27 SIMD: 如何加速矩阵乘法?

上一讲里呢,我进一步为你讲解了 CPU 里的"黑科技",分别是超标量(Superscalar)技术和超长指令字(VLIW)技术。

超标量 (Superscalar) 技术能够让取指令以及指令译码也并行进行;在编译的过程,超长指令字 (VLIW) 技术可以搞定指令先后的依赖关系,使得一次可以取一个指令包。

不过,CPU 里的各种神奇的优化我们还远远没有说完。这一讲里,我就带你一起来看看,专栏里最后两个提升 CPU 性能的架构设计。它们分别是,你应该常常听说过的**超线程** (Hyper-Threading) 技术,以及可能没有那么熟悉的**单指令多数据流**(SIMD) 技术。

超线程: Intel 多卖给你的那一倍 CPU

不知道你是不是还记得,在第 21 讲,我给你介绍了 Intel 是怎么在 Pentium 4 处理器上遭遇重大失败的。如果不太记得的话,你可以回过头去回顾一下。

那时我和你说过,Pentium 4 失败的一个重要原因,就是它的 CPU 的流水线级数太深了。早期的 Pentium 4 的流水线深度高达 20 级,而后期的代号为 Prescott 的 Pentium 4 的流水线级数,更是到了 31 级。超长的流水线,使得之前我们讲的很多解决"冒险"、提升并发的方案都用不上。

因为这些解决"冒险"、提升并发的方案,本质上都是一种**指令级并行**(Instruction-level parallelism,简称 IPL)的技术方案。换句话说就是,CPU 想要在同一个时间,去并行地执行两条指令。而这两条指令呢,原本在我们的代码里,是有先后顺序的。无论是我们在流水线里面讲到的流水线架构、分支预测以及乱序执行,还是我们在上一讲说的超标量和超长指令字,都是想要通过同一时间执行两条指令,来提升 CPU 的吞吐率。

然而在 Pentium 4 这个 CPU 上,这些方法都可能因为流水线太深,而起不到效果。我之前讲过,更深的流水线意味着同时在流水线里面的指令就多,相互的依赖关系就多。于是,很多时候我们不得不把流水线停顿下来,插入很多 NOP 操作,来解决这些依赖带来的"冒险"问题。

不知道是不是因为当时面临的竞争太激烈了,为了让 Pentium 4 的 CPU 在性能上更有竞争

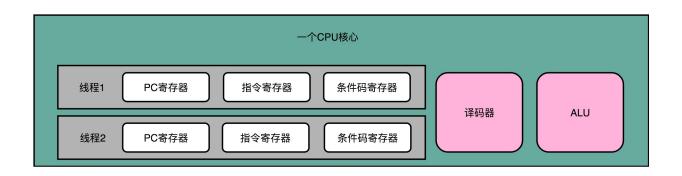
力一点,2002 年底,Intel 在的 3.06GHz 主频的 Pentium 4 CPU 上,第一次引入了**超线程** (Hyper-Threading)技术。

什么是超线程技术呢? Intel 想,既然 CPU 同时运行那些在代码层面有前后依赖关系的指令,会遇到各种冒险问题,我们不如去找一些和这些指令完全独立,没有依赖关系的指令来运行好了。那么,这样的指令哪里来呢? 自然同时运行在另外一个程序里了。

你所用的计算机,其实同一个时间可以运行很多个程序。比如,我现在一边在浏览器里写这篇文章,后台同样运行着一个 Python 脚本程序。而这两个程序,是完全相互独立的。它们两个的指令完全并行运行,而不会产生依赖问题带来的"冒险"。

然而这个时候,你可能就会觉得奇怪了,这么做似乎不需要什么新技术呀。现在我们用的 CPU 都是多核的,本来就可以用多个不同的 CPU 核心,去运行不同的任务。即使当时的 Pentium 4 是单核的,我们的计算机本来也能同时运行多个进程,或者多个线程。这个超线程技术有什么特别的用处呢?

无论是上面说的多个 CPU 核心运行不同的程序,还是在单个 CPU 核心里面切换运行不同 线程的任务,在同一时间点上,一个物理的 CPU 核心只会运行一个线程的指令,所以其实 我们并没有真正地做到指令的并行运行。



超线程可不是这样。超线程的 CPU,其实是把一个物理层面 CPU 核心,"伪装"成两个逻辑层面的 CPU 核心。这个 CPU,会在硬件层面增加很多电路,使得我们可以在一个 CPU 核心内部,维护两个不同线程的指令的状态信息。

比如,在一个物理 CPU 核心内部,会有双份的 PC 寄存器、指令寄存器乃至条件码寄存器。这样,这个 CPU 核心就可以维护两条并行的指令的状态。在外面看起来,似乎有两个逻辑层面的 CPU 在同时运行。所以,超线程技术一般也被叫作**同时多线程**(Simultaneous Multi-Threading,简称 SMT)技术**。**

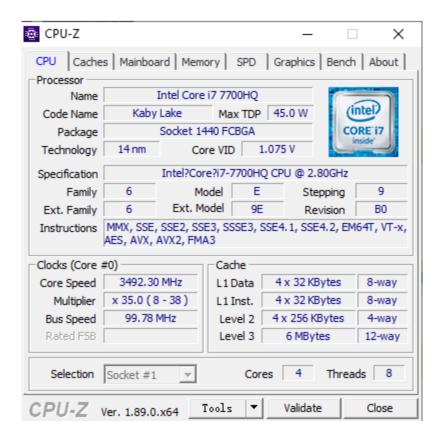
不过,在 CPU 的其他功能组件上,Intel 可不会提供双份。无论是指令译码器还是 ALU,一个 CPU 核心仍然只有一份。因为超线程并不是真的去同时运行两个指令,那就真的变成物理多核了。超线程的目的,是在一个线程 A 的指令,在流水线里停顿的时候,让另外一

个线程去执行指令。因为这个时候,CPU 的译码器和 ALU 就空出来了,那么另外一个线程 B, 就可以拿来干自己需要的事情。这个线程 B 可没有对于线程 A 里面指令的关联和依赖。

这样, CPU 通过很小的代价, 就能实现"同时"运行多个线程的效果。通常我们只要在 CPU 核心的添加 10% 左右的逻辑功能, 增加可以忽略不计的晶体管数量, 就能做到这一点。

不过,你也看到了,我们并没有增加真的功能单元。所以超线程只在特定的应用场景下效果比较好。一般是在那些各个线程"等待"时间比较长的应用场景下。比如,我们需要应对很多请求的数据库应用,就很适合使用超线程。各个指令都要等待访问内存数据,但是并不需要做太多计算。

于是,我们就可以利用好超线程。我们的 CPU 计算并没有跑满,但是往往当前的指令要停顿在流水线上,等待内存里面的数据返回。这个时候,让 CPU 里的各个功能单元,去处理另外一个数据库连接的查询请求就是一个很好的应用案例。



我的移动工作站的 CPU 信息

我这里放了一张我的电脑里运行 CPU-Z 的截图。你可以看到,在右下角里,我的 CPU 的 Cores,被标明了是 4,而 Threads,则是 8。这说明我手头的这个 CPU,只有 4 个物理的 CPU 核心,也就是所谓的 4 核 CPU。但是在逻辑层面,它"装作"有 8 个 CPU 核心,可以 利用超线程技术,来同时运行 8 条指令。如果你用的是 Windows,可以去下载安装一个

CPU-Z来看看你手头的 CPU 里面对应的参数。

SIMD: 如何加速矩阵乘法?

在上面的 CPU 信息的图里面,你会看到,中间有一组信息叫作 Instructions,里面写了有 MMX、SSE 等等。这些信息就是这个 CPU 所支持的指令集。这里的 MMX 和 SSE 的指令集,也就引出了我要给你讲的最后一个提升 CPU 性能的技术方案,SIMD,中文叫作单指 令多数据流(Single Instruction Multiple Data)。

我们先来体会一下 SIMD 的性能到底怎么样。下面是两段示例程序,一段呢,是通过循环的方式,给一个 list 里面的每一个数加 1。另一段呢,是实现相同的功能,但是直接调用 NumPy 这个库的 add 方法。在统计两段程序的性能的时候,我直接调用了 Python 里面的 timeit 的库。

```
$ python
>>> import numpy as np
>>> import timeit
>>> a = list(range(1000))
>>> b = np.array(range(1000))
>>> timeit.timeit("[i + 1 for i in a]", setup="from __main__ import a", number=1000
32.8280030999993
>>> timeit.timeit("np.add(1, b)", setup="from __main__ import np, b", number=100000
0.978788999997788
>>>
```

从两段程序的输出结果来看,你会发现,两个功能相同的代码性能有着巨大的差异,足足差出了 30 多倍。也难怪所有用 Python 讲解数据科学的教程里,往往在一开始就告诉你不要使用循环,而要把所有的计算都向量化(Vectorize)。

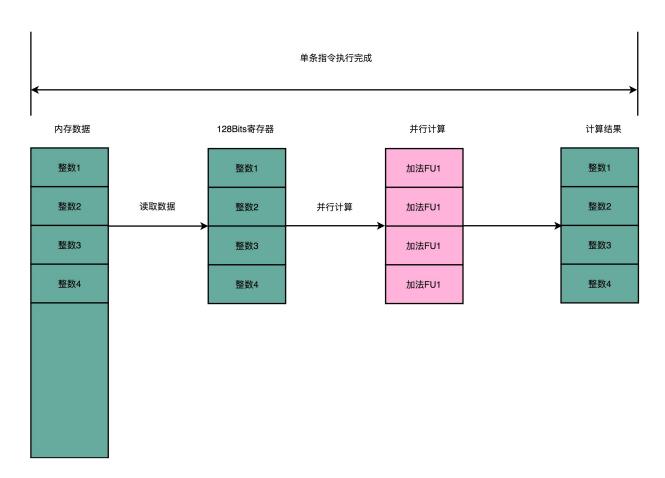
有些同学可能会猜测,是不是因为 Python 是一门解释性的语言,所以这个性能差异会那么大。第一段程序的循环的每一次操作都需要 Python 解释器来执行,而第二段的函数调用是一次调用编译好的原生代码,所以才会那么快。如果你这么想,不妨试试直接用 C 语言实现一下 1000 个元素的数组里面的每个数加 1。你会发现,即使是 C 语言编译出来的代码,还是远远低于 NumPy。原因就是,NumPy 直接用到了 SIMD 指令,能够并行进行向量的操作。

而前面使用循环来一步一步计算的算法呢,一般被称为SISD,也就是**单指令单数据** (Single Instruction Single Data) 的处理方式。如果你手头的是一个多核 CPU 呢,那么它同时处理多个指令的方式可以叫作**MIMD**,也就是**多指令多数据**(Multiple Instruction Multiple Dataa)。

为什么 SIMD 指令能快那么多呢?这是因为,SIMD 在获取数据和执行指令的时候,都做到

了并行。一方面,在从内存里面读取数据的时候,SIMD 是一次性读取多个数据。

就以我们上面的程序为例,数组里面的每一项都是一个 integer,也就是需要 4 Bytes 的内存空间。Intel 在引入 SSE 指令集的时候,在 CPU 里面添上了 8 个 128 Bits 的寄存器。128 Bits 也就是 16 Bytes ,也就是说,一个寄存器一次性可以加载 4 个整数。比起循环分别读取 4 次对应的数据,时间就省下来了。



在数据读取到了之后,在指令的执行层面,SIMD 也是可以并行进行的。4 个整数各自加 1,互相之前完全没有依赖,也就没有冒险问题需要处理。只要 CPU 里有足够多的功能单 元,能够同时进行这些计算,这个加法就是 4 路同时并行的,自然也省下了时间。

所以,对于那些在计算层面存在大量"数据并行"(Data Parallelism)的计算中,使用 SIMD 是一个很划算的办法。在这个大量的"数据并行",其实通常就是实践当中的向量运算或者矩阵运算。在实际的程序开发过程中,过去通常是在进行图片、视频、音频的处理。最近几年则通常是在进行各种机器学习算法的计算。

而基于 SIMD 的向量计算指令,也正是在 Intel 发布 Pentium 处理器的时候,被引入的指令集。当时的指令集叫作MMX,也就是 Matrix Math eXtensions 的缩写,中文名字就是矩阵数学扩展。而 Pentium 处理器,也是 CPU 第一次有能力进行多媒体处理。这也正是拜 SIMD 和 MMX 所赐。

从 Pentium 时代开始,我们能在电脑上听 MP3、看 VCD 了,而不用专门去买一块"声霸卡"或者"显霸卡"了。没错,在那之前,在电脑上看 VCD,是需要专门买能够解码 VCD 的硬件插到电脑上去的。而到了今天,通过 GPU 快速发展起来的深度学习技术,也一样受益于SIMD 这样的指令级并行方案,在后面讲解 GPU 的时候,我们还会遇到它。

总结延伸

这一讲,我们讲完了超线程和 SIMD 这两个 CPU 的"并行计算"方案。超线程,其实是一个"线程级并行"的解决方案。它通过让一个物理 CPU 核心,"装作"两个逻辑层面的 CPU 核心,使得 CPU 可以同时运行两个不同线程的指令。虽然,这样的运行仍然有着种种的限制,很多场景下超线程并不一定能带来 CPU 的性能提升。但是 Intel 通过超线程,让使用者有了"占到便宜"的感觉。同样的 4 核心的 CPU,在有些情况下能够发挥出 8 核心 CPU 的作用。而超线程在今天,也已经成为 Intel CPU 的标配了。

而 SIMD 技术,则是一种"指令级并行"的加速方案,或者我们可以说,它是一种"数据并行"的加速方案。在处理向量计算的情况下,同一个向量的不同维度之间的计算是相互独立的。而我们的 CPU 里的寄存器,又能放得下多条数据。于是,我们可以一次性取出多条数据,交给 CPU 并行计算。

正是 SIMD 技术的出现,使得我们在 Pentium 时代的个人 PC,开始有了多媒体运算的能力。可以说,Intel 的 MMX、SSE 指令集,和微软的 Windows 95 这样的图形界面操作系统,推动了 PC 快速进入家庭的历史进程。

推荐阅读

如果你想看一看 Intel CPU 里面的 SIMD 指令具体长什么样,可以去读一读《计算机组成与设计:硬件/软件接口》的 3.7 章节。