

Семинар 2 (21)

Векторизация кода

Михаил Курносов

E-mail: mkurnosov@gmail.com

WWW: www.mkurnosov.net

Цикл семинаров «Основы параллельного программирования»
Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН
Новосибирск, 2016

Редукция (reduction, reduce)

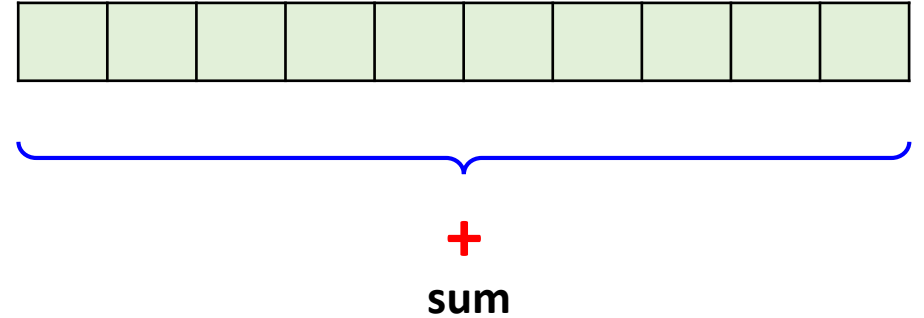
```
enum { n = 1000003 };
```

```
float sum(float *v, int n)
{
    float s = 0;
    for (int i = 0; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
}
```

```
double run_scalar()
{
    float *v = xmalloc(sizeof(*v) * n);
    for (int i = 0; i < n; i++)
        v[i] = i + 1.0;

    double t = wtime();
    float res = sum(v, n);
    t = wtime() - t;

    float valid_result = (1.0 + (float)n) * 0.5 * n;
    printf("Result (scalar): %.6f err = %f\n", res, fabsf(valid_result - res));
    printf("Elapsed time (scalar): %.6f sec.\n", t);
    free(v);
    return t;
}
```



Редукция (reduction, reduce)

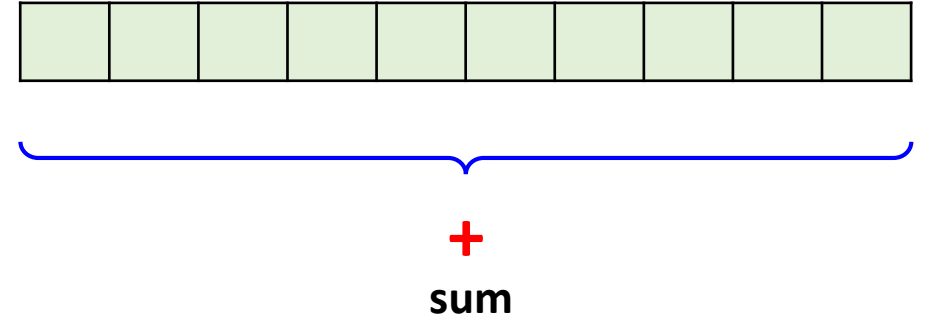
```
enum { n = 1000003 };
```

```
float sum(float *v, int n)
{
    float s = 0;
    for (int i = 0; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
}
```

```
double run_scalar()
{
    float *v = xmalloc(sizeof(*v) * n);
    for (int i = 0; i < n; i++)
        v[i] = i + 1.0;

    double t = wtime();
    float res = sum(v, n);
    t = wtime() - t;
```

```
    float valid_result = (1.0 + (float)n) * 0.5 * n;
    printf("Result (scalar): %.6f err = %f\n", res, fabsf(valid_result - res));
    printf("Elapsed time (scalar): %.6f sec.\n", t);
    free(v);
    return t;
}
```



```
$ ./reduction
```

```
Reduction: n = 1000003
```

```
Result (scalar): 499944423424.000000 err = 59080704.0
```

```
Elapsed time (scalar): 0.001011 sec.
```

?

Редукция (reduction, reduce)

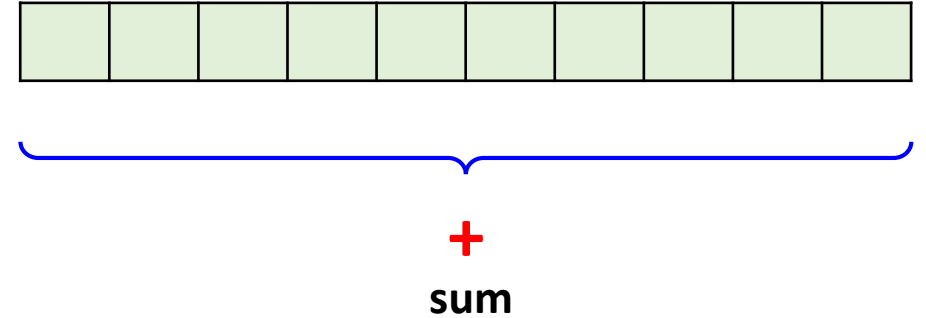
```
enum { n = 1000003 };
```

```
float sum(float *v, int n)
{
    float s = 0;
    for (int i = 0; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
}
```

```
double run_scalar()
{
    float *v = xmalloc(sizeof(*v) * n);
    for (int i = 0; i < n; i++)
        v[i] = i + 1.0;

    double t = wtime();
    float res = sum(v, n);
    t = wtime() - t;
```

```
    float valid_result = (1.0 + (float)n) * 0.5 * n;
    printf("Result (scalar): %.6f err = %f\n", res, fabsf(valid_result - res));
    printf("Elapsed time (scalar): %.6f sec.\n", t);
    free(v);
    return t;
}
```



- **float** (IEEE 754, single-precision) имеет ограниченную точность
- погрешность результата суммирования n чисел в худшем случае растет пропорционально n

Вариант 1: переход от float к double

```
double sum(double *v, int n)
{
    double s = 0;
    for (int i = 0; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
}
```

```
double run_scalar()
{
    double *v = xmalloc(sizeof(*v) * n);
    for (int i = 0; i < n; i++)
        v[i] = i + 1.0;

    double t = wtime();
    double res = sum(v, n);
    t = wtime() - t;
```

```
double valid_result = (1.0 + (double)n) * 0.5 * n;
printf("Result (scalar): %.6f err = %f\n", res, fabsf(valid_result - res));
printf("Elapsed time (scalar): %.6f sec.\n", t);
free(v);
return t;
}
```

```
$ ./reduction
Reduction: n = 1000003
Result (scalar): 500003500006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (scalar): 0.001031 sec.
```

Вариант 2: компенсационное суммирование Кэхэна

```
float sum(float *v, int n)
{
    float s = 0;
    for (int i = 0; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
}
```



```
/*
 * Алгоритм Кэхэна (Kahan's summation) -- компенсационное
 * суммирование чисел с плавающей запятой в формате IEEE 754 [*]
 *
 * [*] Kahan W. Further remarks on reducing truncation errors //
 * Communications of the ACM - 1964 - Vol. 8(1). - P. 40.
 */
float sum_kahan(float *v, int n)
{
    float s = v[0];
    float c = (float)0.0;

    for (int i = 1; i < n; i++) {
        float y = v[i] - c;
        float t = s + y;
        c = (t - s) - y;
        s = t;
    }
    return s;
}
```

погрешность
не зависит от n
(только от точности float)

- **W. M. Kahan** – один из основных разработчиков IEEE 754
(Turing Award-1989, ACM Fellow) <http://www.cs.berkeley.edu/~wkahan>

Вариант 2: компенсационное суммирование Кэхэна

```
float sum(float *v, int n)
{
    float s = 0;
    for (int i = 0; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
}
```



```
/*
 * Алгоритм Кэхэна (Kahan's summation) -- компенсационное
 * суммирование чисел с плавающей запятой в формате IEEE 754 [*]
 *
 * [*] Kahan W. Further remarks on reducing truncation errors //
 * Communications of the ACM - 1964 - Vol. 8(1). - P. 40.
 */
float sum_kahan(float *v, int n)
{
    float s = v[0];
    float c = (float)0.0;

    for (int i = 1; i < n; i++) {
        float y = v[i] - c;
        float t = s + y;
        c = (t - s) - y;
        s = t;
    }
    return s;
}
```

погрешность
не зависит от n
(только от точности float)

```
$ ./reduction
```

```
Reduction: n = 1000003
```

```
Result (scalar): 500003504128.000000 err = 0.000000
```

```
Elapsed time (scalar): 0.004312 sec.
```

Векторная версия редукции: SSE, float

```
double run_vectorized()
{
    float *v = _mm_malloc(sizeof(*v) * n, 16);
    for (int i = 0; i < n; i++)
        v[i] = 2.0;

    double t = wtime();
    float res = sum_sse(v, n);
    t = wtime() - t;

    float valid_result = 2.0 * (float)n;
    printf("Result (vectorized): %.6f err = %f\n", res, fabsf(valid_result - res));
    printf("Elapsed time (vectorized): %.6f sec.\n", t);
    free(v);
    return t;
}
```

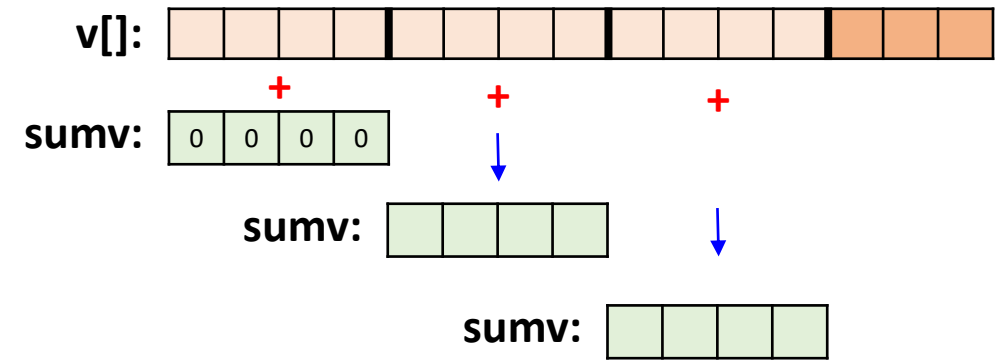

Векторная версия редукции: SSE, float

```
float sum_sse(float * restrict v, int n)
{
    __m128 *vv = (__m128 *)v;
    int k = n / 4;
    __m128 sumv = _mm_setzero_ps();
    for (int i = 0; i < k; i++) {
        sumv = _mm_add_ps(sumv, vv[i]);
    }

    // s = sumv[0] + sumv[1] + sumv[2] + sumv[3]
    float t[4] __attribute__((aligned(16)));
    _mm_store_ps(t, sumv);
    float s = t[0] + t[1] + t[2] + t[3];

    for (int i = k * 4; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
}
```

1) Векторное суммирование (вертикальное)



2) Горизонтальное суммирование

`s = sumv[0] + sumv[1] + sumv[2] + sumv[3]`

3) Скалярное суммирование элементов в «хвосте» массива

Векторная версия редукции: SSE, float

```
float sum_sse(float * restrict v, int n)
{
    __m128 *vv = (__m128 *)v;
    int k = n / 4;
    __m128 sumv = _mm_setzero_ps();
    for (int i = 0; i < k; i++) {
        sumv = _mm_add_ps(sumv, vv[i]);
    }

    // s = sumv[0] + sumv[1] + sumv[2] + sumv[3]
    float t[4] __attribute__((aligned(16)));
    _mm_store_ps(t, sumv);
    float s = t[0] + t[1] + t[2] + t[3];
}
```

```
# cngpu1: Intel Core i5 4690 - Haswell
Reduction: n = 1000003
Result (scalar): 2000006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (scalar): 0.003862 sec.
Result (vectorized): 2000006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (vectorized): 0.002523 sec.
Speedup: 1.53
```

```
# Intel Core i5-3320M - Ivy Bridge (Sandy Bridge shrink)
Reduction: n = 1000003
Result (scalar): 2000006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (scalar): 0.001074 sec.
Result (vectorized): 2000006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (vectorized): 0.000760 sec.
Speedup: 1.41
```

```
# Oak: Intel Xeon E5620 - Westmere (Nehalem shrink)
Reduction: n = 1000003
Result (scalar): 2000006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (scalar): 0.001259 sec.
Result (vectorized): 2000006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (vectorized): 0.000315 sec.
Speedup: 3.99
```

```
# cnmic: Intel Xeon E5-2620 v3 - Haswell
Reduction: n = 1000003
Result (scalar): 2000006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (scalar): 0.001256 sec.
Result (vectorized): 2000006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (vectorized): 0.000319 sec.
Speedup: 3.94
```

Векторная версия редукции: погрешность вычислений

```
double run_vectorized()
{
    float *v = _mm_malloc(sizeof(*v) * n, 16);
    for (int i = 0; i < n; i++)
        v[i] = i + 1.0;    // Изменили инициализацию с "2.0" на "i + 1.0"

    double t = wtime();
    float res = sum_sse(v, n);
    t = wtime() - t;

    float valid_result = (1.0 + (float)n) * 0.5 * n;
    printf("Result (vectorized): %.6f err = %f\n", res, fabsf(valid_result - res));
    printf("Elapsed time (vectorized): %.6f sec.\n", t);
    free(v);
    return t;
}
```

Результаты скалярной
и векторной версий
не совпадают!

```
$ ./reduction
Reduction: n = 1000003
Result (scalar): 499944423424.000000 err = 59080704.000000
Elapsed time (scalar): 0.001007 sec.
Result (vectorized): 500010975232.000000 err = 7471104.000000
Elapsed time (vectorized): 0.000770 sec.
Speedup: 1.31
```

Векторная версия редукции: погрешность вычислений

- **Скалярная версия:**

$$s = v[0] + v[1] + v[2] + \dots + v[n - 1]$$

- **Векторная SSE-версия (float):**

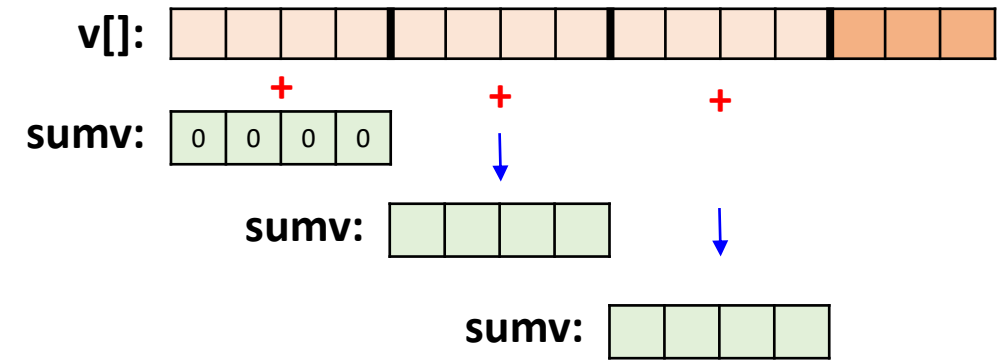
$$\begin{aligned} s = & (v[0] + v[4] + v[8]) + // \text{ sumv}[0] \\ & (v[1] + v[5] + v[9]) + // \text{ sumv}[1] \\ & (v[2] + v[6] + v[10]) + // \text{ sumv}[2] \\ & (v[3] + v[7] + v[11]) + // \text{ sumv}[3] \\ & v[12] + v[13] + v[14] // \text{ «ХВОСТ»} \end{aligned}$$

- В SSE-версии порядок выполнения операций отличается от скалярной версии
- Операция сложения чисел с плавающей запятой в формате IEEE 754 не ассоциативна и не коммутативна

$$a + b \neq b + a \qquad a + (b + c) \neq (a + b) + c$$

- David Goldberg. *What Every Computer Scientist Should Know About Floating-Point Arithmetic* // <http://www.validlab.com/goldberg/paper.pdf>

1) Векторное суммирование (вертикальное)



2) Горизонтальное суммирование

$$s = \text{sumv}[0] + \text{sumv}[1] + \text{sumv}[2] + \text{sumv}[3]$$

3) Скалярное суммирование элементов в «хвосте» массива

Векторная версия редукции: SSE, double

```
double sum_sse(double * restrict v, int n)
{
    __m128d *vv = (__m128d *)v;
    int k = n / 2;
    __m128d sumv = _mm_setzero_pd();
    for (int i = 0; i < k; i++) {
        sumv = _mm_add_pd(sumv, vv[i]);
    }
    // Compute s = sumv[0] + sumv[1] + sumv[2] + sumv[3]
    double t[2] __attribute__((aligned(16)));
    _mm_store_pd(t, sumv);
    double s = t[0] + t[1];

    for (int i = k * 2; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
}
```

```
$ ./reduction
Reduction: n = 1000003
Result (scalar): 500003500006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (scalar): 0.001134 sec.
Result (vectorized): 500003500006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (vectorized): 0.001525 sec.
Speedup: 0.74
```

Векторная версия: горизонтальное суммирование SSE3

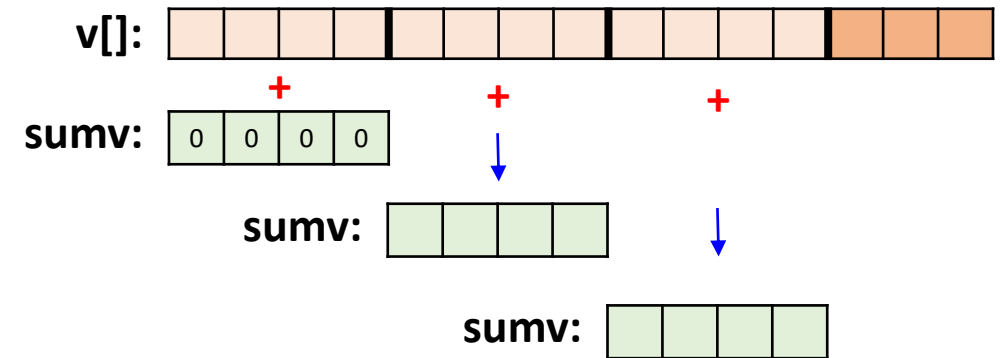
```
#include <pmmmintrin.h>
```

```
float sum_sse(float * restrict v, int n)
{
    __m128 *vv = (__m128 *)v;
    int k = n / 4;
    __m128 sumv = _mm_setzero_ps();
    for (int i = 0; i < k; i++) {
        sumv = _mm_add_ps(sumv, vv[i]);
    }
```

```
    // s = sumv[0] + sumv[1] + sumv[2] + sumv[3]
    sumv = _mm_hadd_ps(sumv, sumv);
    sumv = _mm_hadd_ps(sumv, sumv);
    float s __attribute__((aligned(16))) = 0;
    _mm_store_ss(&s, sumv);
```

```
    for (int i = k * 4; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
}
```

1) Векторное суммирование (вертикальное)



2) Горизонтальное суммирование SSE3

$a = \text{hadd}(a, a) \Rightarrow a = [a_3 + a_2 \mid a_1 + a_0 \mid a_3 + a_2 \mid a_1 + a_0]$
 $a = \text{hadd}(a, a) \Rightarrow a = [a_3 + a_2 + a_1 + a_0 \mid \text{---} \mid \text{---} \mid \text{---}]$

3) Скалярное суммирование элементов в «хвосте» массива

Векторная версия: горизонтальное суммирование SSE3

```
#include <pmmintrin.h>
```

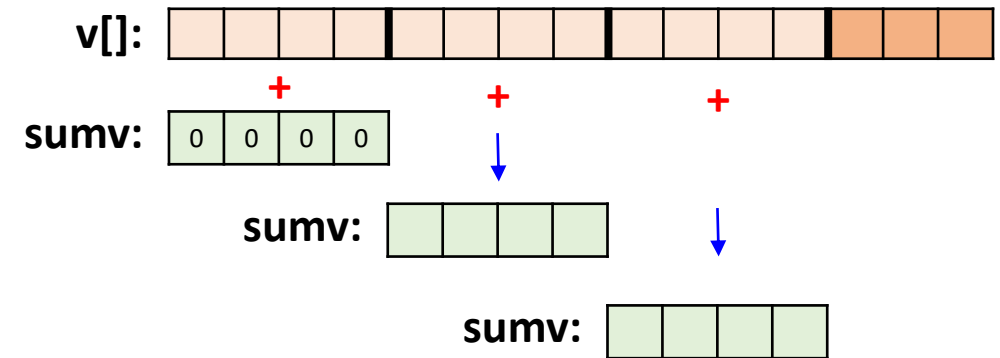
```
float sum_sse(float * restrict v, int n)
{
    __m128 *vv = (__m128 *)v;
    int k = n / 4;
    __m128 sumv = _mm_setzero_ps();
    for (int i = 0; i < k; i++) {
        sumv = _mm_add_ps(sumv, vv[i]);
    }
}
```

```
// s = sumv[0] + sumv[1] + sumv[2] + sumv[3]
sumv = _mm_hadd_ps(sumv, sumv);
sumv = _mm_hadd_ps(sumv, sumv);
float s __attribute__((aligned (16))) = 0;
_mm_store_ss(&s, sumv);
```

```
for (int i = k * 4; i < n; i++)
    s += v[i];
return s;
```

```
}
```

1) Векторное суммирование (вертикальное)



2) Горизонтальное суммирование SSE3

`a = hadd(a, a) => a = [a3 + a2 | a1 + a0 | a3 + a2 | a1 + a0]`
`a = hadd(a, a) => a = [a3 + a2 + a1 + a0 | --/-- | --/-- | --/--]`

```
# Intel Core i5-3320M - Ivy Bridge (Sandy Bridge shrink)
Reduction: n = 1000003
Result (scalar): 499944423424.000000 err = 59080704.000000
Elapsed time (scalar): 0.001071 sec.
Result (vectorized): 500010975232.000000 err = 7471104.000000
Elapsed time (vectorized): 0.000342 sec.
Speedup: 3.13
```

Векторная версия: горизонтальное суммирование (double)

```
double sum_sse(double * restrict v, int n)
{
    __m128d *vv = (__m128d *)v;
    int k = n / 2;
    __m128d sumv = _mm_setzero_pd();
    for (int i = 0; i < k; i++) {
        sumv = _mm_add_pd(sumv, vv[i]);
    }

    // Compute s = sumv[0] + sumv[1] + sumv[2] + sumv[3]
    // SSE3 horizontal operation:
    //   hadd(a, a) => a = [a1 + a0 | a1 + a0]
    sumv = _mm_hadd_pd(sumv, sumv);
    double s __attribute__((aligned(16))) = 0;
    _mm_store_sd(&s, sumv);

    for (int i = k * 2; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
}
```

```
# Intel Core i5-3320M - Ivy Bridge (Sandy Bridge shrink)
Reduction: n = 1000003
Result (scalar): 500003500006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (scalar): 0.001047 sec.
Result (vectorized): 500003500006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (vectorized): 0.000636 sec.
Speedup: 1.65
```


Векторная версия: AVX (double)

```
double run_vectorized()
{
    double *v = _mm_malloc(sizeof(*v) * n, 32);
    for (int i = 0; i < n; i++)
        v[i] = i + 1.0;

    double t = wtime();
    double res = sum_avx(v, n);
    t = wtime() - t;

    double valid_result = (1.0 + (double)n) * 0.5 * n;
    printf("Result (vectorized): %.6f err = %f\n", res, fabsf(valid_result - res));
    printf("Elapsed time (vectorized): %.6f sec.\n", t);
    free(v);
    return t;
}
```

Векторная версия: AVX (double)

```
#include <immintrin.h>
double sum_avx(double * restrict v, int n)
{
    __m256d *vv = (__m256d *)v;
    int k = n / 4;
    __m256d sumv = _mm256_setzero_pd();
    for (int i = 0; i < k; i++) {
        sumv = _mm256_add_pd(sumv, vv[i]);
    }

    // Compute s = sumv[0] + sumv[1] + sumv[2] + sumv[3]
    // AVX _mm256_hadd_pd:
    //   _mm256_hadd_pd(a, a) => a = [a3 + a2 | a3 + a2 | a1 + a0 | a1 + a0]
    sumv = _mm256_hadd_pd(sumv, sumv);
    // Permute high and low 128 bits of sumv: [a1 + a0 | a1 + a0 | a3 + a2 | a3 + a2]
    __m256d sumv_permuted = _mm256_permute2f128_pd(sumv, sumv, 1);
    // sumv = [a1 + a0 + a3 + a2 | --//-- | ...]
    sumv = _mm256_add_pd(sumv_permuted, sumv);

    double t[4] __attribute__((aligned(16)));
    _mm256_store_pd(t, sumv);
    double s = t[0]; //double s = t[0] + t[1] + t[2] + t[3];
    for (int i = k * 4; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
}
```

Векторная версия: AVX (double)

```
#include <immintrin.h>
double sum_avx(double * restrict v, int n)
{
    __m256d *vv = (__m256d *)v;
    int k = n / 4;
    __m256d sumv = _mm256_setzero_pd();
    for (int i = 0; i < k; i++) {
        sumv = _mm256_add_pd(sumv, vv[i]);
    }
```

```
    // Compute s = sumv[0] + sumv[1] + sumv[2] + sumv[3]
    // AVX _mm256_hadd_pd:
    //   _mm256_hadd_pd(a, a) => a = [a3 + a2 | a3 + a2 | a1 + a0 | a1 + a0]
    sumv = _mm256_hadd_pd(sumv, sumv);
    // Permute high and low 128 bits of sumv: [a1 + a0 | a1 + a0 | a3 + a2 | a3 + a2]
    __m256d sumv_permuted = _mm256_permute2f128_pd(sumv, sumv, 1);
    // sumv = [a1 + a0 + a3 + a2 | --//-- | ...]
    sumv = _mm256_add_pd(sumv_permuted, sumv);
```

```
    double t[4] __attribute__((aligned (16)));
    _mm256_store_pd(t, sumv);
    double s = t[0]; //double s = t[0] + t[1] + t[2]
    for (int i = k * 4; i < n; i++)
        s += v[i];
    return s;
```

```
}
```

```
# Intel Core i5-3320M - Ivy Bridge (Sandy Bridge shrink)
Reduction: n = 1000003
Result (scalar): 500003500006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (scalar): 0.001061 sec.
Result (vectorized): 500003500006.000000 err = 0.000000
Elapsed time (vectorized): 0.000519 sec.
Speedup: 2.04
```

Задание

- Векторизовать вычисление скалярного произведения векторов (dot product)
- Шаблон находится в каталоге `_dot_product_task`

```
float sdot(float *x, float *y, int n)
{
    float s = 0;
    for (int i = 0; i < n; i++)
        s += x[i] * y[i];
    return s;
}
```