Computerphysik Programmiertutorial 5b Prof. Dr. Matteo Rizzi und Dr. Markus Schmitt - Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln Github: https://github.com/markusschmitt/compphys2021 Inhalt dieses Notebooks: Timing (BenchmarkTools), Komplexität Timing Bei wissenschaftlichen Programmen kommt es oft auf die Effizienz an. Um die zu optimieren ist es wichtig die Resourcen bestimmen zu können, die zum Ausführen des Programms benötigt werden. Die wichtigen Resourcen sind Speicherplatz und Laufzeit. Wir werden uns hier auf Zeitmessungen beschränken. In []: function f(x) for j in eachindex(x) x[j] += 3.7end return nothing end Das Makro @time wird einem Funktionsaufruf vorangestellt um eine Ausgabe der verwendeten Resourcen zu erhalten: In []: @time f(rand(10000)) Achtung: Der erste Funktionsaufruf dauert länger, weil die Funktion dann just-in-time-kompiliert (jit-kompiliert) wird. In []: @time f(rand(10000)) @elapsed gibt nur die Laufzeit (in Sekunden) zurück. In []: @elapsed f(rand(10000)) Mit dem Paket BenchmarkTools können genauere Messungen vorgenommen werden In [6]: using BenchmarkTools In []: @btime f(rand(10000)) In []: @belapsed f(rand(10000)) Komplexität In [2]: using Plots using LinearAlgebra Zur Anschauung definieren wir eine eigene Funktion für Matrixmultiplikation: In [3]: function my_matmul(A,B) C = Array{Float64}(undef,size(A)[1], size(B)[2]) for j in 1:size(C)[2] for i in 1:size(C)[1] C[i,j] = 0.0for k in 1:size(A)[2] C[i,j] += A[i,k] * B[k,j]end end end return C end Out[3]: my_matmul (generic function with 1 method) In [7]: A = rand(100, 100)B = rand(100, 100)isapprox(my_matmul(A,B), A*B) Out[7]: true Benchmark unserer Funktion: In [11]: @btime my_matmul(A,B); 622.583 µs (2 allocations: 78.17 KiB) Benchmark der vorimplementierten Matrixmultiplikation: In [10]: @btime A*B; 32.291 µs (2 allocations: 78.17 KiB) Schauen wir uns das etwas systematischer für verschiedene Matrixgrößen an: In [12]: BLAS.set_num_threads(1); $ns=2 \cdot (collect(5:10))$ times1=Float64[] times2=Float64[] for n in ns # zwei Matrizen erstellen A=rand(n,n) B=rand(n,n) # Zeit für Multiplikation messen t1 = @elapsed A*B t2 = @elapsed my_matmul(A,B) # Ausgabe println("n=\$n:") println(" Zeit für A*B: \$(t1)s") println(" Zeit für my_matmul(A,B): \$(t2)s") # Messergebnis an Arrays anhängen push!(times1, t1) push!(times2, t2) end n=32:Zeit für A*B: 0.000459458s Zeit für my_matmul(A,B): 1.775e-5s Zeit für A*B: 1.7875e-5s Zeit für my_matmul(A,B): 0.00014725s n=128:Zeit für A*B: 0.000104875s Zeit für my_matmul(A,B): 0.001595708s n=256:Zeit für A*B: 0.000749375s Zeit für my_matmul(A,B): 0.01441775s n=512:Zeit für A*B: 0.006995792s Zeit für my_matmul(A,B): 0.1519315s n=1024: Zeit für A*B: 0.045516958s Zeit für my_matmul(A,B): 1.744763416s In [13]: plot(ns,times1, marker=:0, label="*") plot!(ns,times2, marker=:0, label="my matmul") xlabel!("Matrizengröße n") ylabel!("Rechenzeit [s]") Out[13]: *
my_matmul 1.5 Rechenz 0.5 0.0 600 800 200 400 1000 Matrizengröße n Die Komplexität eines Algorithmus gibt an wie die benötigten Rechenresourcen (Rechenzeit oder Speicherplatz) wachsen, wenn man das zu lösende Problem vergrößert. In unserem Beispiel ist die entspricht die Größe des Problems der Größe unserer n imes n-Matrizen. Um eine Gesetzmäßigkeit zu finden, schauen wir noch einmal genauer hin, indem wir doppelt-logarithmisch plotten: In [15]: plot(ns,times1, marker=:0, xaxis=:log, yaxis=:log, label="*") plot!(ns,times2, marker=:0, xaxis=:log, yaxis=:log, label="my_matmul") xlabel!("Matrizengröße n") ylabel!("Rechenzeit [s]") Out[15]: 10⁰ my_matmul 10^{-1} Rechenzeit [s] 10^{-4} 10³ 10² Matrizengröße n Die Komplexität von Algorithmen wird in O-Notation angegeben. Die Multiplikation von zwei $n \times n$ Matrizen wie wir sie hier implementiert haben ist z.B. $O(n^3)$. Das bedeutet, dass die Rechenzeit bei großen Matrizen kubisch wächst. Der Vorfaktor dieses Wachstumsgesetzes kann jedoch von den Details der Implementierung abhängen. Eine Zusammenfassung der Komplexität bekannter Algorithmen steht auf Wikipedia. In [16]: ns=2 .^ (collect(5:10)) times1=Float64[] times2=Float64[] for n in ns # Matrix und Vektor erstellen A=rand(n,n) B=rand(n,1) # Diesmal Matrix-Vektor Produkt # Zeit für Multiplikation messen t1 = @elapsed A*B t2 = @elapsed my matmul(A,B) # Ausgabe println("n=\$n:") println(" Zeit für A*B: \$t1") println(" Zeit für my matmul(A,B): \$t2") # Messergebnis an Arrays anhängen push!(times1, t1) push!(times2, t2) end n=32:Zeit für A*B: 9.708e-6 Zeit für my matmul(A,B): 3.083e-6 n=64:Zeit für A*B: 4.959e-6 Zeit für my matmul(A,B): 4.5e-6 n=128:Zeit für A*B: 1.3e-5 Zeit für my_matmul(A,B): 2.275e-5 n=256:Zeit für A*B: 4.0459e-5 Zeit für my matmul(A,B): 0.000103291 n=512:Zeit für A*B: 0.000164125 Zeit für my matmul(A,B): 0.000497166 n=1024:Zeit für A*B: 0.000673417 Zeit für my_matmul(A,B): 0.002109584 In [27]: using LaTeXStrings plot(ns,times1, marker=:0, xaxis=:log, yaxis=:log, label="*") plot!(ns,times2, marker=:0, xaxis=:log, yaxis=:log, label="my matmul") plot!(ns, 5e-10*ns.^2, linestyle=:dash, xaxis=:log, yaxis=:log, label=L"n^2") xlabel!("Matrizengröße n") ylabel!("Rechenzeit") Out[27]: my_matmul 10⁻³ 10⁻⁴ Rechenzeit 10⁻⁶

10²

Matrizengröße n

10³