



人工智能系统 System for AI

矩阵运算与计算机体系结构

Computer architecture for Matrix computation

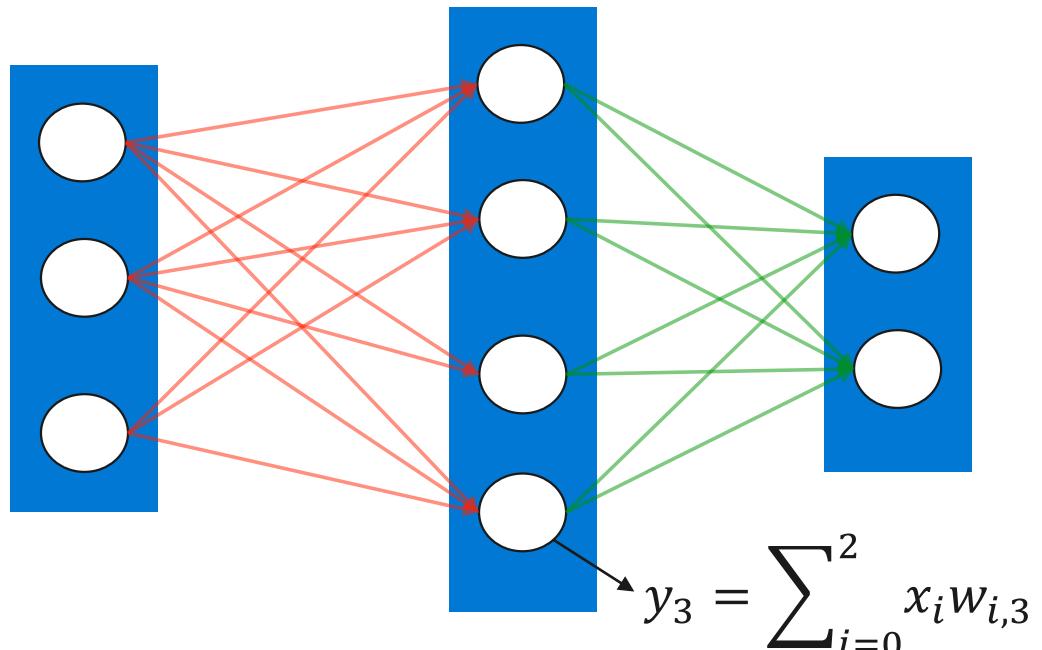
主要内容



深度学习常见模型的结构

- 全连接层
 - 前向全连接层
 - 多层感知模型 (MLP)
- 卷积层
 - 常用于卷积神经网络中 (CNN)
 - 常用于图像任务中
- 循环网络层
 - 常用于循环神经网络中 (RNN)
 - 常用在有时间序的顺序数据上 (如, 语音处理, 自然语言处理等)
- Attention层
 - 通常实现为矩阵相乘
 - Transformer网络中的主要结构

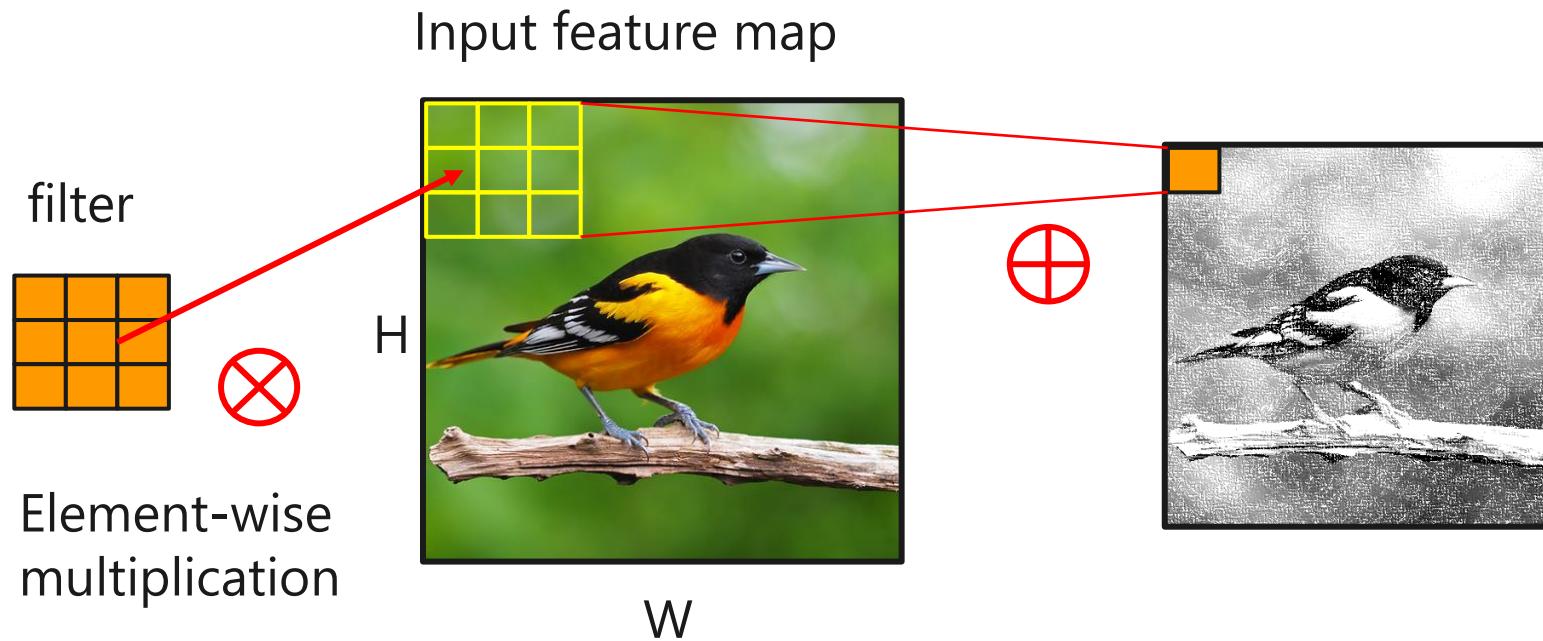
全连接层



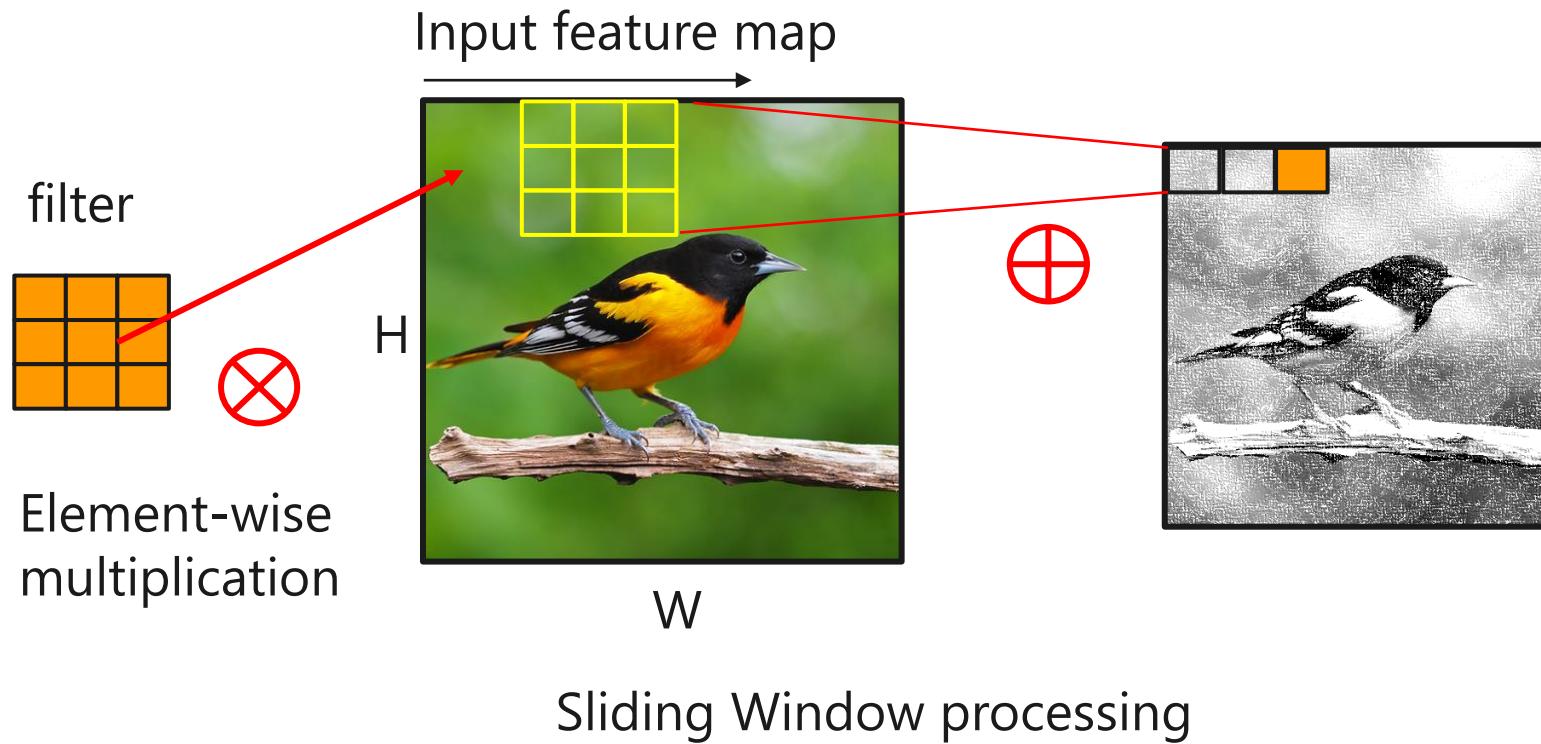
映射到矩阵运算：

$$X = \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad W = \begin{bmatrix} w_{0,0} & \cdots & w_{0,2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{2,0} & \cdots & w_{2,3} \end{bmatrix} \quad Y = \begin{bmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_3 \end{bmatrix} \quad Y = W^T X$$

卷积层 (Convolution)



卷积层 (Convolution)



卷积层映射到矩阵运算

- 通过重组输入矩阵，卷积层计算可以被转换成矩阵乘法

$$\begin{array}{c} \text{Filter} \\ \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \end{array} * \begin{array}{c} \text{Input Fmap} \\ \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & 5 & 6 \\ \hline 7 & 8 & 9 \\ \hline \end{array} \end{array} = \begin{array}{c} \text{Output Fmap} \\ \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \end{array}$$

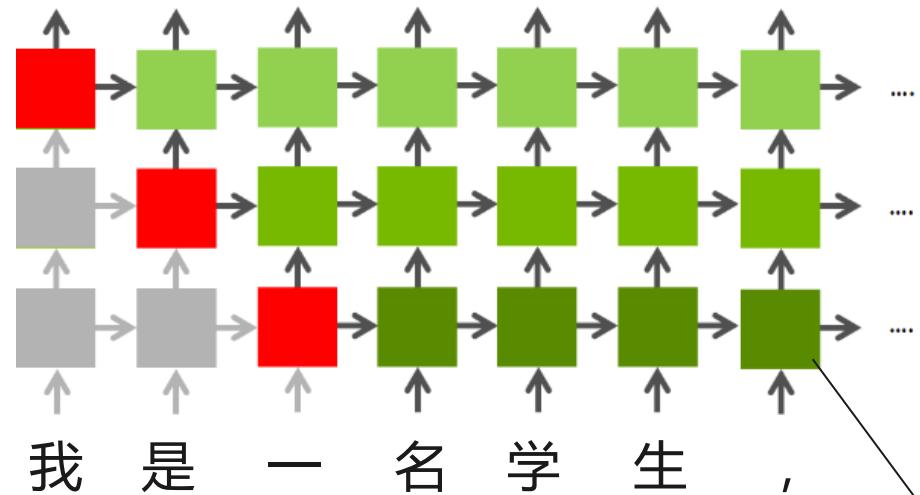
卷积层计算

$$\begin{array}{c} \text{Filter} \\ \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array} \end{array} \times \begin{array}{c} \text{Input Fmap} \\ \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 & 5 \\ \hline 2 & 3 & 5 & 6 \\ \hline 4 & 5 & 7 & 8 \\ \hline 5 & 6 & 8 & 9 \\ \hline \end{array} \end{array} = \begin{array}{c} \text{Output Fmap} \\ \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array} \end{array}$$

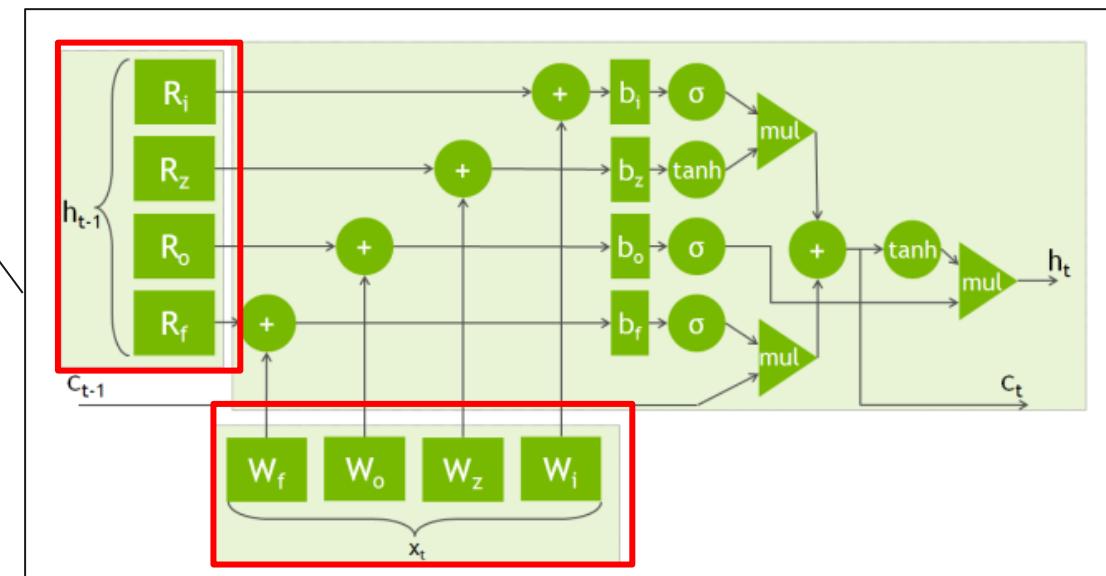
矩阵乘法计算

循环网络层

- LSTM循环神经网络中的矩阵运算



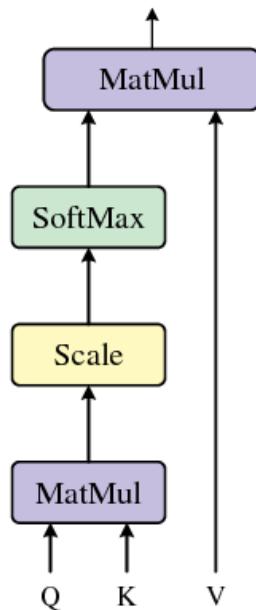
第一个cell都包括8个矩阵乘法和若干element_wise计算



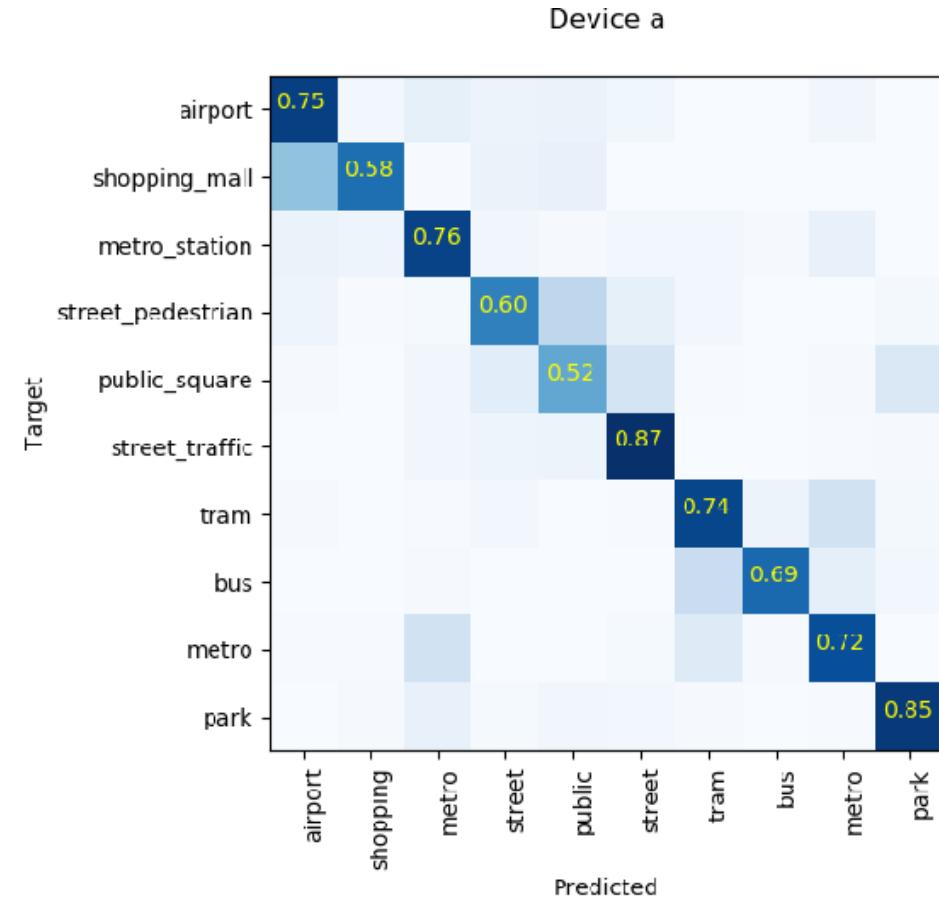
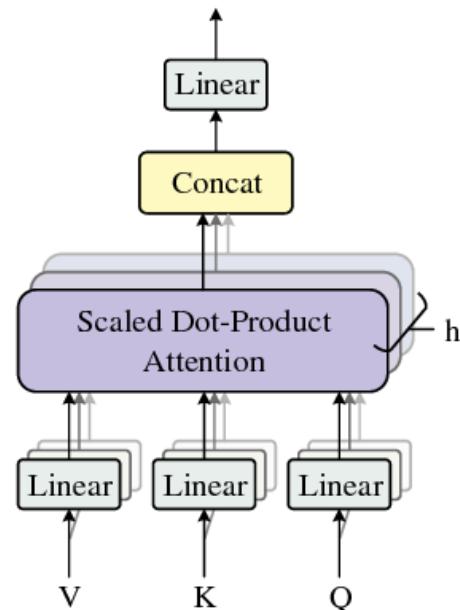
Attention网络层

- 当前主流Attention机制中的核心计算均为矩阵乘法
 - Transformer
 - BERT

Scaled Dot-Product Attention



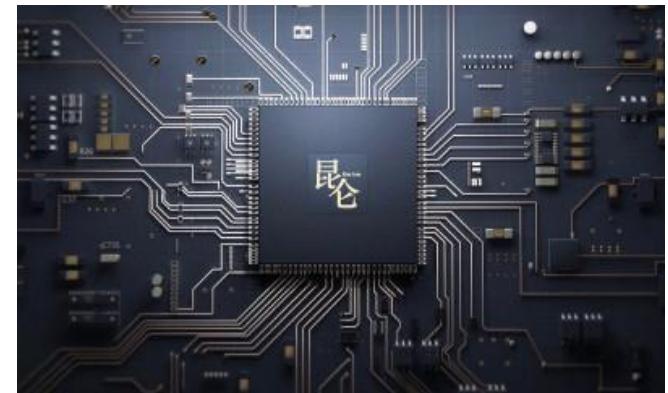
Multi-Head Attention



小结与思考

- 当前神经网络中使用的主流结构
 - 全连接层、卷积层、循环网络层、Attention结构
- 主流网络结构的计算均可表达成矩阵运算
 - 核心计算都可表达或转化成“**矩阵乘法**”
- 为什么神经网络结构要表示成矩阵计算呢
 - 矩阵计算表达出较好的计算并行性
 - 有成熟的矩阵计算加速硬件和软件库
 - GPU、CPU
 - MKL, CuBLAS
 - 鸡生蛋的问题

计算机体系结构与矩阵运算



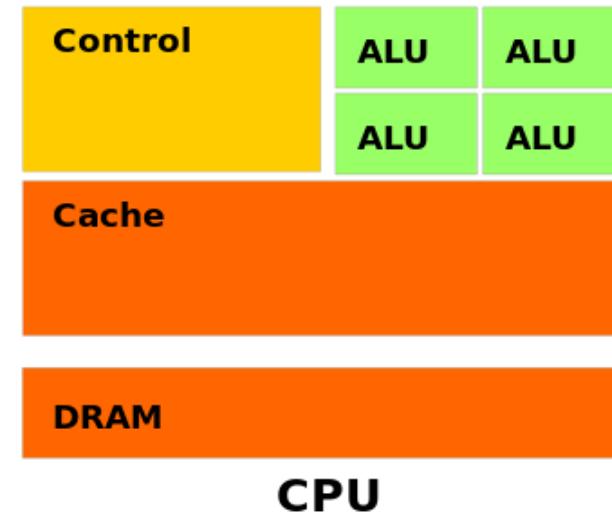
CPU体系结构

- 核心由复杂的控制单元和少量计算单元组成

- 计算密度较低 – ALU较少
- 控制逻辑复杂 – 较大的控制单元

- 主要面向顺序指令执行

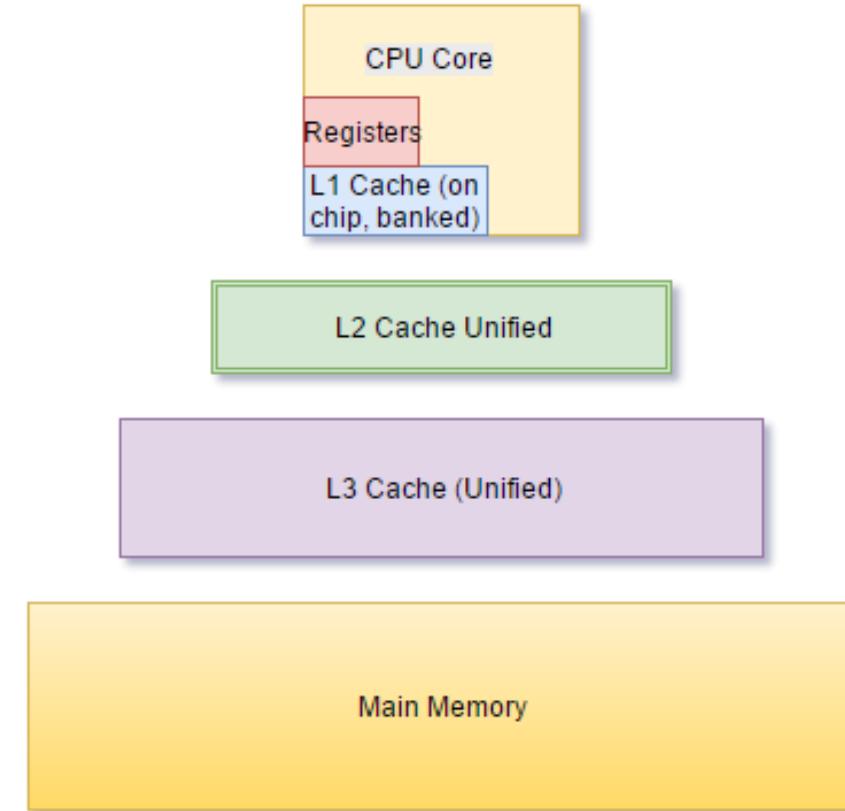
- 成熟的调度技术：如分支预测、推测执行、乱序执行等
- 擅长处理单线程、控制密集型的计算任务
- 缺点：低计算吞吐



CPU内存架构

- 采用较深的内存架构
 - 多层cache来隐藏访存延时
 - Register, L1, L2, L3, Main Memory
 - 调度上采用访存预取和各种较为成熟的预取预测机制

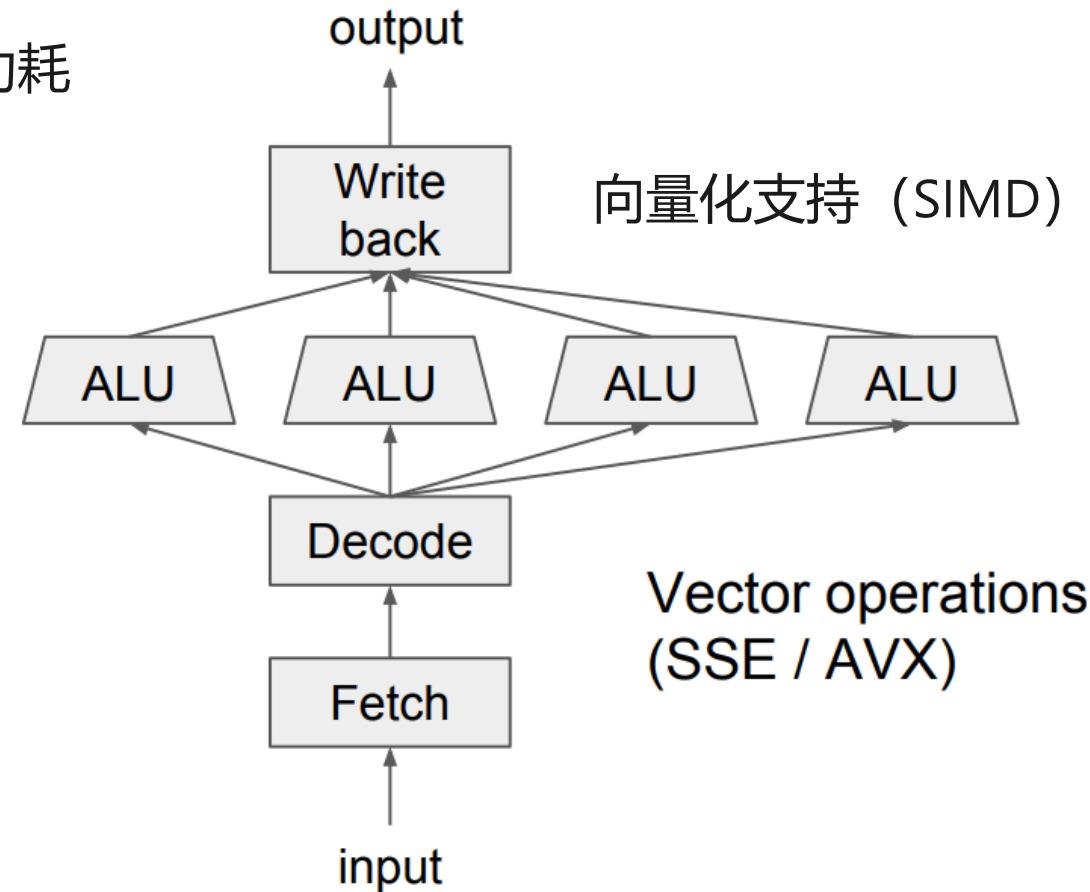
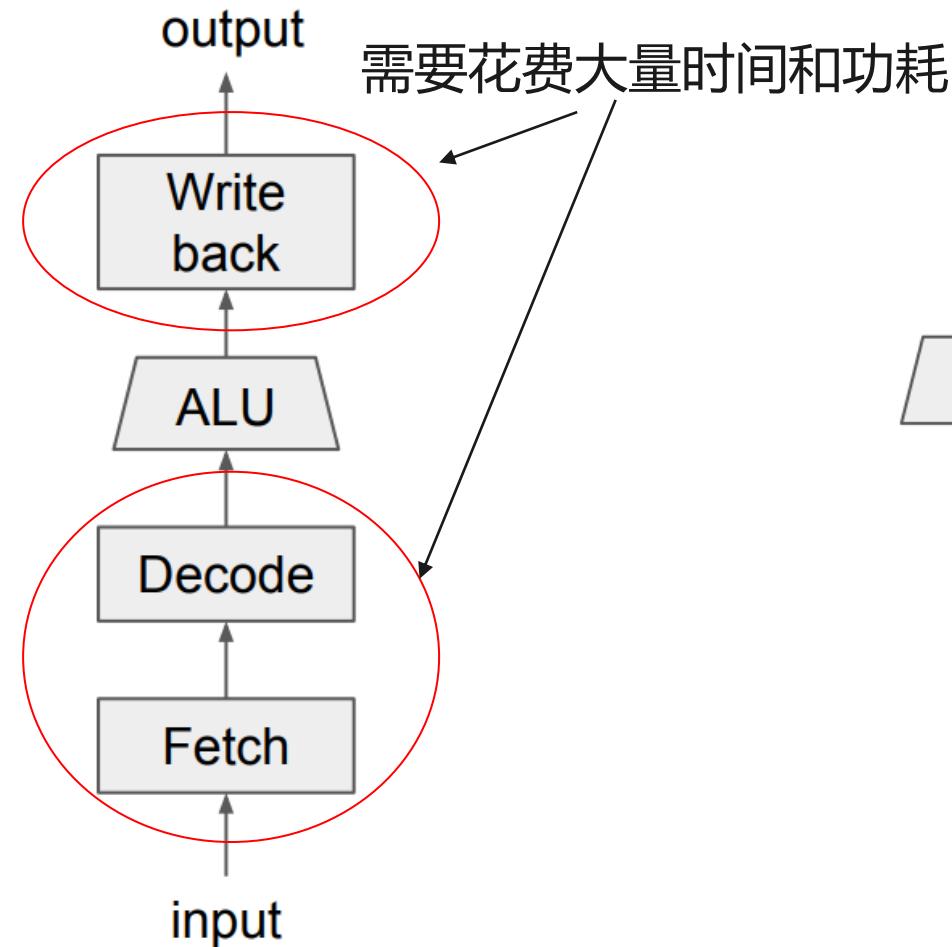
	Quantity	Speed	Cost
Registers	512 bytes	1	?
L1 cache	32 KB	2	?
L2 cache	512 KB	10	\$200/MB
Main memory	32 MB	100	\$50/MB



CPU性能增长瓶颈

- 由于近年来CPU的发展达到了一些物理极限和由于功耗的限制，CPU的性能已经无法显著提升
- 新的性能提升方向：
 - **乱序执行互不依赖的指令：**当代大多CPU可以有限支持
 - **增加更多的计算核心：**依赖操作系统将应用程序高度到多核上；或者用户的程序中显示使用多线程进行计算；
 - **给单核增加向量化功能：**允许CPU在向量数据上执行相同的指令，需要用户程序中显示使用向量化批量来实现

CPU指令执行过程



SIMD (Single Instruction, Multiple Data)

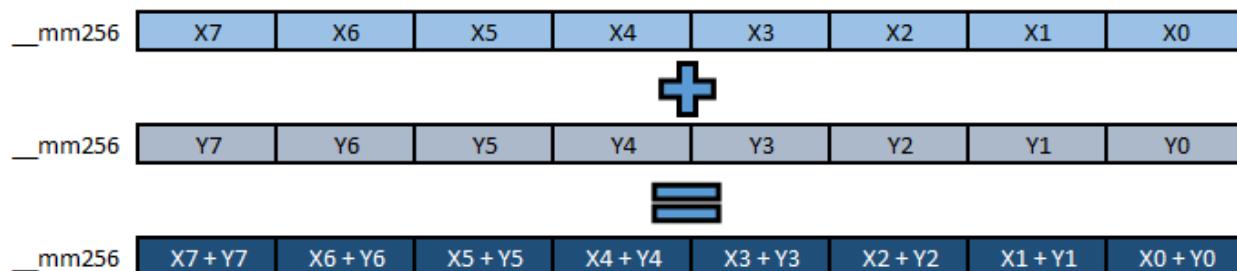
SSE Data Types (16 XMM Registers)

__m128	Float	Float	Float	Float	4x 32-bit float
__m128d	Double		Double		2x 64-bit double
__m128i	B	B	B	B	16x 8-bit byte
__m128i	short	short	short	short	8x 16-bit short
__m128i	int		int	int	4x 32bit integer
__m128i	long long		long long		2x 64bit long
__m128i			doublequadword		1x 128-bit quad

AVX Data Types (16 YMM Registers)

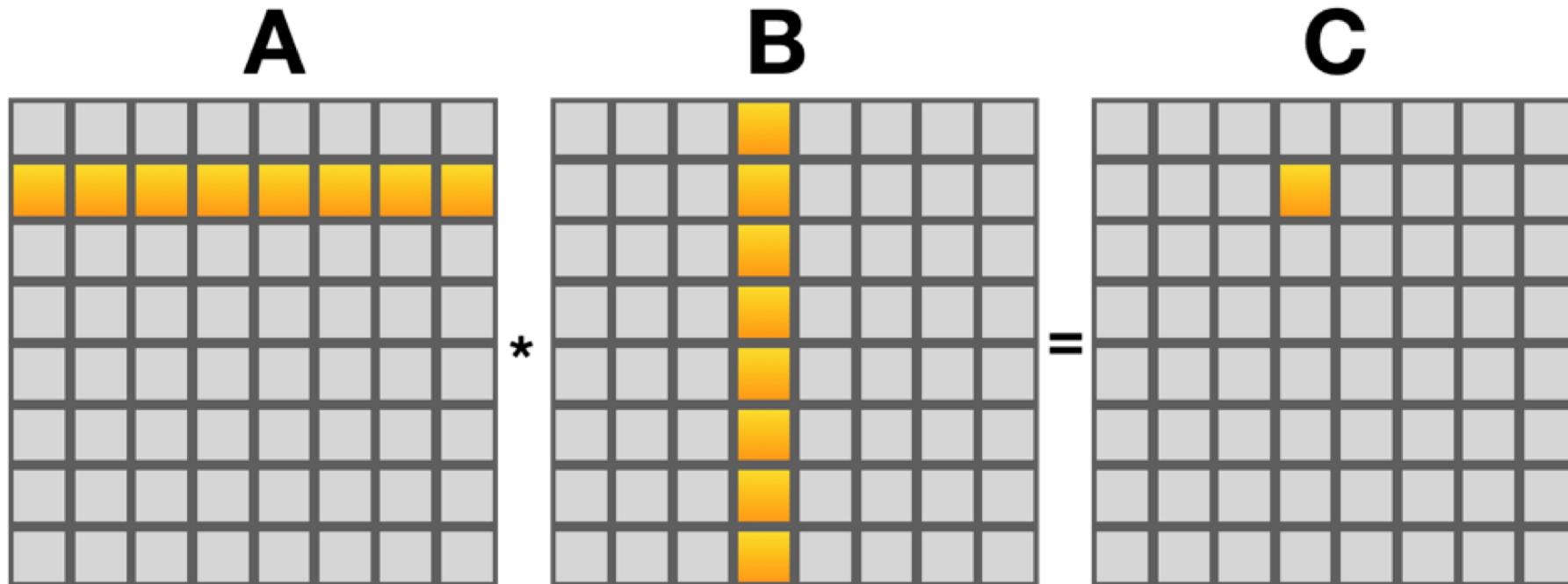
__mm256	Float	Float	Float	Float	Float	Float	Float	Float	8x 32-bit float
__mm256d	Double		Double		Double		Double		4x 64-bit double
<i>__mm256i 256-bit Integer registers. It behaves similarly to __m128i. Out of scope in AVX, useful on AVX2</i>									

AVX Operation



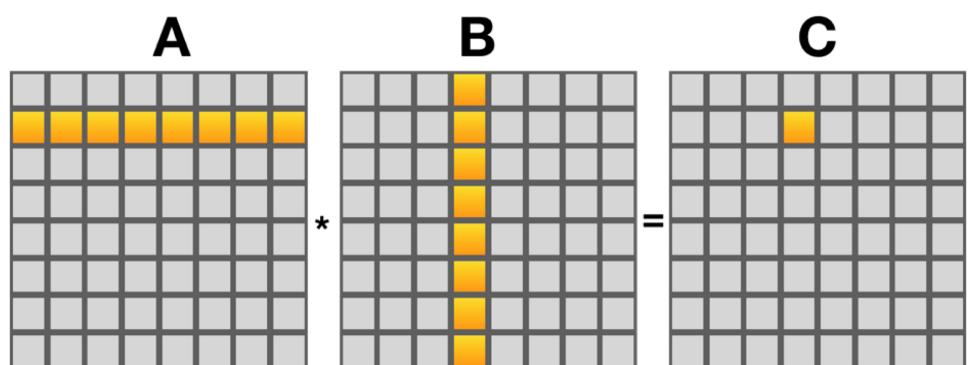
如何在CPU上高效地计算一个矩阵乘法？

- $C[m, n] = A[m, k] \times B[k, n]$
- $C[i, j] = \sum_{p=0}^k A[i, p] \times B[p, j]$



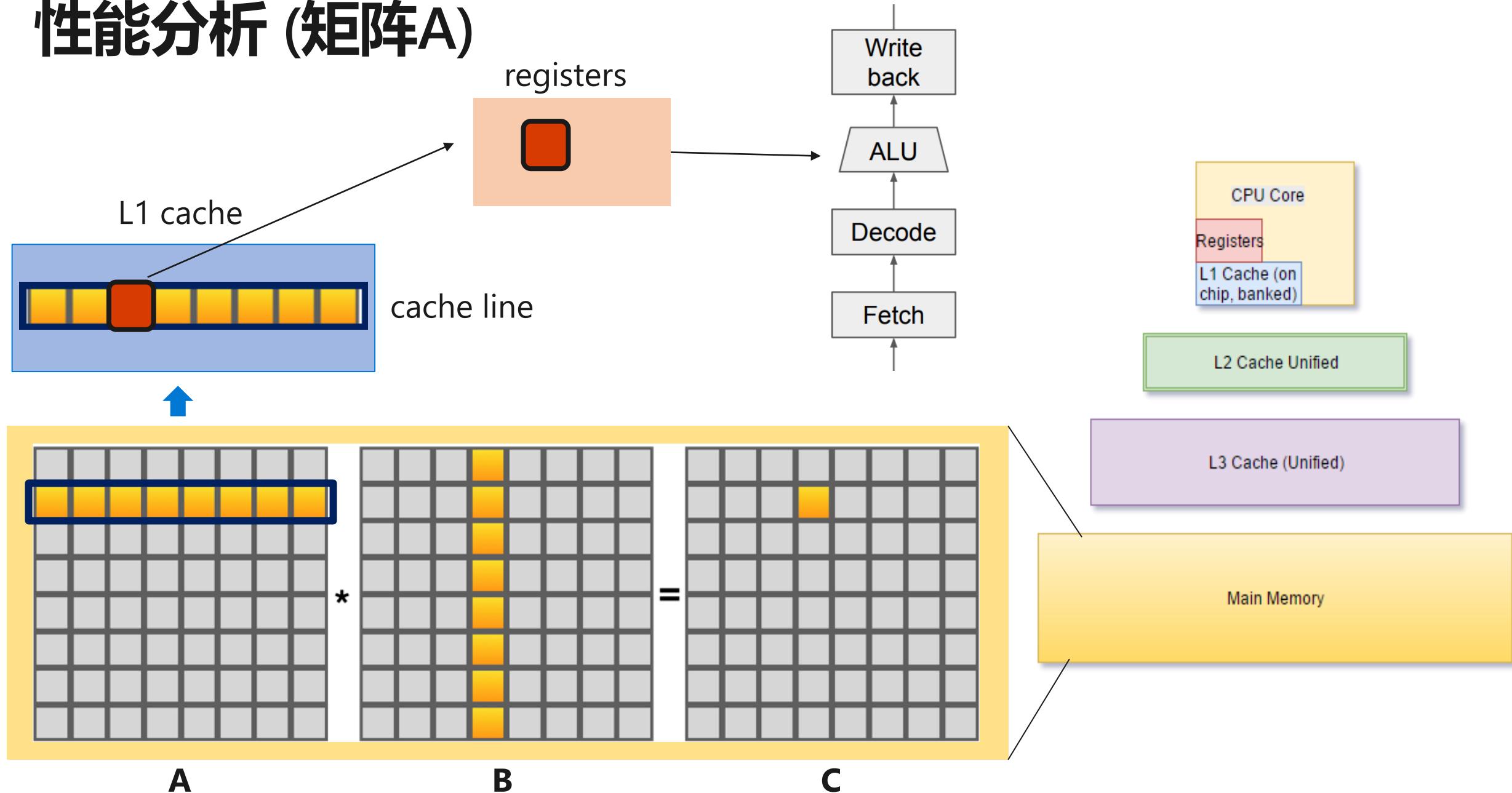
直观简洁的实现方法

- $C[i, j] = \sum_{p=0}^k A[i, p] \times B[p, j]$
- 问题：这样的实现有什么缺点吗？

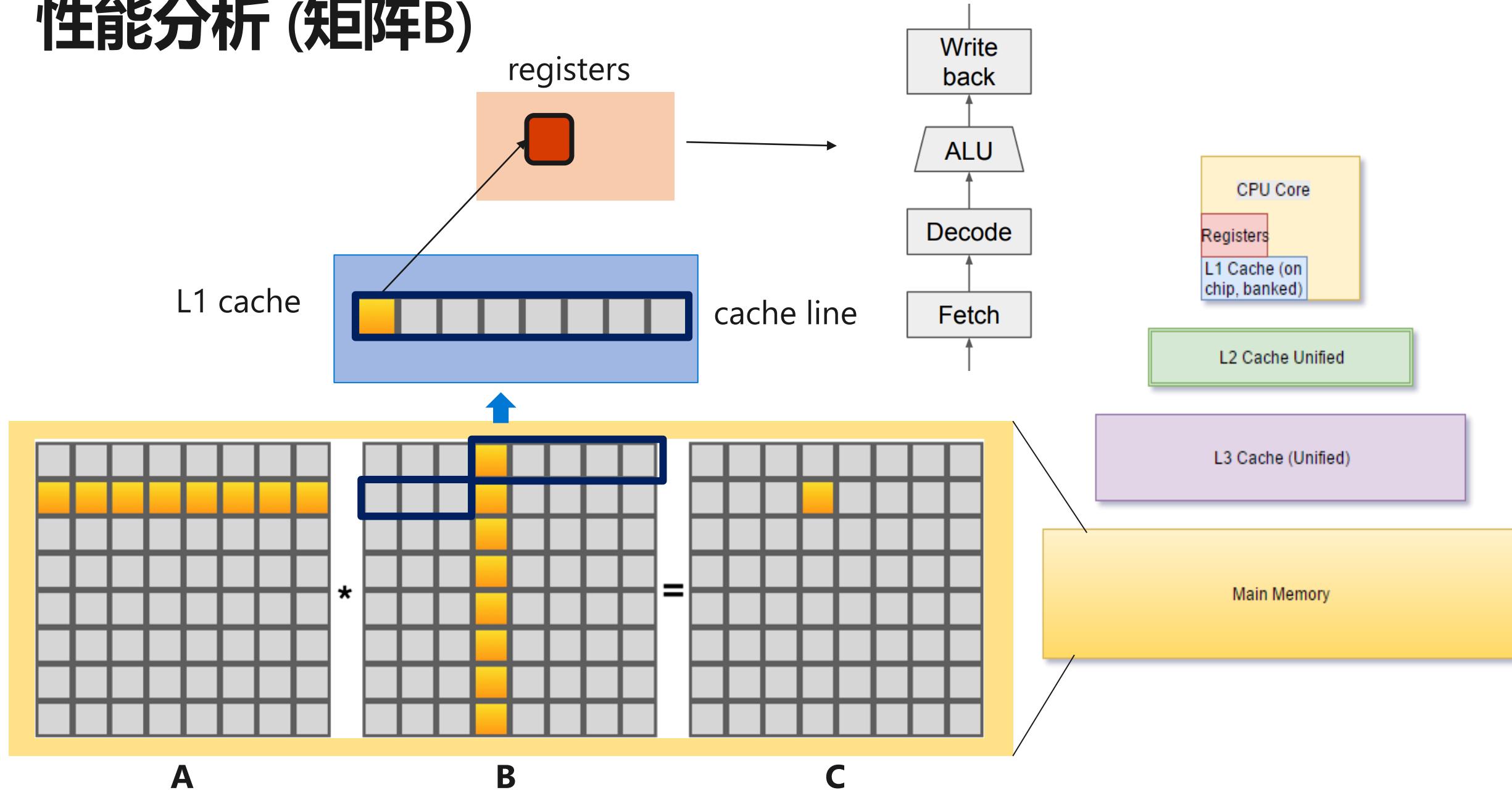


```
for (int i = 0; i < m; i++) {  
    for (int j = 0; j < n; j++) {  
        for (int p = 0; p < k; p++) {  
            C(i, j) += A(i, p) * B(p, j);  
        }  
    }  
}
```

性能分析 (矩阵A)



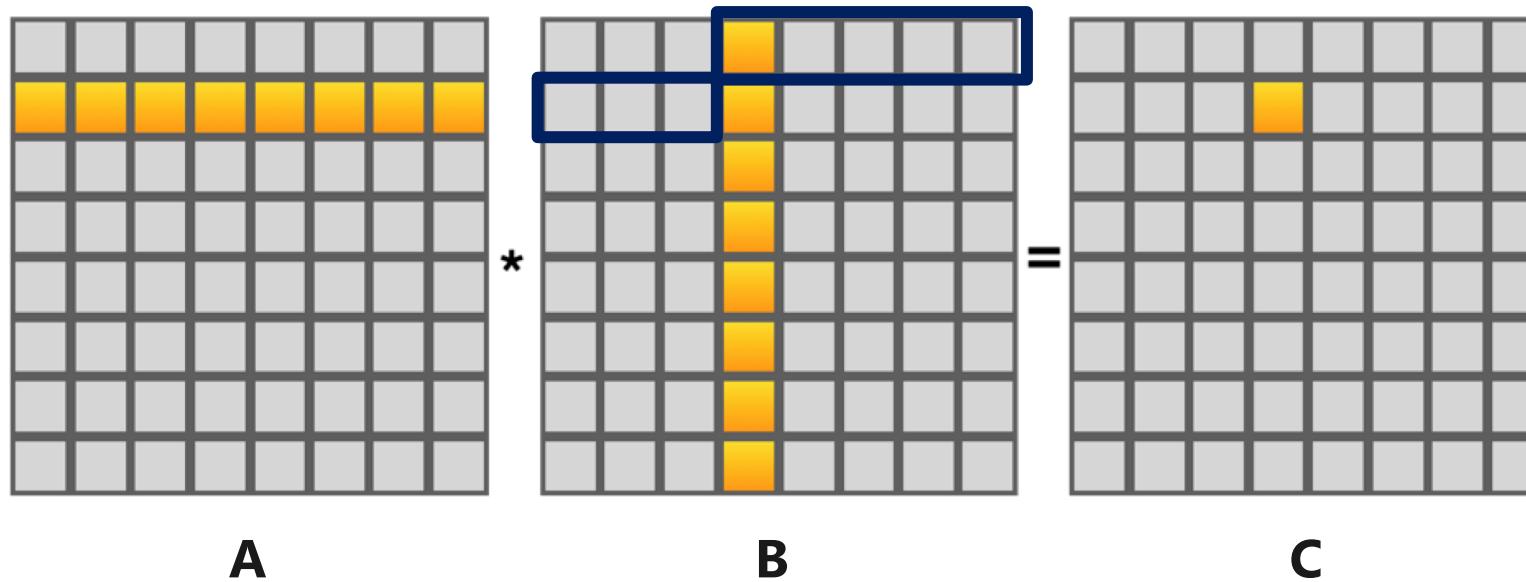
性能分析 (矩阵B)



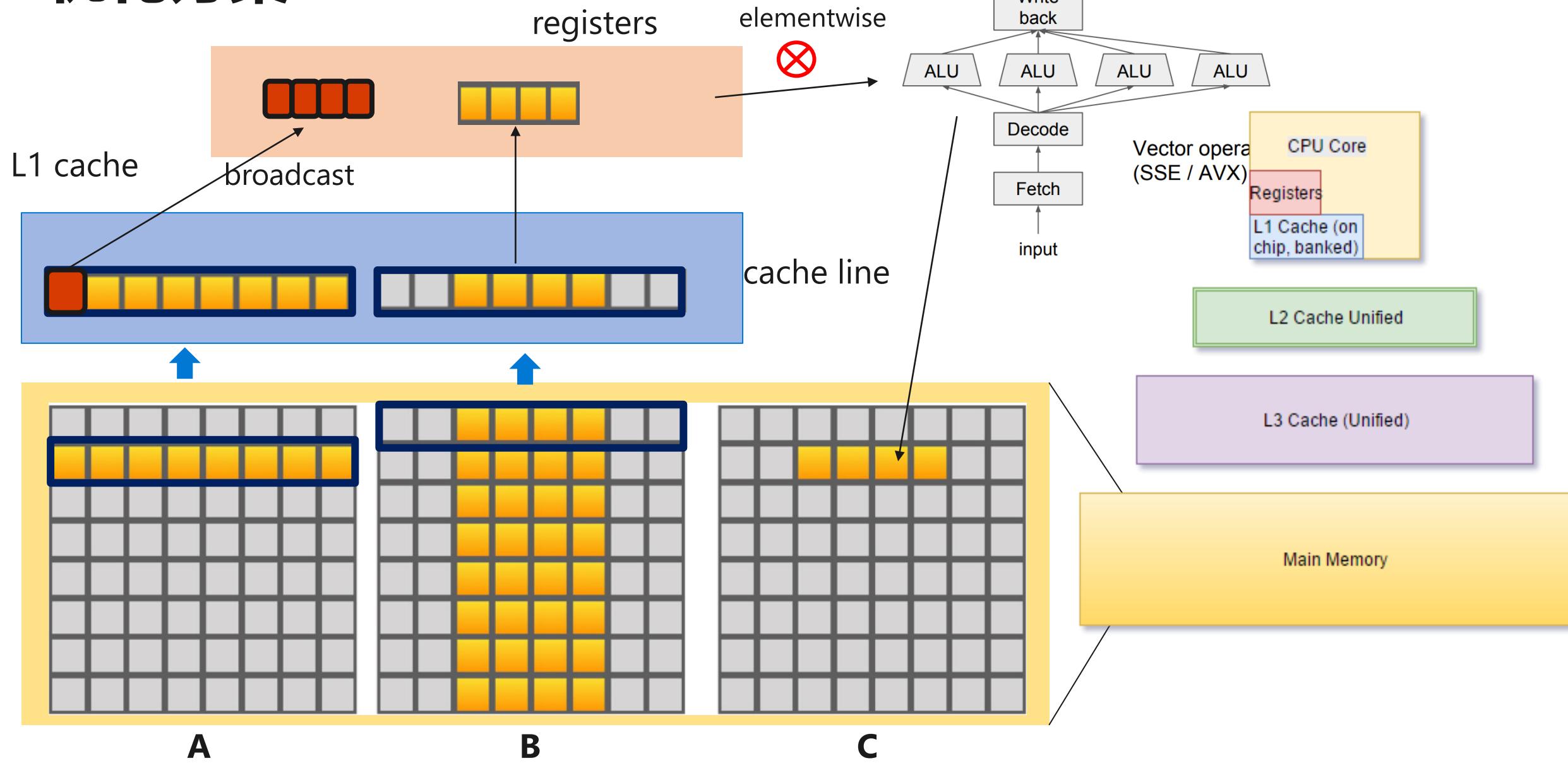
优化方案

- 针对矩阵A计算低效问题→ 使用向量化指令增加计算吞吐
- 针对矩阵B访存抵消问题→ 增加cache利用效率

问题：将B矩阵转置是否可行？

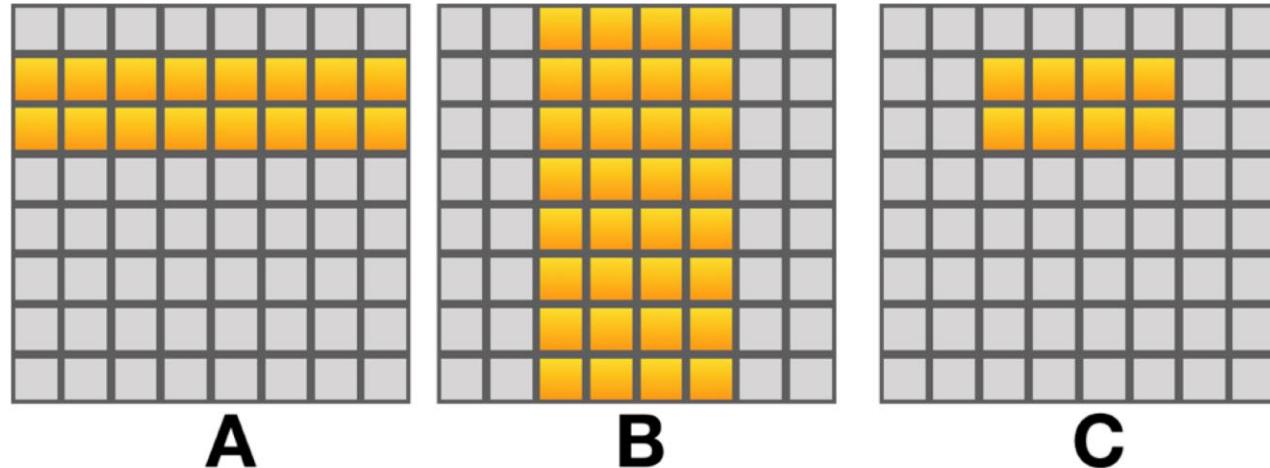


优化方案



优化方案

- 考虑到register的重用，实际中往往需要将A和B矩阵划分成合适大小的块，使得最终的访问性价比最高



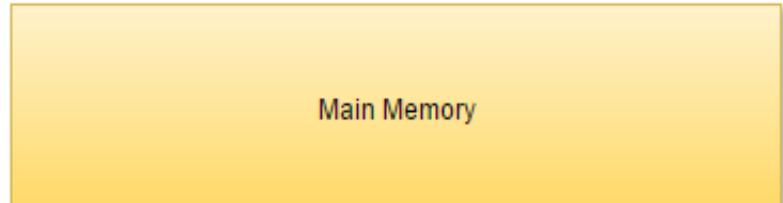
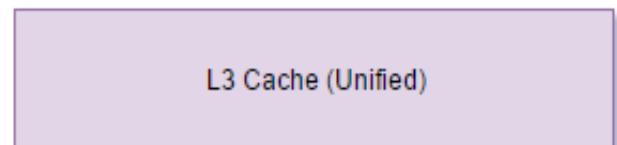
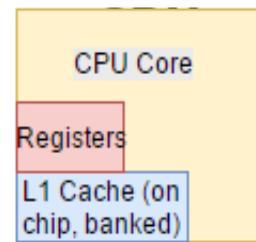
```
float8 csum[regsA][regsB] = {{0.0}};  
for (int p = 0; p < k; p++) {  
  
    // Perform the DOT product.  
    for (int bi = 0; bi < regsB; bi++) {  
        float8 bb = LoadFloat8(&B(p, bi * 8));  
        for (int ai = 0; ai < regsA; ai++) {  
            float8 aa = BroadcastFloat8(A(ai, p));  
            csum[ai][bi] += aa * bb;  
        }  
    }  
}  
  
// Accumulate the results into C.  
for (int ai = 0; ai < regsA; ai++) {  
    for (int bi = 0; bi < regsB; bi++) {  
        AdduFloat8(&C(ai, bi * 8), csum[ai][bi]);  
    }  
}
```

然而，实际的优化远比这些复杂...

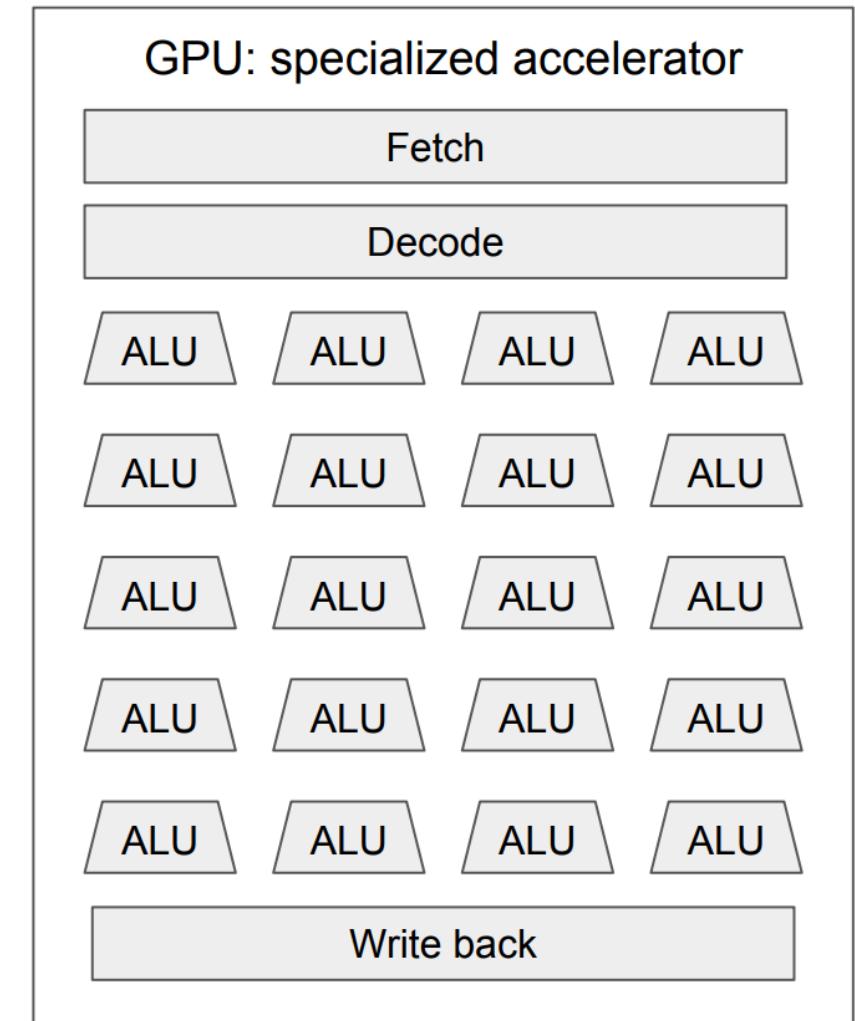
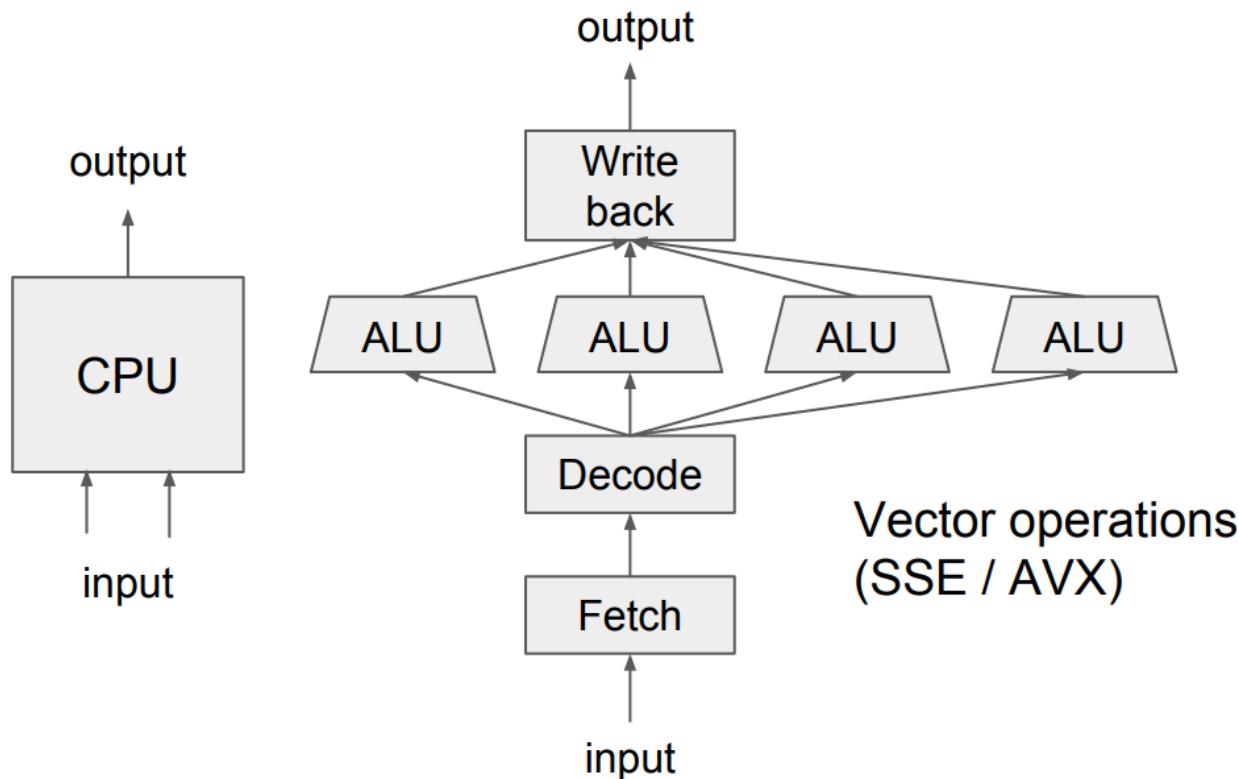
- 其它需要考虑的优化
 - 考虑多核并行计算
 - 多个FMA调度端口
 - 流水线并行
 - Tiling
 - AVX/SSE指令的使用
 - ...
- 所幸的是
 - BLAS 库
 - Intel Math Kernel Library (MKL)

小结：CPU与矩阵运算

- CPU核心的组成
- 计算单元与控制单元
- 内存架构
- CPU上高效矩阵计算

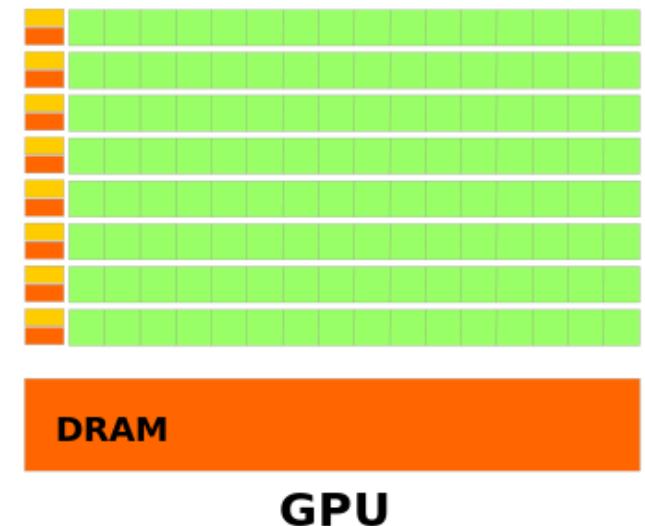
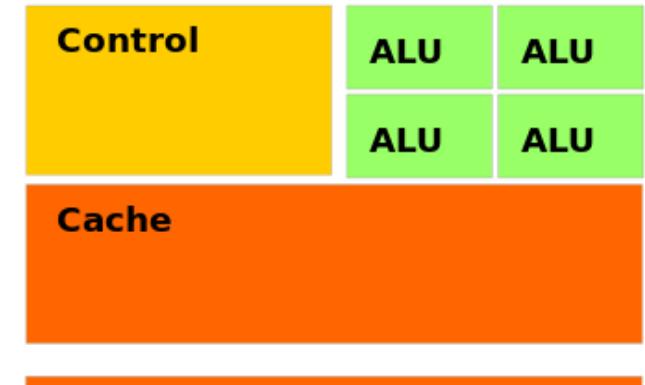


GPU体系结构



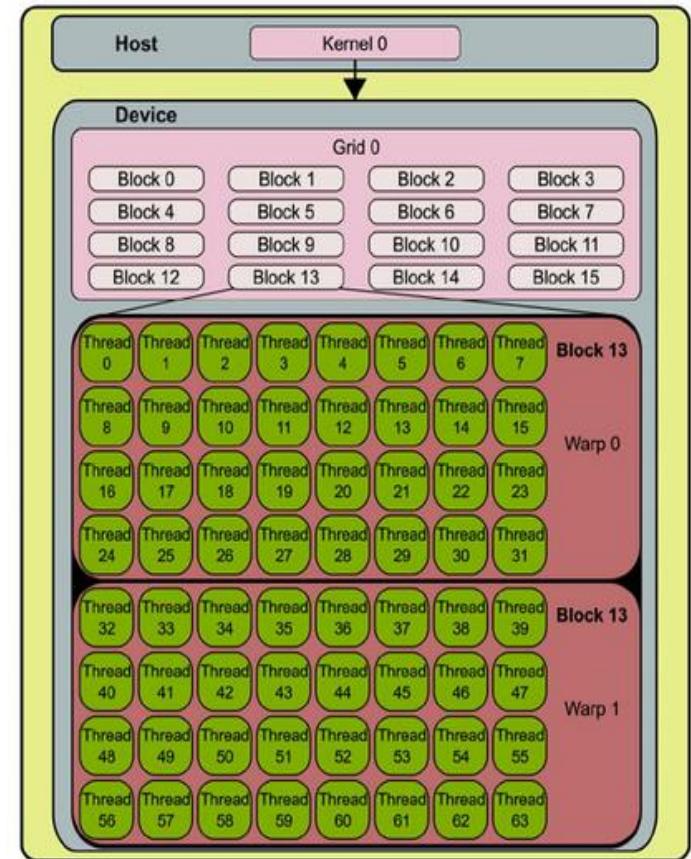
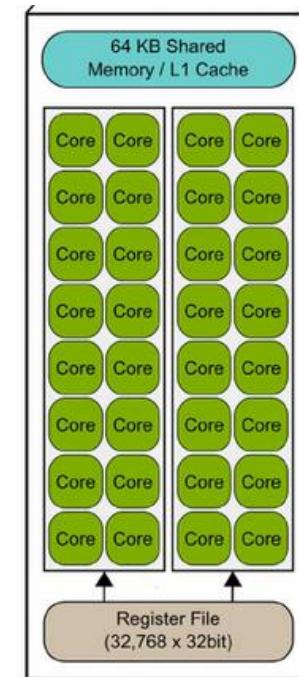
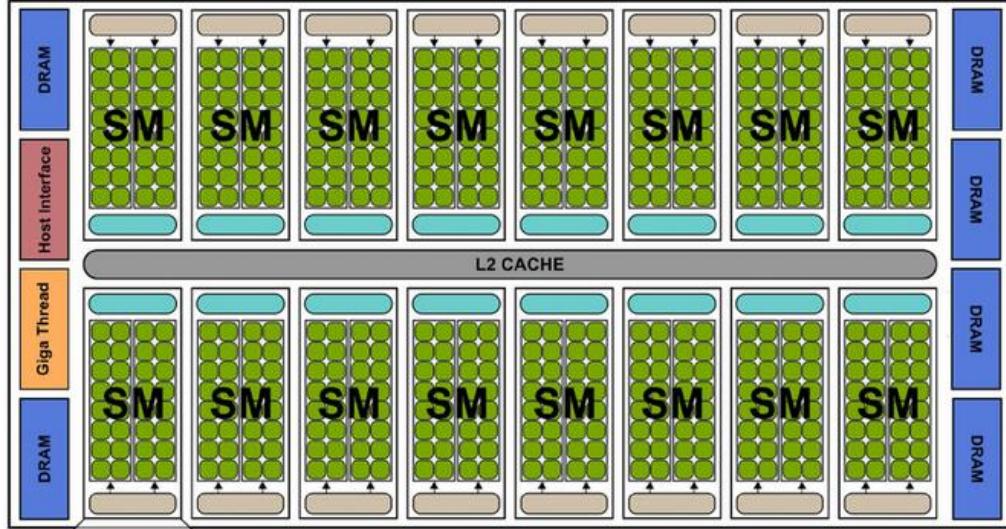
GPU体系结构

- 由上千个简单的核心（core）组成
 - 每个Core的结构非常简单（与CPU相比）
 - 不支持分支预测、推测执行、乱序执行等
- GPU特点
 - 较高的计算密度
 - 计算与访存比较高
 - 擅长处理高度并行的计算：如图像处理，矩阵计算
 - 早期主要用与显示处理
 - 缺点：不擅长处理控制逻辑复杂的程序



GPU执行模型

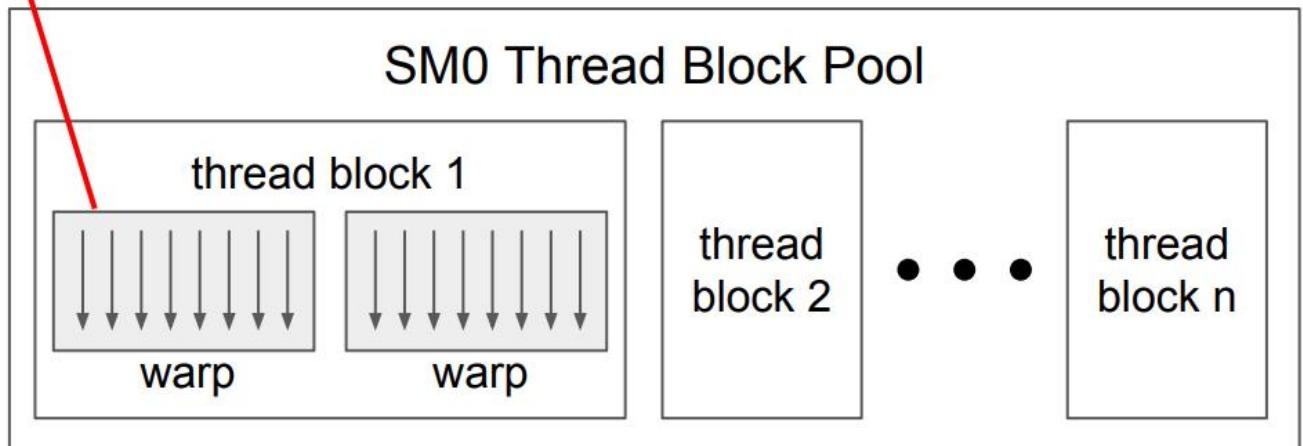
- SIMT (Single Instruction, Multiple Threads)
 - 将一组Cores组织成一个cluster
 - 在同一时间这些cores都执行相同的指令
 - 32个线程为一组构成warp, 以warp为单位调度到cores上
 - 一个warp内的所有线程执行相同指令, 但操作在不同的数据上



Kernel Execution

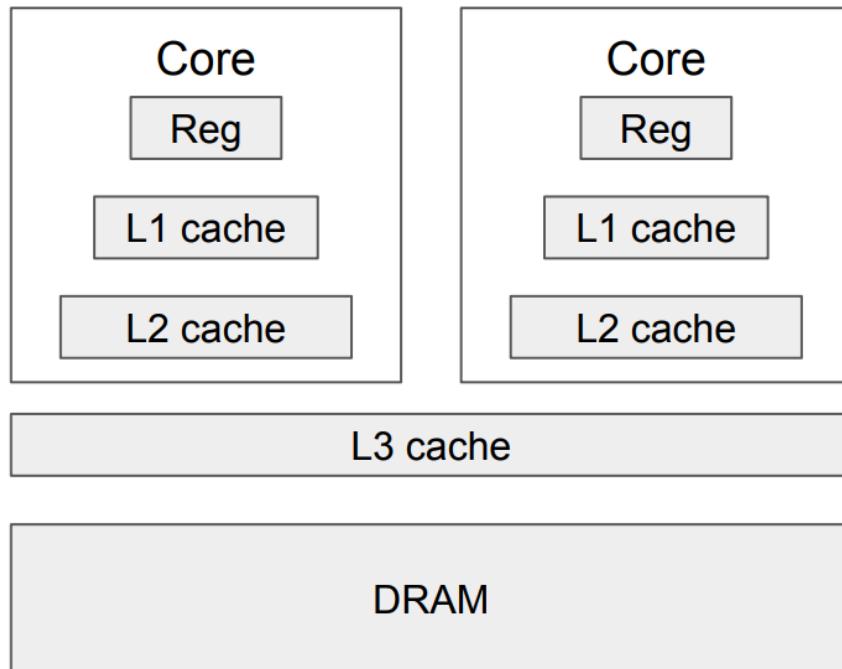


- A warp consists of 32 threads
 - A warp is the basic schedule unit in kernel execution.
- A thread block consists of 32-thread warps.
- Each cycle, a warp scheduler selects one ready warps and dispatches the warps to CUDA cores to execute.

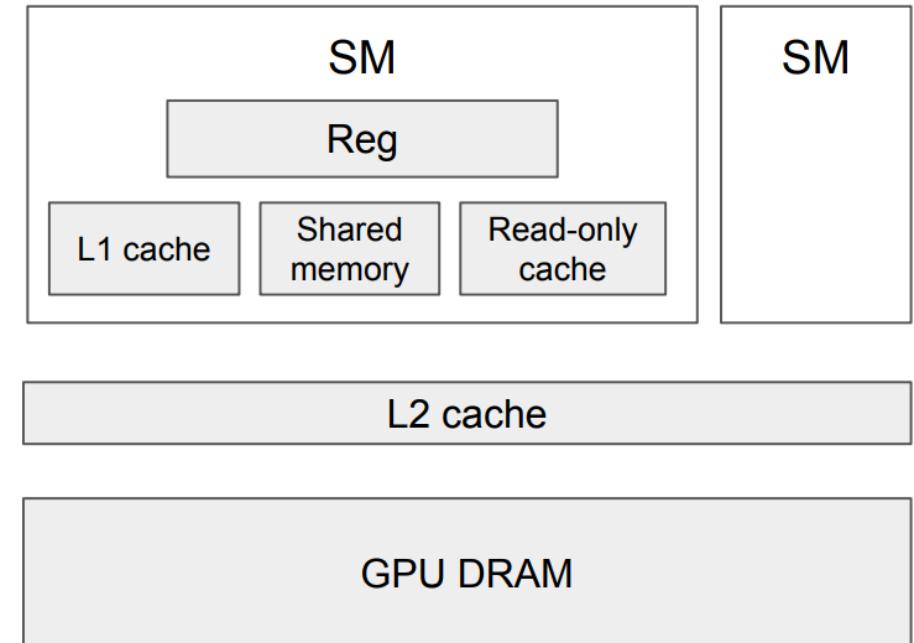


GPU内存架构

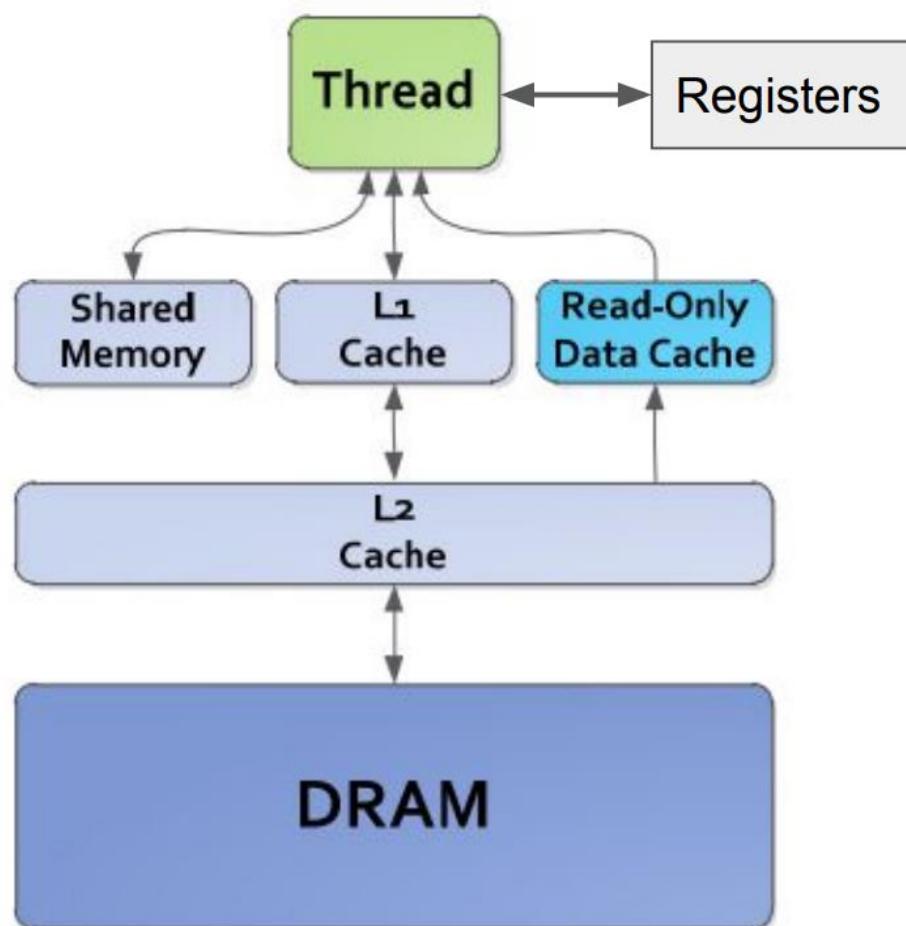
CPU memory hierarchy



GPU memory hierarchy



GPU内存访问延迟



Registers: R 0 cycle / R-after-W ~20 cycles

L1/texture cache: 92 cycles

Shared memory: 28 cycles

Constant L1 cache: 28 cycles

L2 cache: 200 cycles

DRAM: 350 cycles

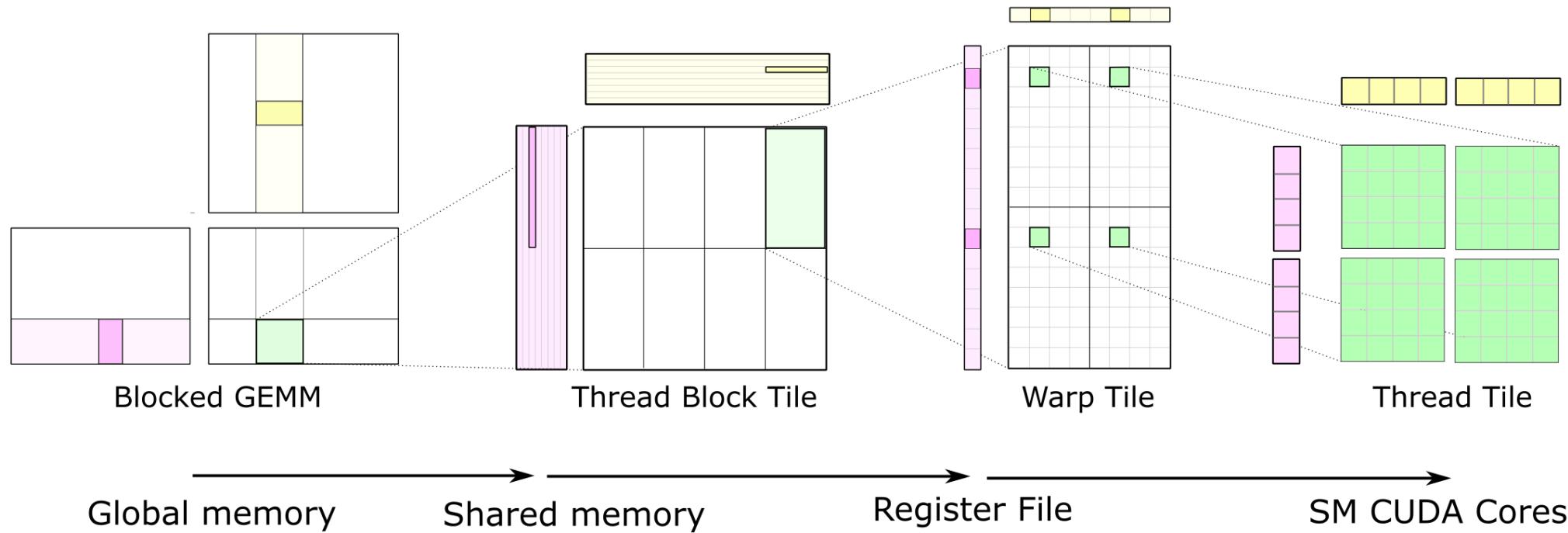
(for Nvidia Maxwell architecture)

GPU结构小结

- GPU擅长处理在规则、稠密的数据上的高数据并行计算任务
- 在该类任务上，GPU比CPU可获得更高的能效比
 - 大量的算术运算单元
 - 大量Core共享指令解码单元和控制单元

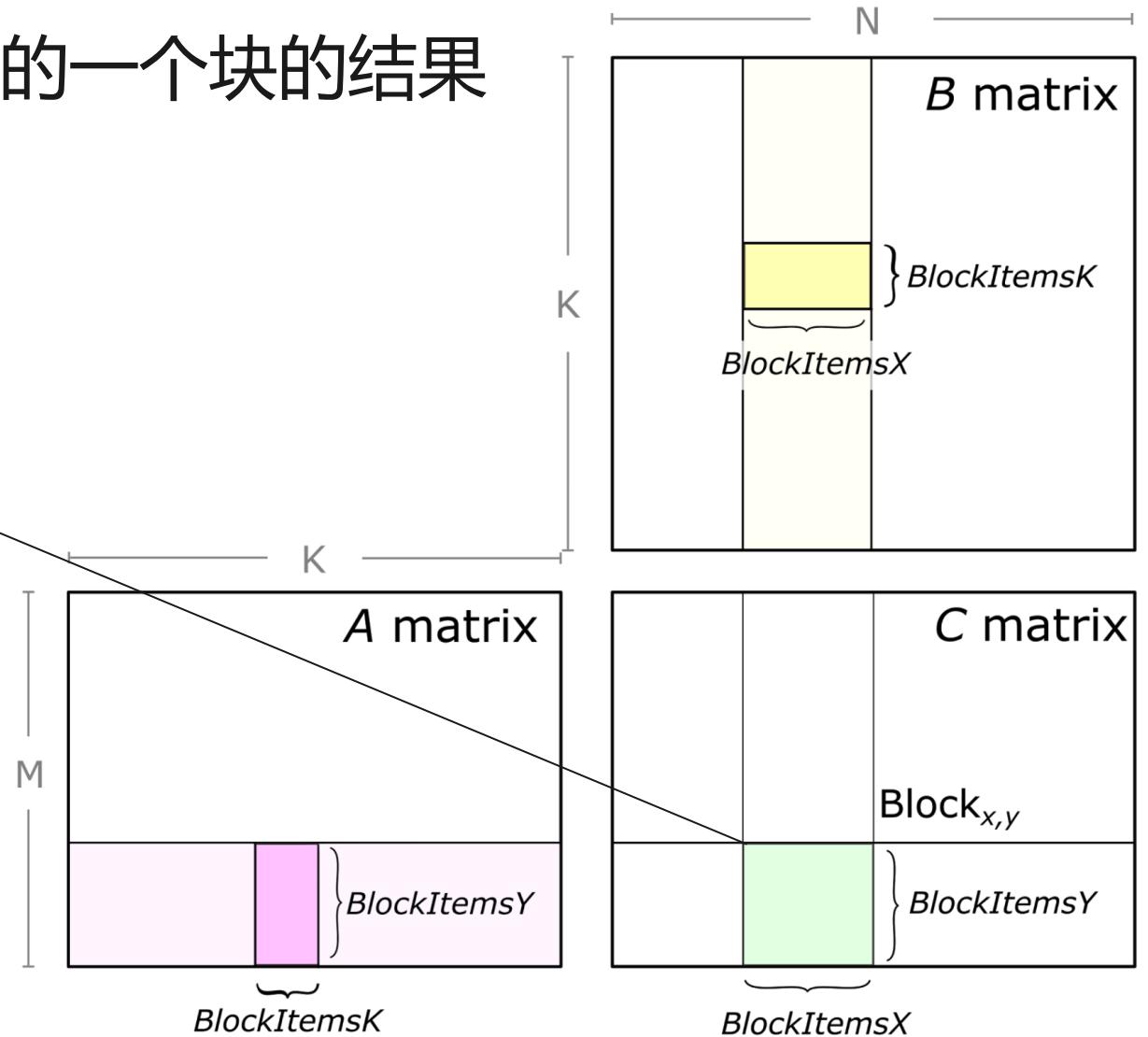
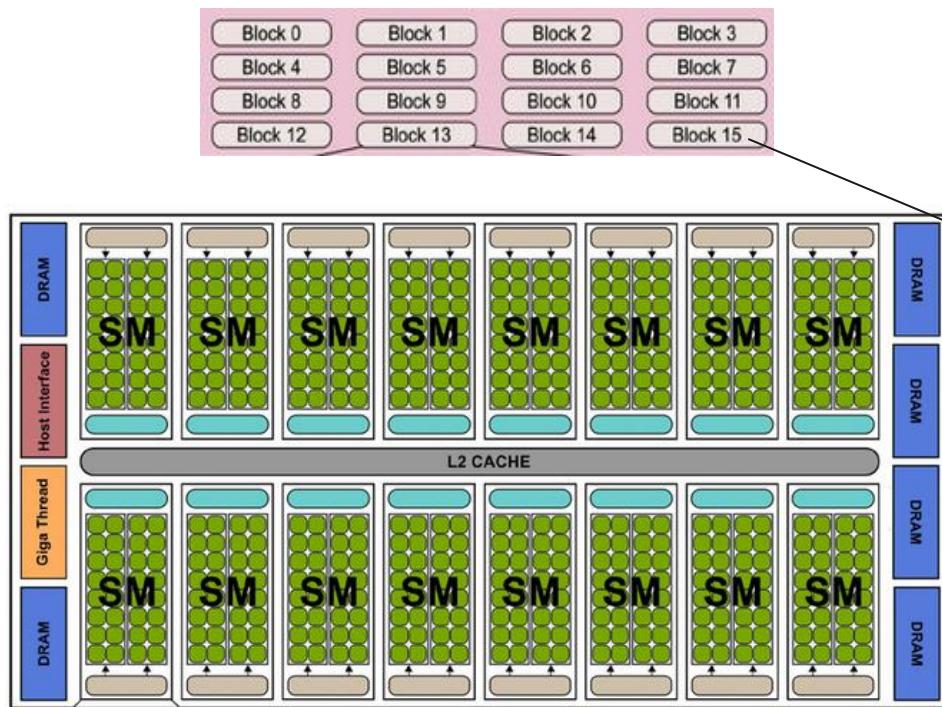
如何在GPU上高效地计算一个矩阵乘法？

- 提高访存计算比：从global memory到register的每层尽可能多的复用数据



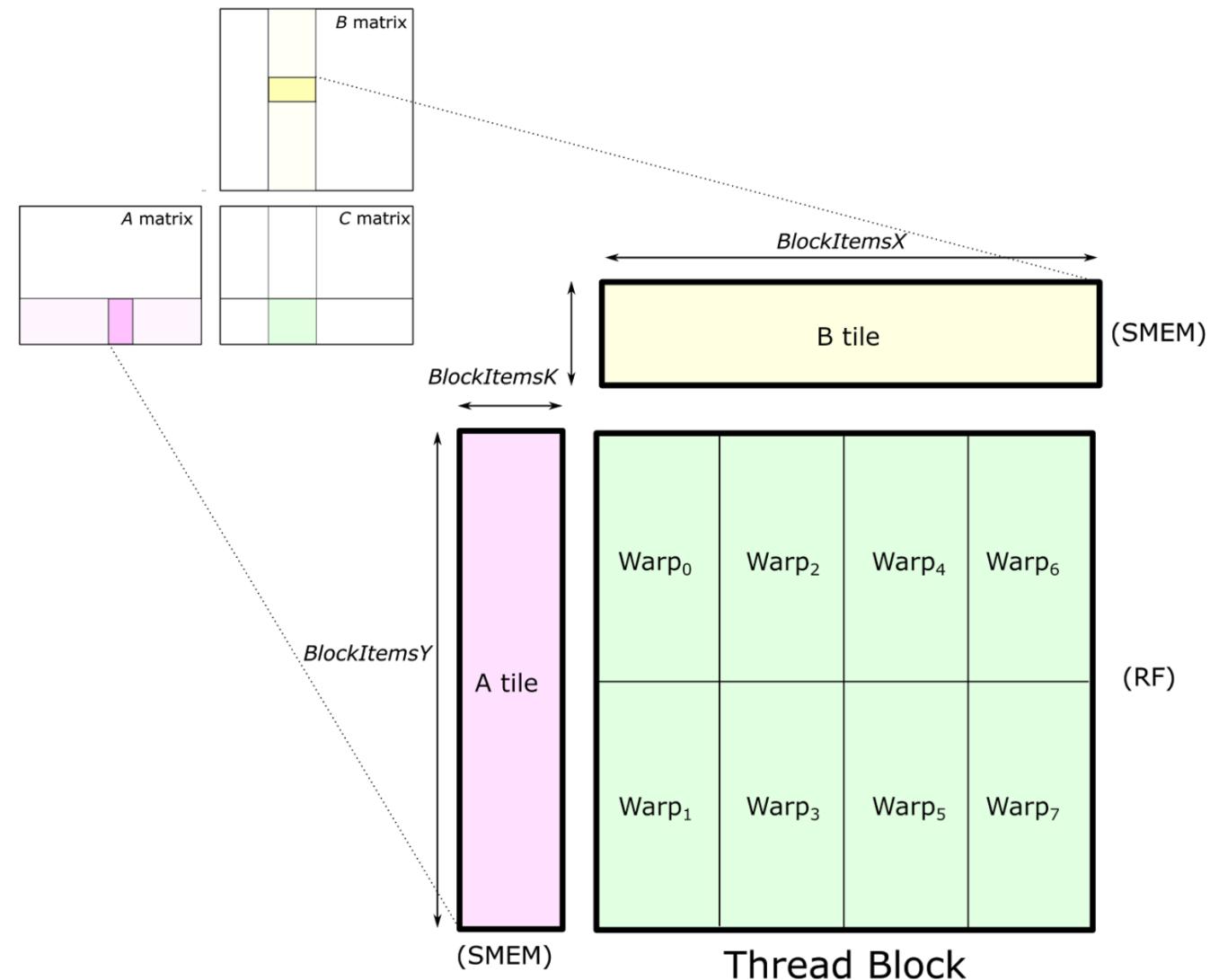
Thread Block Tile

- 每个thread block计算如图所示的一个块的结果
- 每个块的结果累加到C矩阵上



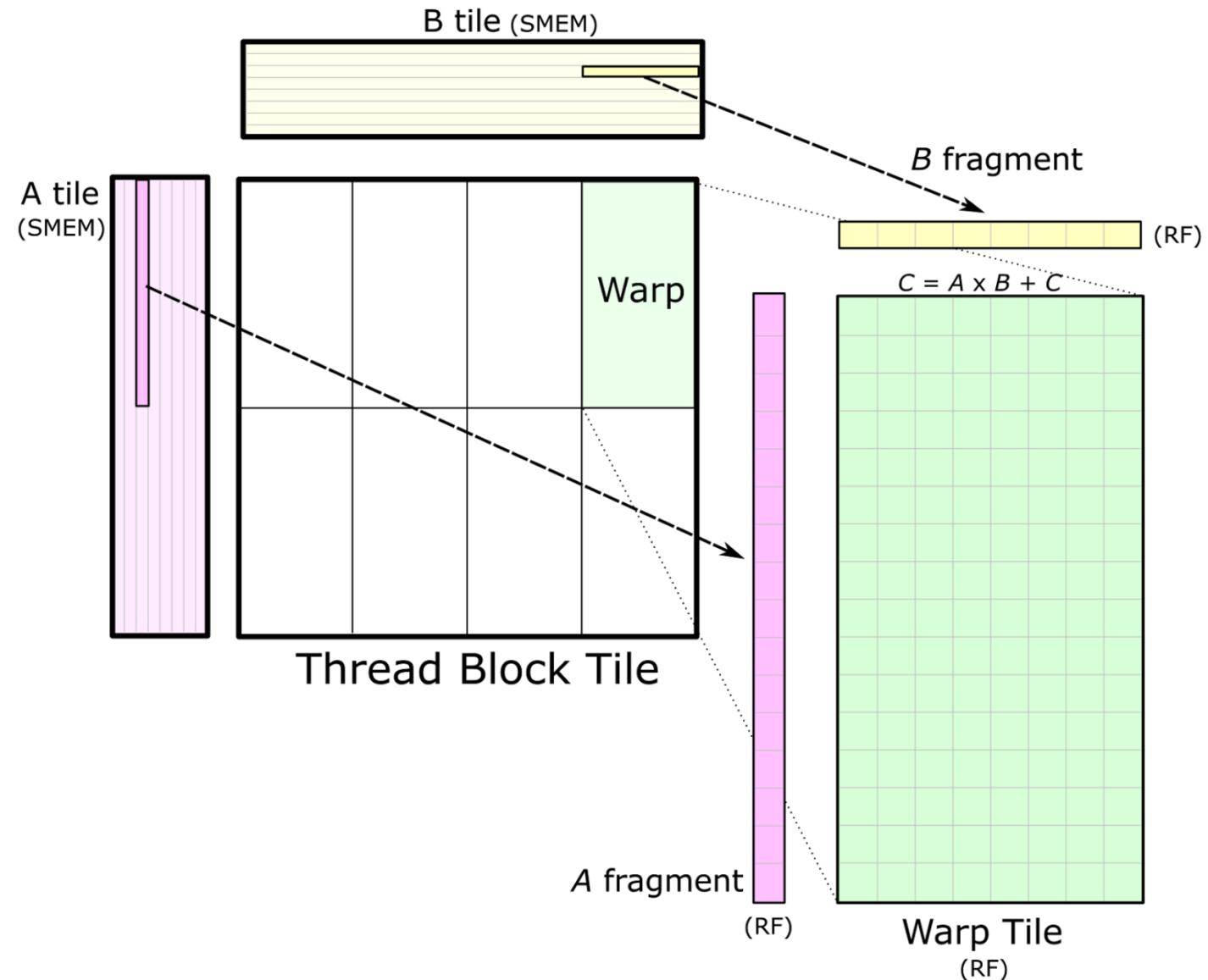
Warp Tile

- 每个thread-block中进一步划分成warps
- Tile A和B从memory中load到shared memory中
- 该SM中的所有warps都可以读取A和B
- A和B的结果需要不断累加，因此放到寄存器文件中



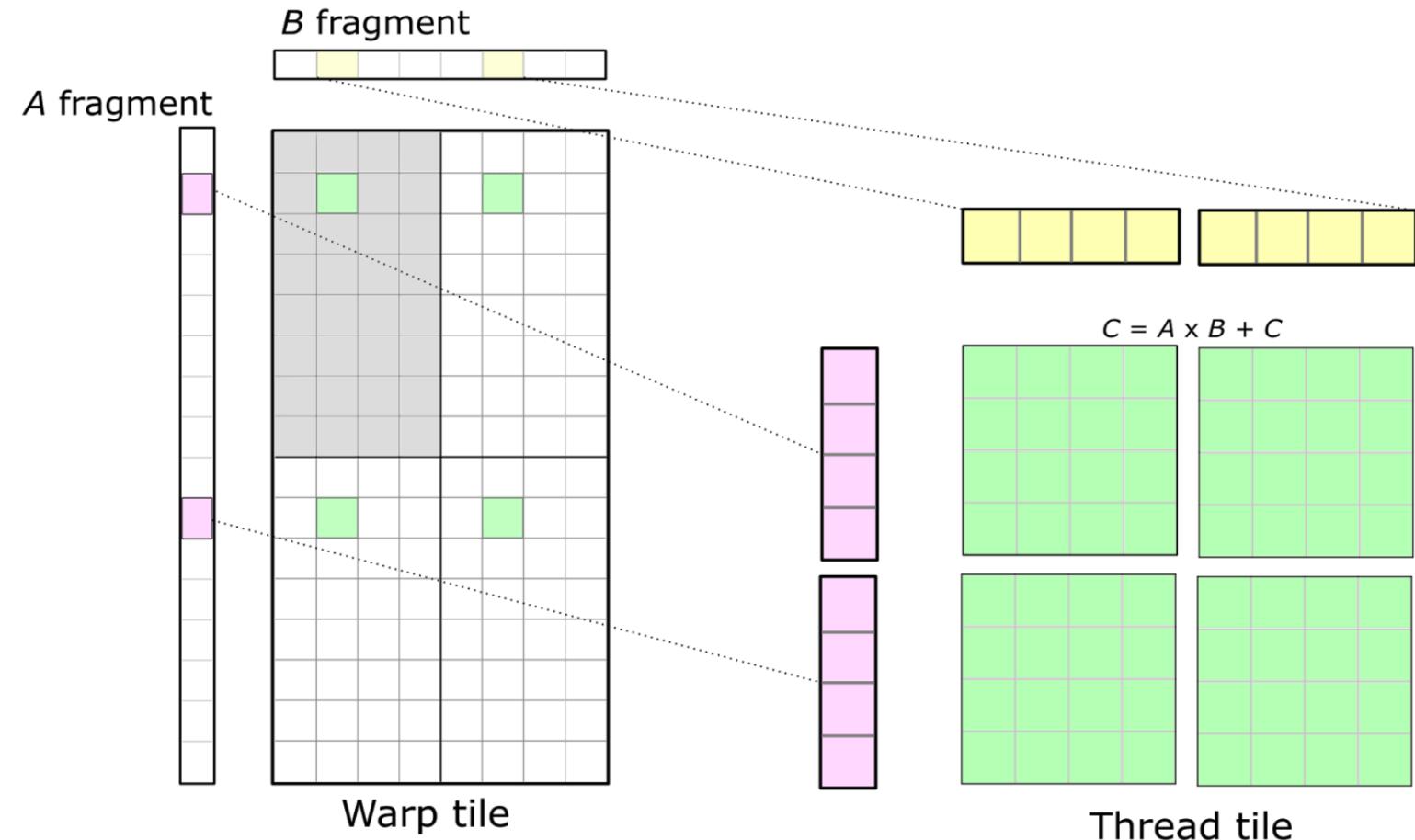
Warp Tile

- 每个warp负责tile A和B中一个分片的计算
 - 从shared memory中读取对应分片到寄存器文件中
 - 通过累加矩阵乘法计算C的每一个元素



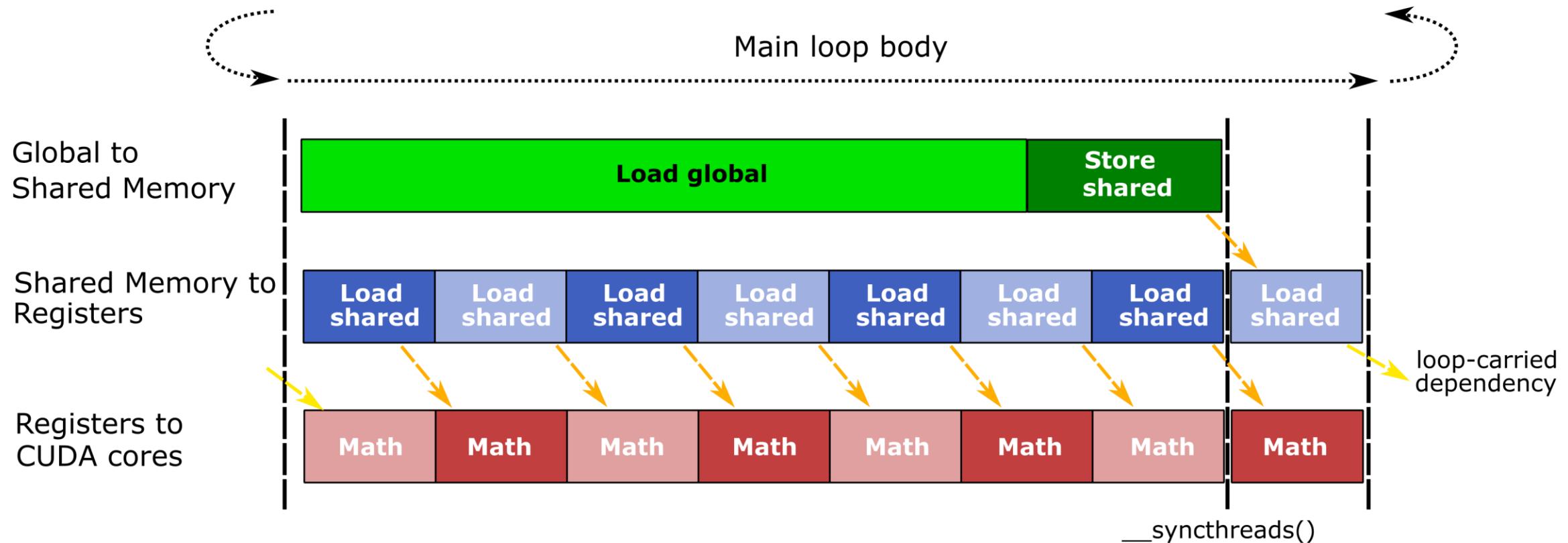
Thread Tile

- 由于线程间无法互相访问寄存器文件，因此每个线程应尽可能将寄存器的读取的数据进行重复使用



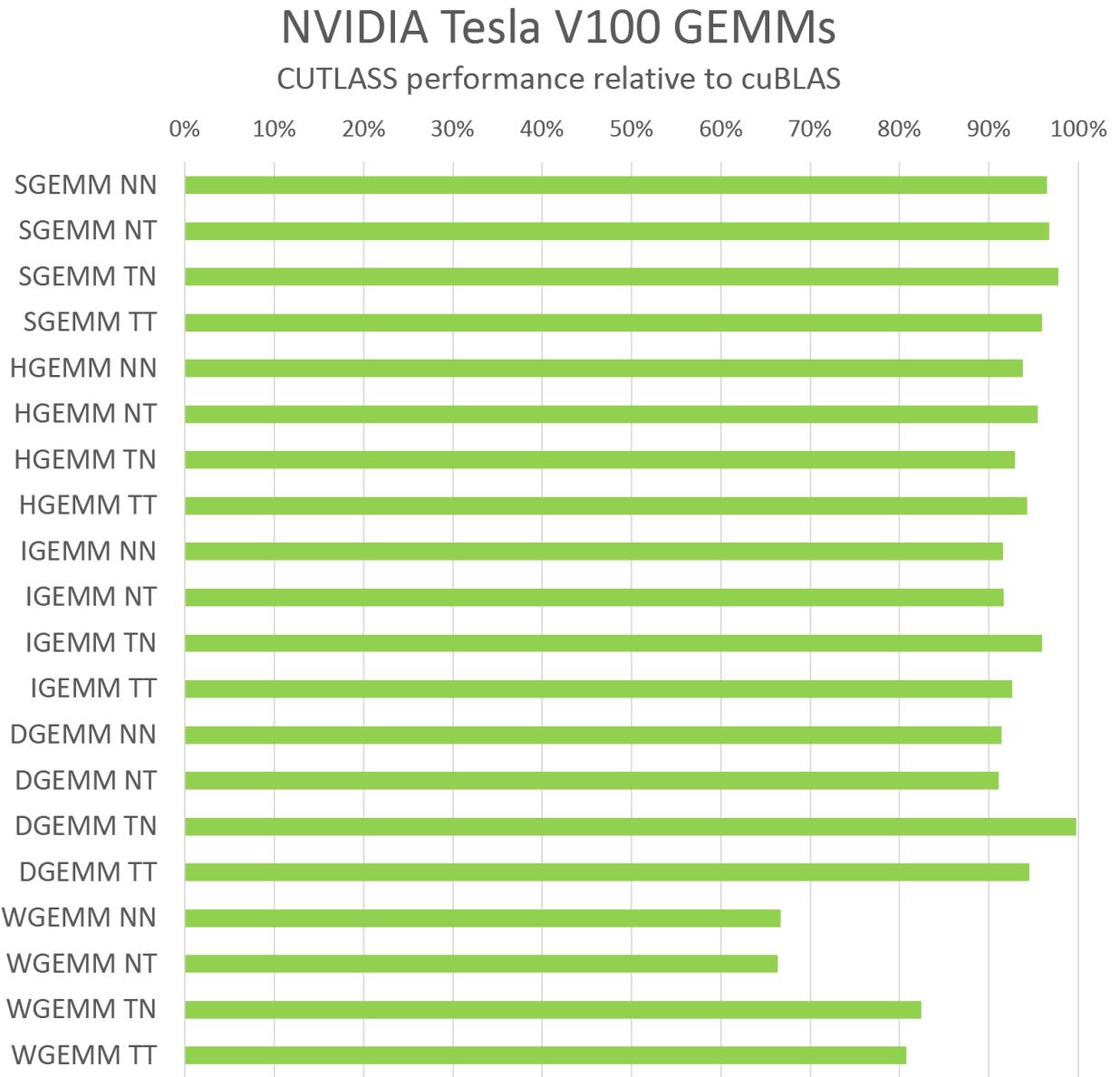
软件流水线

- 由于大量使用寄存器使得并发运行的blocks较少，访存计算比较低
- 采用软件流水线的方法隐藏访存延时



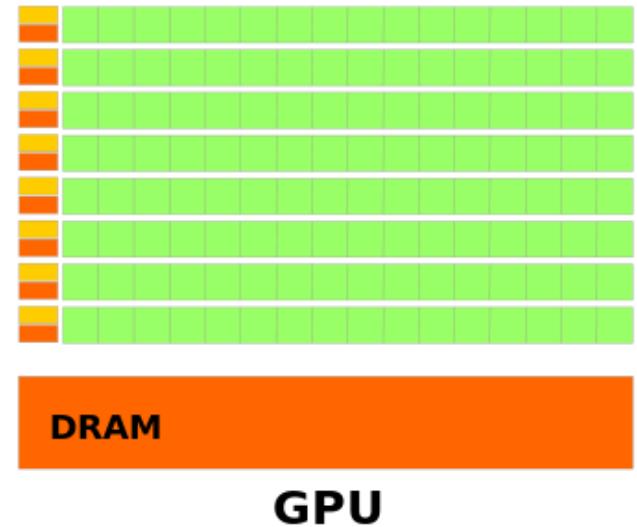
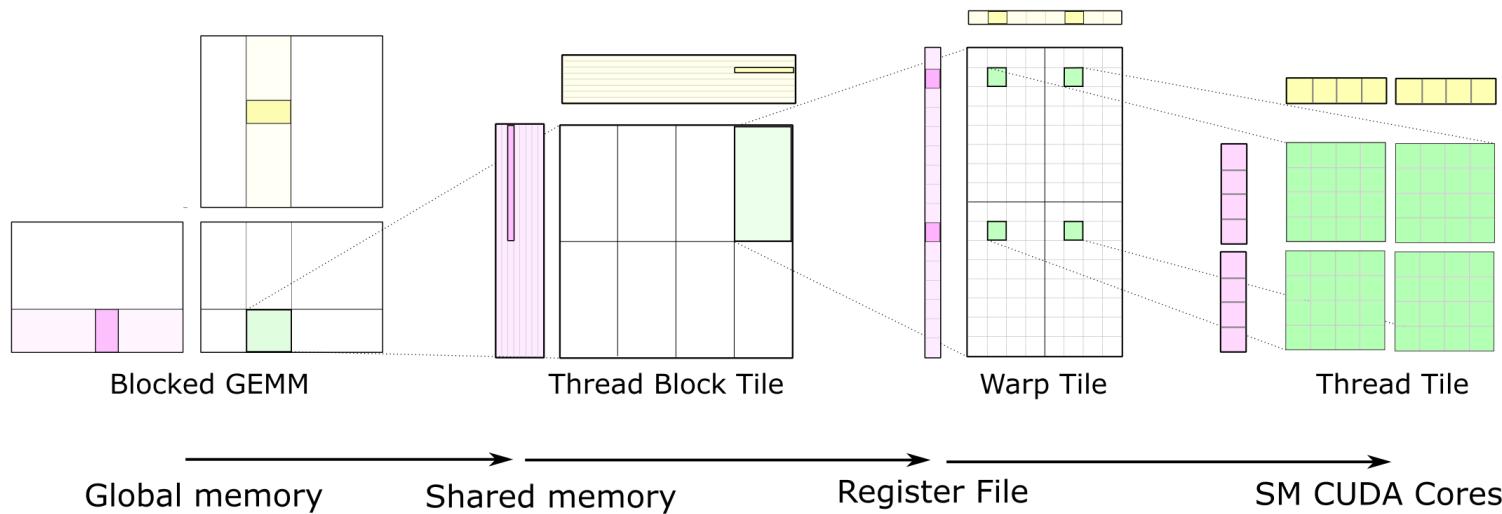
性能

- 达到90%左右cublas性能
- 更多的优化
 - 如WMMA 指令
 - 寄存器bank冲突控制
 - 内存bank冲突控制
 - ...
- 实际中
 - cuBLAS可提高较高的性能
 - 更多请阅读：
<https://devblogs.nvidia.com/cutlass-linear-algebra-cuda/>



小结

- GPU体系结构
- GPU内存层次结构
- GPU执行模型
- 如何在GPU中实现高效矩阵乘法



GPU memory hierarchy

为矩阵运算设计专用芯片 (ASICs)

- 观察：当前深度学习模型的计算特点：
 - 深度学习的计算本身是一种近似求解方法 → 可容忍较低计算精度
 - 当前深度学习模型的计算大量基于矩阵乘法运算 → 可使用较简单的计算指令
 - 矩阵乘法在现有体系结构上都是访存瓶颈 → 增加片上内存，减少访存
 - 负载中有较大量的浮点运算 → 增加算术运算密度
- 设计思路
 - 使用低精度计算，如16bit 浮点 或8bit 定点
 - 使用简化的指令集描述关键计算指令，如CISC
 - 使用流水线计算模型来减少数据读取，如脉动阵列
 - 使用比向量比指令计算密度更高的并行方法

Tensor Processing Unit (TPU)

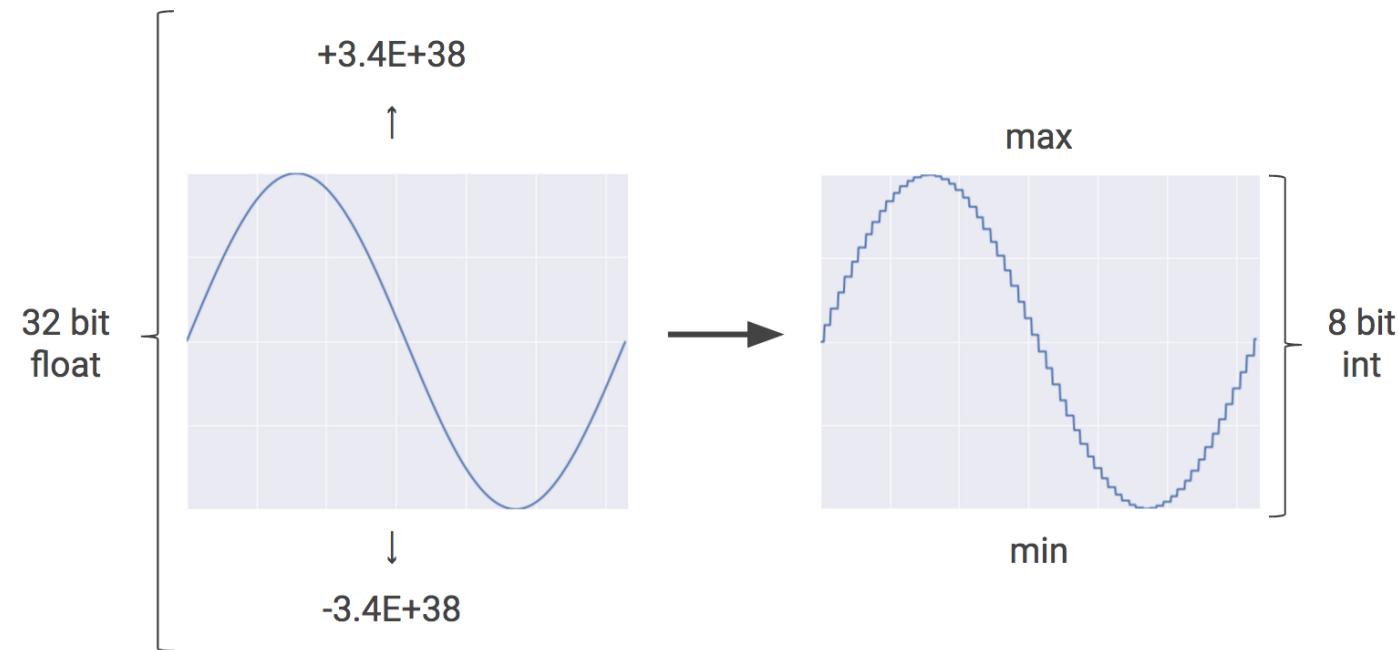
- 第一代TPU
 - 28nm process
 - runs at 700MHz
 - consumes 40W



An in-depth look at Google's first Tensor Processing Unit (TPU)

低精度量化

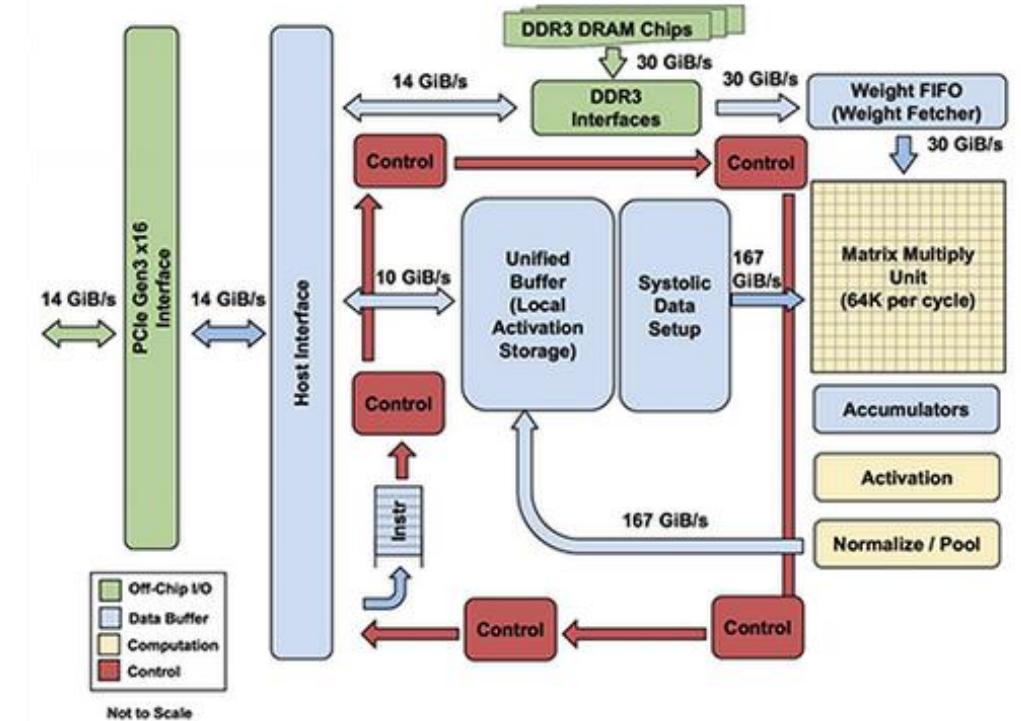
- 为降低功耗和芯片面积，一代TPU采用8bit整型作为计算数据类型
 - TPU提供65,536 8-bit 整数乘法单元
 - GPU一般提供几千个32-bit 浮点乘法单元
 - 只可用于模型推理



基于CISC的指令集

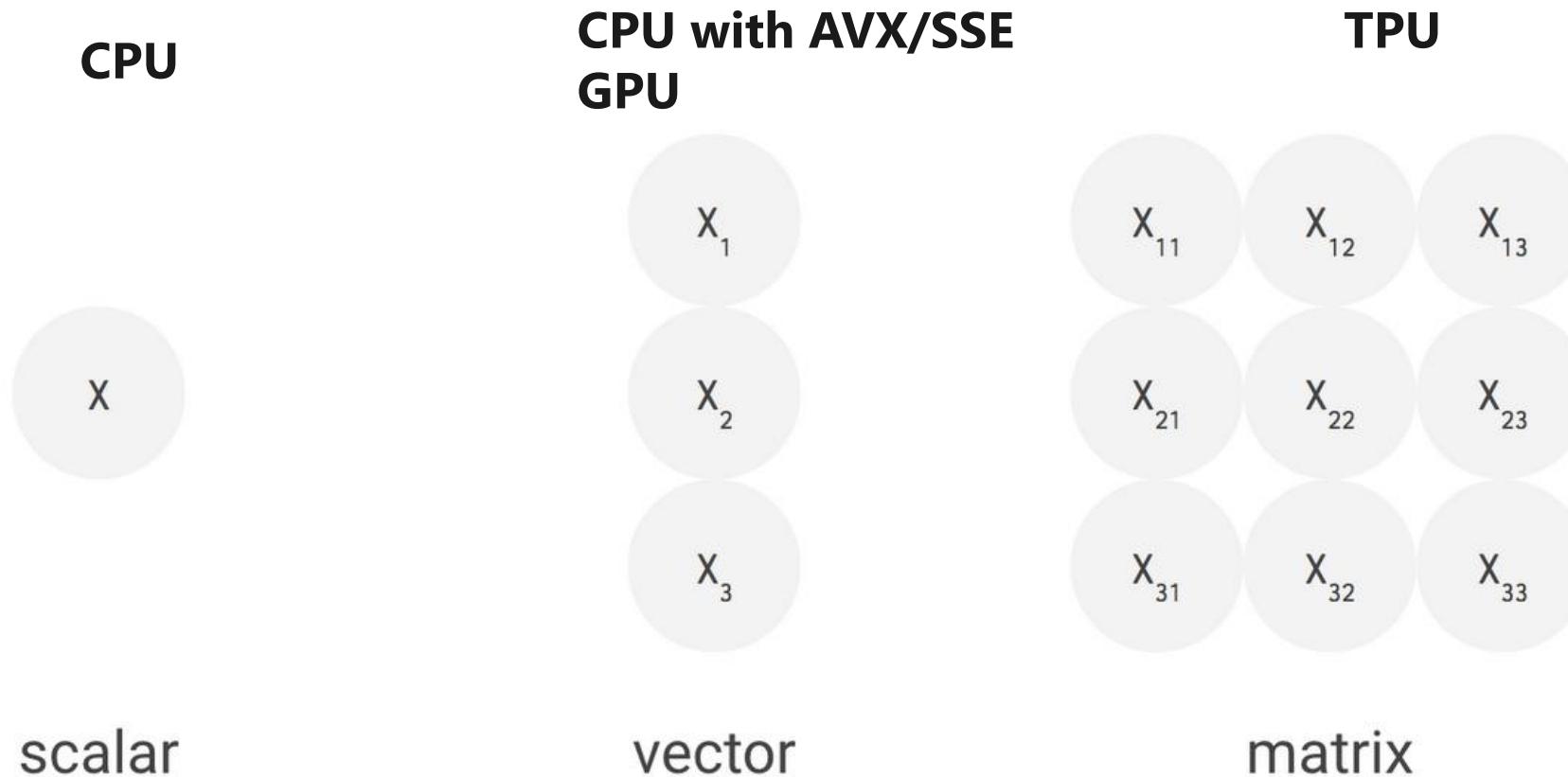
- Matrix Multiplier Unit (MXU): 65,536 8-bit 乘加单元
- Unified Buffer (UB): 24MB of SRAM
- Activation Unit (AU): 硬件激活单元

TPU Instruction	Function
Read_Host_Memory	Read data from memory
Read_Weights	Read weights from memory
MatrixMultiply/Convolve	Multiply or convolve with the data and weights, accumulate the results
Activate	Apply activation functions
Write_Host_Memory	Write result to memory



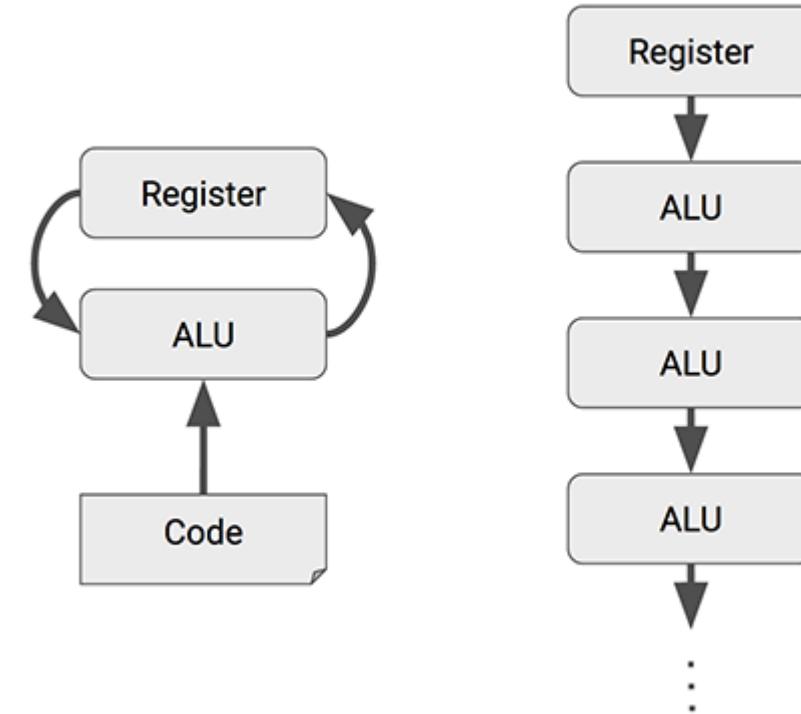
高度并行的矩阵处理单元 (MXU)

- 可以在一个时间周期计算数十万个计算

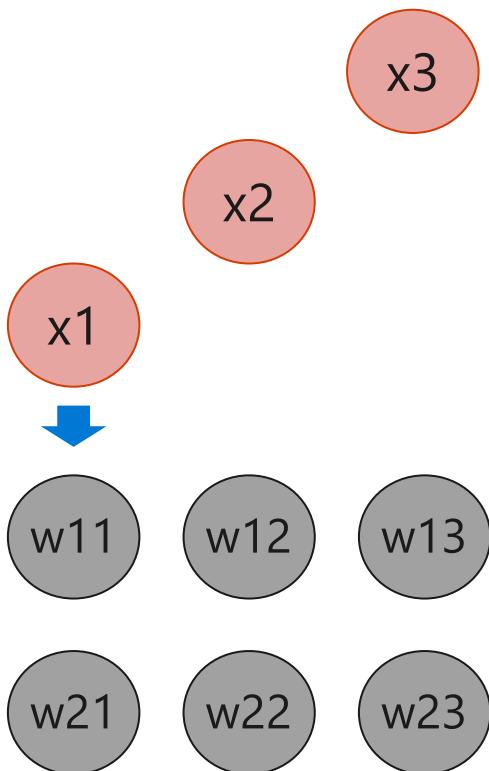


节省访存的核心：脉动阵列

- CPUs和GPUs通常需要花费大量的功耗去读取寄存器的值
- 脉动阵列的设计思想是将多个ALU运算单元串起来，从而避免每次计算都读取寄存器
- 缺点：要求计算符合特点的规则



例子：矩阵乘向量

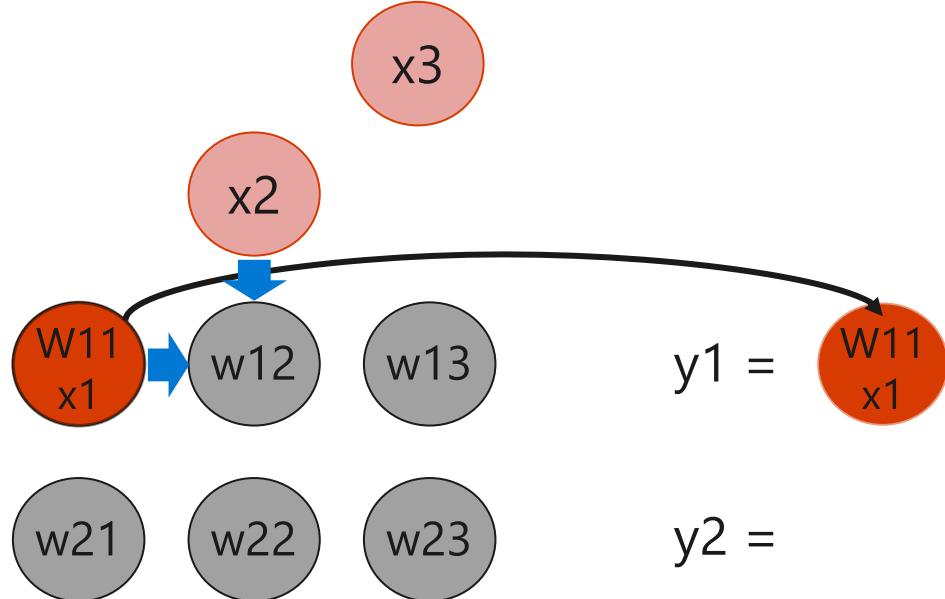


$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

$$y_1 =$$

$$y_2 =$$

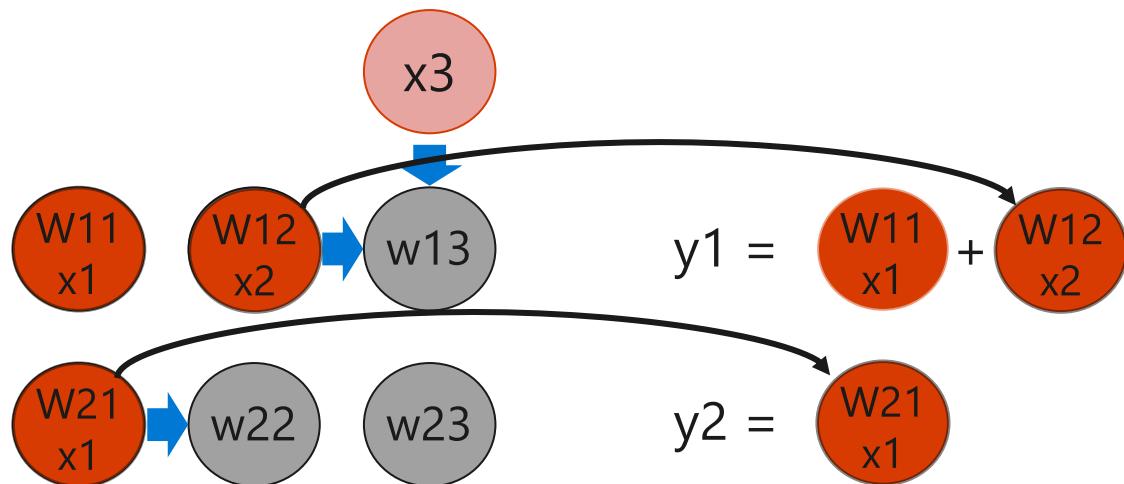
例子：矩阵乘向量



$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

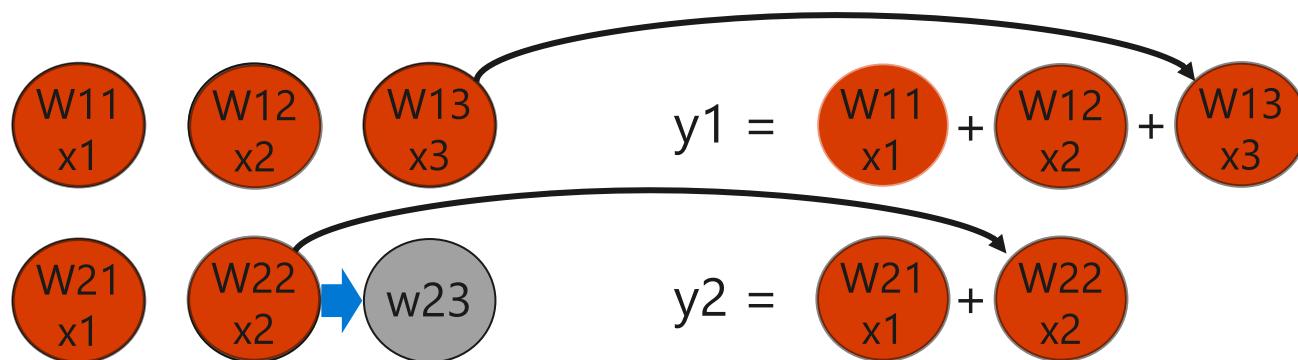
例子：矩阵乘向量

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$



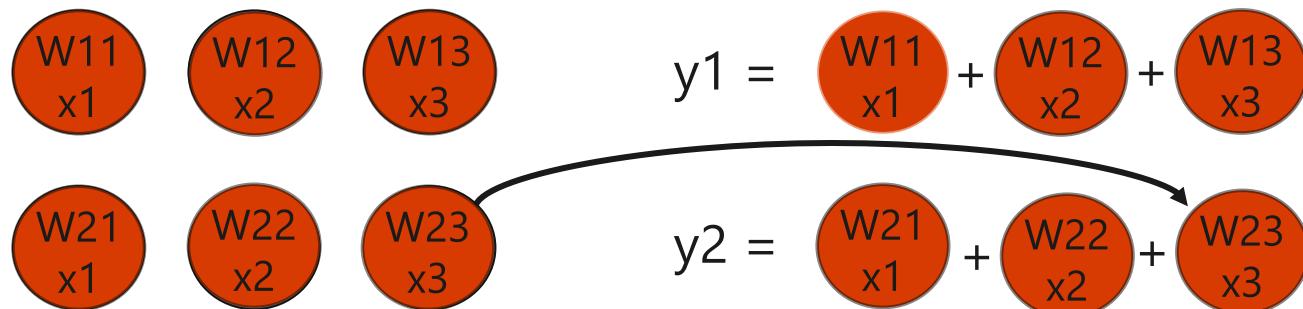
例子：矩阵乘向量

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$



例子：矩阵乘向量

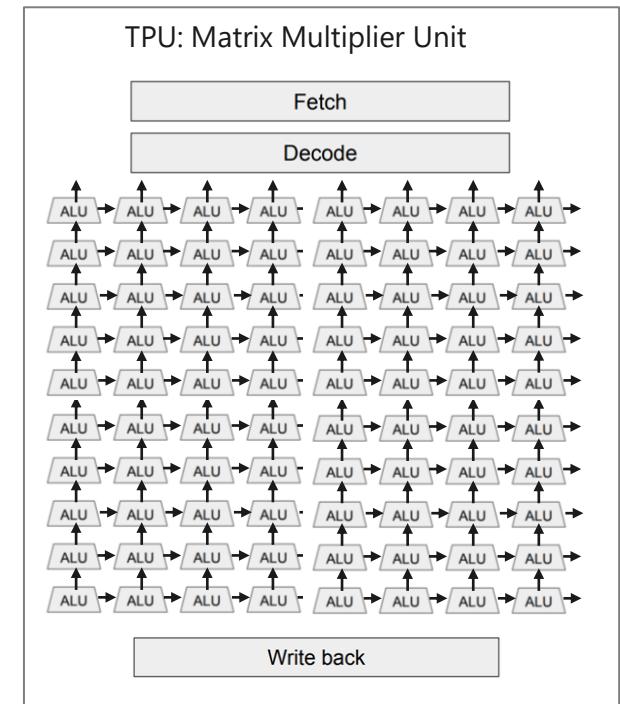
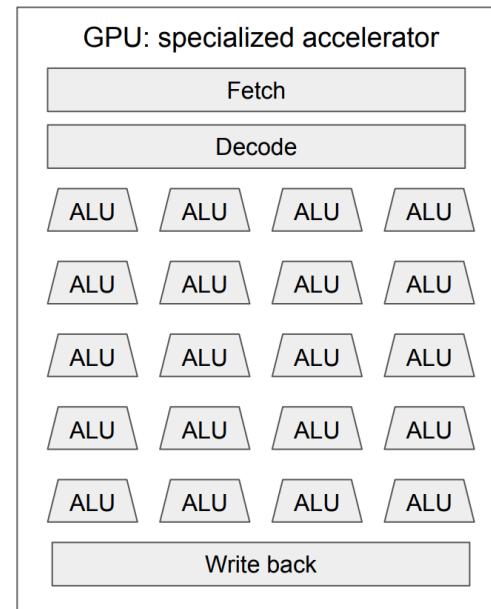
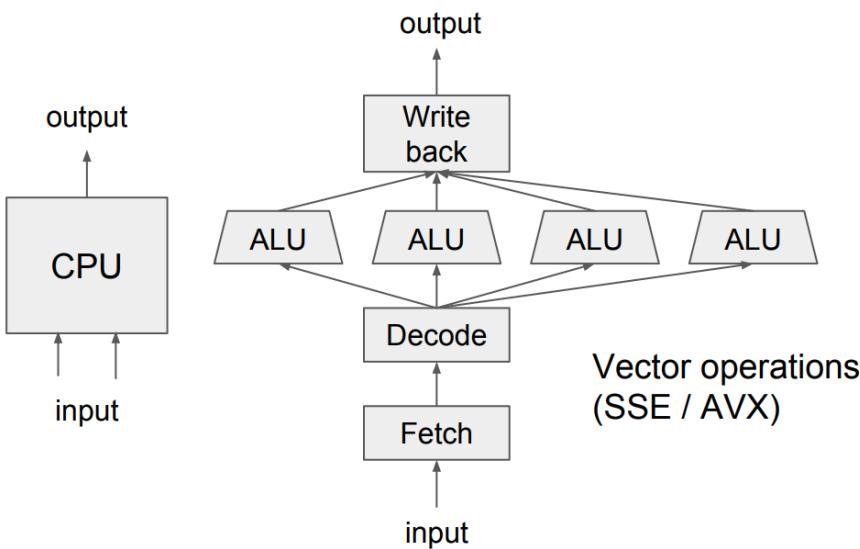
$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$



小结

- 为矩阵运算设计专用芯片 (ASIC)

- 低精度量化
- 基于CISC的简化指令集
- 高度并行的矩阵处理单元 (MXU)
- 节省访存的核心：脉动阵列



课后作业

- 推荐补充阅读材料

Lab 1 (for week 1, 2)

- Purpose
 - A simple throughout end-to-end AI example, from a system perspective
 - Understand the systems from debugger info and system logs
- Get ready
 - <https://github.com/microsoft/ai-edu/ai-system/labs/1>