FlashAttention

This is a minimal implementation of FlashAttention.

Falsh Attention Overview

Self-Attention

below is the computation pipeline of self-attention. $$ X = QK^T\ A = softmax(X)\ O = AV $$

safe softmax

Let's recall the softmax operator first: $$ softmax({x_1, x_2,...,x_N})={\frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^{N}e^{x_j}}}_{i=1}^{N} $$

Note that x_i might be very large and e^{x_i} can easily overflow. Due to the numerical stability, we always compuate the `softmax` in a safe way: $$ \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^{N}e^{x_j}}=\frac{e^{x_i-m}}{\sum_{j=1}^{N}e^{x_j-m}} $$ where $m=max_{j=1}^{N}(x_j)$

Algorithm 3-pass safe softmax

NOTATIONS
$\{m_i\}$: $\max_{j=1}^{i}\{x_j\}$, 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**

$$m_i \leftarrow \max(m_{i-1}, x_i) \quad \text{from 1 to N, find the max \$m\_i\$} \tag{7}$$

end
for $i \leftarrow 1, N$ **do**

$$d_i \leftarrow d_{i-1} + e^{x_i - m_N} \quad \text{compute the \$\textbackslash sum\$} \tag{8}$$

end
for $i \leftarrow 1, N$ **do**

$$a_i \leftarrow \frac{e^{x_i - m_N}}{d_N} \quad \text{compute each element in softmax output} \tag{9}$$

end

online softmax

if we fuse the eqution 7. 8. 9., then we can reduce the global memory access time from 3 to 1. **Unfortunately, we can not fuse the eqution 7 and 8, bacause 8 depands on the m_N**.

We can create another squence $d_i^{'}:=\sum_{j=1}^{i}e^{x_j-m_i}$ as a surrogate for original squence $d_i:=\sum_{j=1}^{i}e^{x_j-m_N}$ to remove the dependency on m_N. Besides, the N-th term of these two squences is identical:$d_N=d_N^{'}$. Thus we can safaly replace d_N in eqution 9 with $d_N^{'}$. We can also find the recurrence relation between $d_i^{'}$ and $d_{i-1}^{'}$: $$ \begin{align*} d'*i &= \sum*{j=1}^i e^{x_j - m_i} \ &= \left(\sum_{j=1}^{i-1} e^{x_j - m_i} \right) + e^{x_i - m_i} \ &= \left(\sum_{j=1}^{i-1} e^{x_j - m_{i-1}} \right) e^{m_{i-1} - m_i} + e^{x_i - m_i} \ &= d'*{i-1} e^{m*{i-1} - m_i} + e^{x_i - m_i} \end{align*} $$

This recurrent form only depend on m_i and m_{i-1}, and we can compute m_j and d'_j together in the same loop.

Algorithm 2-pass online softmax

for $i \leftarrow 1, N$ **do**

$$\begin{aligned} m_i &\leftarrow \max(m_{i-1}, x_i) \\ d'_i &\leftarrow d'_{i-1} e^{m_{i-1}-m_i} + e^{x_i - m_i} \end{aligned}$$

end

for $i \leftarrow 1, N$ **do**

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

end

This is the algorithm proposed in Online Softmax paper online softmax. However it still requires 2-pass, can we reduce the number of passes to 1-pass to minimize global I/O?

Flash Attention

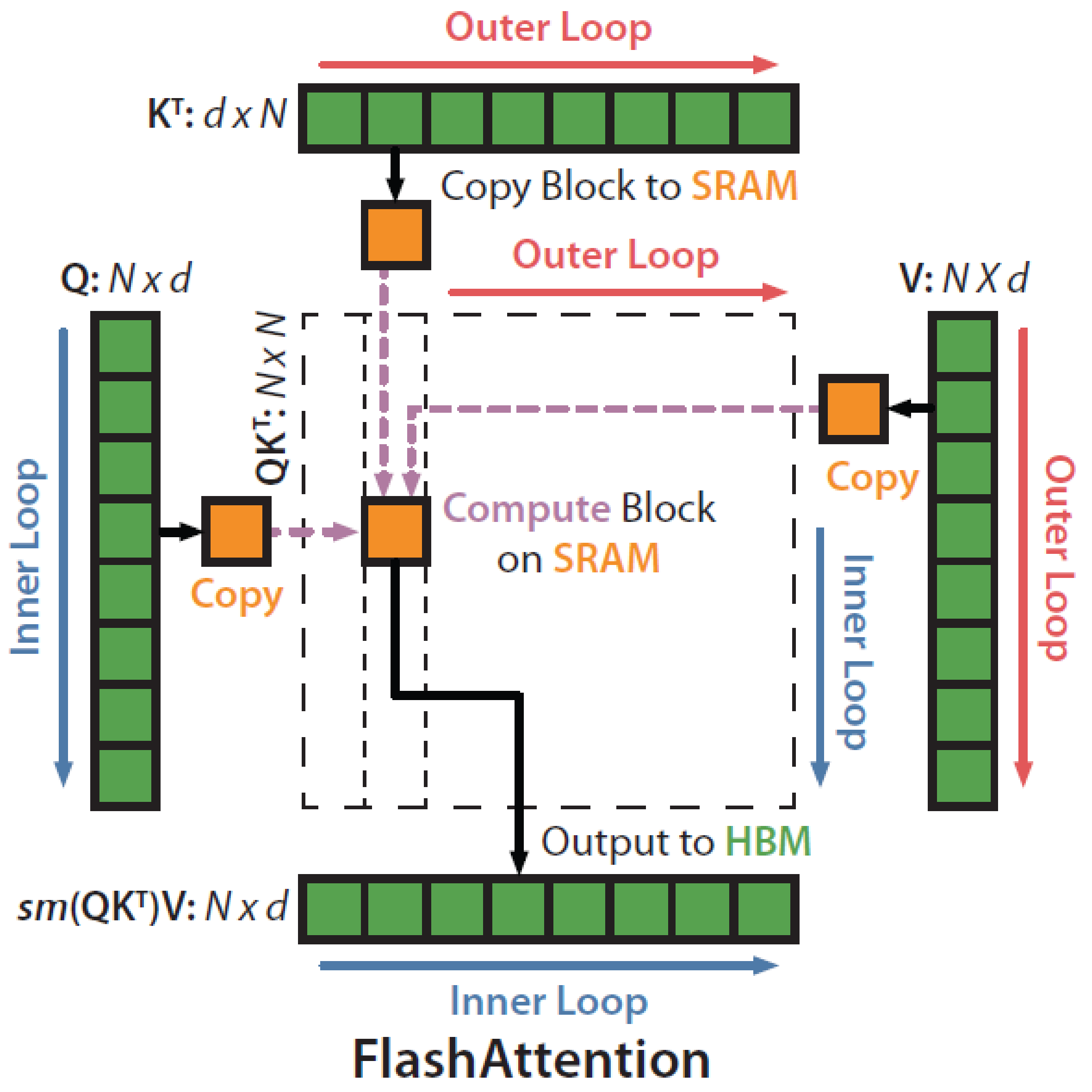
FA把优化目标是单个Head的Attention计算内，N是seqence length长度、d是hidden dimension大小。

如果没有softmax的话，我们可以把Q，K，V沿着N（seqence length维度）切成块，算完一块Q和一块K^T之后，立刻和一块V进行矩阵矩阵乘法运算（GEMM)。一方面，避免在HBM和SRAM中移动P矩阵了，另一方面，P矩阵也不需要被显式分配出来，消除了O(N^2) HBM存储的开销，从而达到了加速计算和节省显存的效果。

可是麻烦出现在Softmax！Softmax需要对完整的QK^T结果矩阵沿着Inner Loop维度进行归一化。Softmax需要全局的max和sum结果才能scale每一个元素，因此本地算出一块QK^T的结果还不能立刻和V进行运算，还要等同一行的后面的QK^T都算完才能开始，这就造成依赖关系，影响计算的并行。

Online softmax可以打破之前必须先算完一整行的QK^T结果，再和V相乘的依赖关系。算出local softmax结果立刻和V的分块运算，后面再通过乘系数矫正即可。

下面是FlashAttention的具体算法。


Outer Loop
K^T: d x N
Copy Block to SRAM
Outer Loop
Q: N x d
V: N X d
QK^T: N x N
Inner Loop
Copy
Compute Block
on SRAM
Copy
Inner Loop
Outer Loop
Output to HBM
sm(QK^T)V: N x d
Inner Loop
FlashAttention

Algorithm 1 FlashAttention

N:seq len
d:hidden dim

Require: Matrices $\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times d}$ in HBM, on-chip SRAM of size M.

Set block sizes $B_c = \left\lceil \frac{M}{4d} \right\rceil$, $B_r = \min\left(\left\lceil \frac{M}{4d} \right\rceil, d\right)$.

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.

Divide $\mathbf{Q}$ into $T_r = \left\lceil \frac{N}{B_r} \right\rceil$ blocks $\mathbf{Q}_1, \dots, \mathbf{Q}_{T_r}$ of size $B_r \times d$ each, and divide $\mathbf{K}, \mathbf{V}$ in to $T_c = \left\lceil \frac{N}{B_c} \right\rceil$ blocks $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_{T_c}$ and $\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_{T_c}$, of size $B_c \times d$ each.

Divide $\mathbf{O}$ into T_r blocks $\mathbf{O}_i, \dots, \mathbf{O}_{T_r}$ of size $B_r \times d$ each, divide ℓ into T_r blocks $\ell_i, \dots, \ell_{T_r}$ of size B_r each, divide m into T_r blocks $m_1, \dots, m_{T_r}$ of size B_r each.

for $1 \le j \le T_c$ **do**

  Load $\mathbf{K}_j, \mathbf{V}_j$ from HBM to on-chip SRAM.

  for $1 \le i \le T_r$ **do**

    Load $\mathbf{Q}_i, \mathbf{O}_i, \ell_i, m_i$ from HBM to on-chip SRAM.

    On chip, compute $\mathbf{S}_{ij} = \mathbf{Q}_i \mathbf{K}_j^T \in \mathbb{R}^{B_r \times B_c}$.

    On chip, compute $\tilde{m}_{ij} = \mathrm{rowmax}(\mathbf{S}_{ij}) \in \mathbb{R}^{B_r}$, $\tilde{\mathbf{P}}_{ij} = \exp(\mathbf{S}_{ij} - \tilde{m}_{ij}) \in \mathbb{R}^{B_r \times B_c}$ (pointwise), $\tilde{\ell}_{ij} = \mathrm{rowsum}(\tilde{\mathbf{P}}_{ij}) \in \mathbb{R}^{B_r}$.

    On chip, compute $m_i^{\text{new}} = \max(m_i, \tilde{m}_{ij}) \in \mathbb{R}^{B_r}$, $\ell_i^{\text{new}} = e^{m_i - m_i^{\text{new}}} \ell_i + e^{\tilde{m}_{ij} - m_i^{\text{new}}} \tilde{\ell}_{ij} \in \mathbb{R}^{B_r}$.

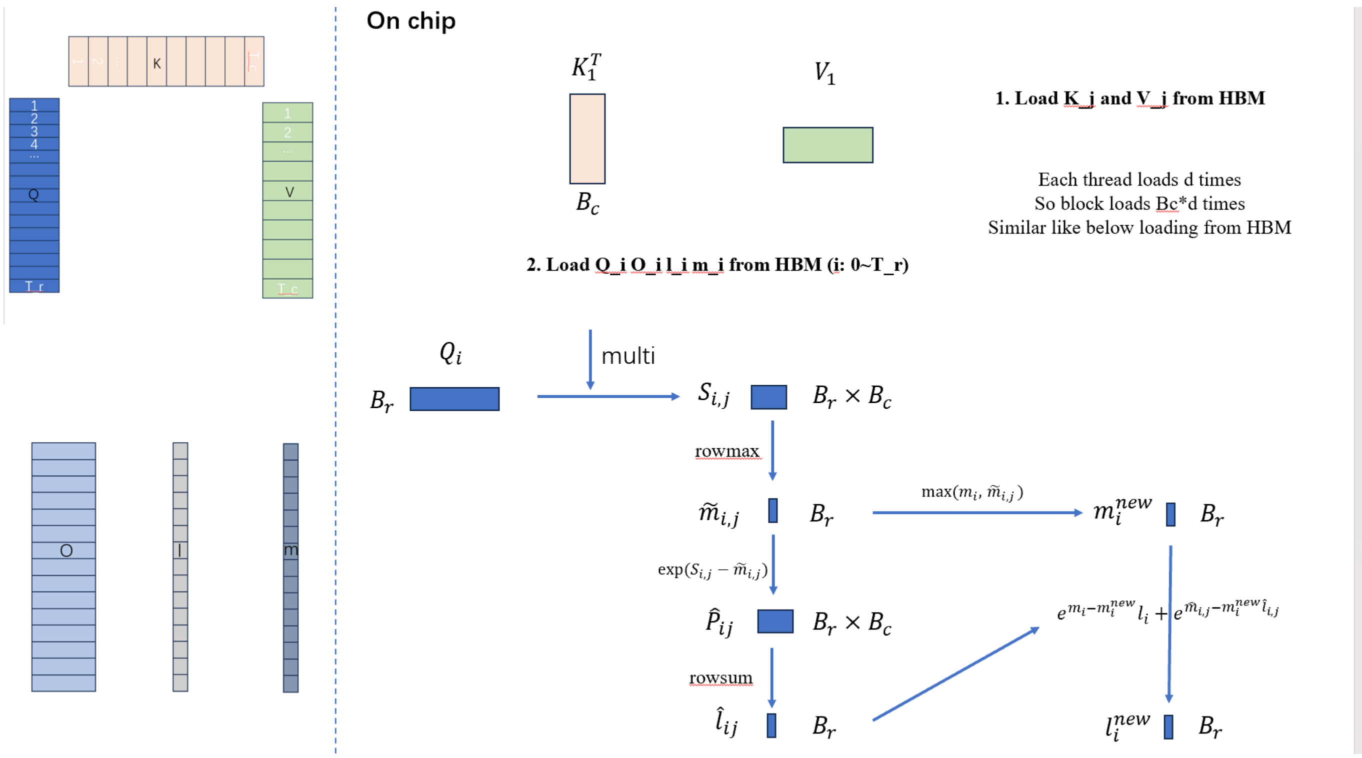
    Write $\mathbf{O}_i \leftarrow \mathrm{diag}(\ell_i^{\text{new}})^{-1} (\mathrm{diag}(\ell_i) e^{m_i - m_i^{\text{new}}} \mathbf{O}_i + e^{\tilde{m}_{ij} - m_i^{\text{new}}} \tilde{\mathbf{P}}_{ij} \mathbf{V}_j)$ to HBM.

    Write $\ell_i \leftarrow \ell_i^{\text{new}}$, $m_i \leftarrow m_i^{\text{new}}$ to HBM.

  end for

end for

Return $\mathbf{O}$.



对于Algorithm中的Wirte to O_i，diag表示对角矩阵，例如以下：

```
1 0 0
0 2 0
0 0 3
```

它与一个`[3,3]`的矩阵相乘，相当于将另一个矩阵的行依次与`[1 2 3]`相乘。

对角矩阵的逆与另一个矩阵相乘，表示除。

Flash Attention V2

我觉得V2最重要的提升点是参考Phil Tillet的Tirton版本，更改了Tiling循环的顺序。V1版本循环顺序是首先KV作为outer迭代，Q作为inner迭代，在outer loop扫描时做softmax的规约，这导致outer loop必须在一个thread block里才能共享softmax计算中间结果的信息，从而只能对batch * head维度上以thread block为粒度并行切分。V2中调换了循环顺序，使outer loop每个迭代计算没有依赖，可以发送给不同的thread block并行执行，也就是可以对batch* head* sequence三层循环以thread block为粒度并行切分，从而显著增加GPU的吞吐。反向遵循同样的原理，不要把inner loop放在softmax规约的维度，因此正向反向的循环顺序是不同的。

我的理解：在计算Self-Attention的时候，V1使用的方法是首先将K V当作outer迭代，而Q当作inner迭代。但是显然Q是独立的，可以被并行化的（例如，一个block解决一个Q中的一个小块，这样的话每个block之间是互不关联的，显然可以并行）。所以Flash Attention 2 中将Q当作了outer迭代，在Q的N维度上可以做到并行化。

> 考虑一下，为什么K/V上的seq length方向不给到Thread Block做并行？答案是，如果可以在Q seq length上拆block并行了，那么一般来说GPU occupancy已经够了，再多拆K/V的话也不是不行，但是会额外带来通信开销；Flash Decoding其实就是在inference阶段，面对Q的seq length=1的情况，在K/V方向做了block并行，来提高GPU Utilization从而加速的。

现在确定了fwd kernel要在B, H, Q_N_CTX(就是从Q的N维度切分出来的，增加并行性)三个维度Launch Kernel了，有两种选择：grid_dim = [Q_N_CTX, B, H], grid_dim = [B, H, Q_N_CTX]，哪种更好？

答案是第一种更好，因为Q_N_CTX放ThreadBlock.X维度的话，对于同一个B和H的Q_N_CTX是连续调度的，也就是说算第一行用到的K/V Tile大概率还在L2上，第二行计算可以直接从L2拿到，这样可以显著提高L2 cache hit rate。这个优化在大seq_length的时候优化很明显。原理就是Thread Block的调度是round-robin的，对于[Q_N_CTX, B, H] 就是先遍历Q_N_CTX，然后遍历B，H；先遍历Q_N_CTX意味着同时会有很多个Block在计算同一个[B,H]的不同Q_N_CTX对应的Tile，那么对于同一列方向的QK输出Tile来说，K和V的Tile就可以在L2上复用； 简单来说就是Q_N_CTX维度局部性更好，BH维度是天然并行的维度，对于GEMM来说没啥局部性。

除了Sequence length维度的并行之外，Flash Attention V2的改动第二点在于算法的改变，fwd和bwd都简化了非matmul计算，这里也是对rescale重新优化了一下。这个优化其实不是critical path，所以提升并不大。fwd做2个GEMM，bwd做5个GEMM，整个Kernel fwd & bwd都是memory bound，此时应该优化的是GEMM相关的memory dependency，做multi-stages，更灵活的异步调度（比如warp specialization），最后可能还需要考虑优化data reuse，优化L2 cache等等，当然一切都需要基于Nsight Compute结果分析，不然都是幻觉。

Algorithm 1 FlashAttention-2 forward pass

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

Divide $\mathbf{Q}$ into $T_r = \left\lceil \frac{N}{B_r} \right\rceil$ blocks $\mathbf{Q}_1, \dots, \mathbf{Q}_{T_r}$ of size $B_r \times d$ each, and divide $\mathbf{K}, \mathbf{V}$ in to $T_c = \left\lceil \frac{N}{B_c} \right\rceil$ blocks $\mathbf{K}_1, \dots, \mathbf{K}_{T_c}$ and $\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_{T_c}$, of size $B_c \times d$ each.
Divide the output $\mathbf{O} \in \mathbb{R}^{N\times d}$ into T_r blocks $\mathbf{O}_i, \dots, \mathbf{O}_{T_r}$ of size $B_r \times d$ each, and divide the logsumexp L into T_r blocks $L_i, \dots, L_{T_r}$ of size B_r each.
for $1 \le i \le T_r$ **do**
  Load $\mathbf{Q}_i$ from HBM to on-chip SRAM.
  On chip, initialize $\mathbf{O}_i^{(0)} = (0)_{B_r\times d} \in \mathbb{R}^{B_r\times d}, \ell_i^{(0)} = (0)_{B_r} \in \mathbb{R}^{B_r}, m_i^{(0)} = (-\infty)_{B_r} \in \mathbb{R}^{B_r}$.
  for $1 \le j \le T_c$ **do**
    Load $\mathbf{K}_j, \mathbf{V}_j$ from HBM to on-chip SRAM.
    On chip, compute $\mathbf{S}_i^{(j)} = \mathbf{Q}_i \mathbf{K}_j^T \in \mathbb{R}^{B_r\times B_c}$.
    On chip, compute $m_i^{(j)} = \max(m_i^{(j-1)}, \mathrm{rowmax}(\mathbf{S}_i^{(j)})) \in \mathbb{R}^{B_r}$, $\tilde{\mathbf{P}}_i^{(j)} = \exp(\mathbf{S}_i^{(j)} - m_i^{(j)}) \in \mathbb{R}^{B_r\times B_c}$ (pointwise), $\ell_i^{(j)} = e^{m_i^{j-1} - m_i^{(j)}} \ell_i^{(j-1)} + \mathrm{rowsum}(\tilde{\mathbf{P}}_i^{(j)}) \in \mathbb{R}^{B_r}$.
    On chip, compute $\boxed{\mathbf{O}_i^{(j)} = \mathrm{diag}(e^{m_i^{(j-1)} - m_i^{(j)}}) \mathbf{O}_i^{(j-1)} + \tilde{\mathbf{P}}_i^{(j)} \mathbf{V}_j.}$
  end for
  On chip, compute $\mathbf{O}_i = \mathrm{diag}(\ell_i^{(T_c)})^{-1} \mathbf{O}_i^{(T_c)}$.
  On chip, compute $L_i = m_i^{(T_c)} + \log(\ell_i^{(T_c)})$.
  Write $\mathbf{O}_i$ to HBM as the i-th block of $\mathbf{O}$.
  Write L_i to HBM as the i-th block of L.
end for
Return the output $\mathbf{O}$ and the logsumexp L.

reference

1. source code
2. From Online Softmax to FlashAttention
3. FlashAttention2详解
4. FlashAttention核心逻辑以及V1 V2差异总结(great!!!)
5. 大模型训练加速之FlashAttention系列：爆款工作背后的产品观