2024/01/26