

Curso: Herramientas Informáticas para  
Computación Científica

Parte: Librerías Matriciales

Sesión: Visión general+BLAS

---

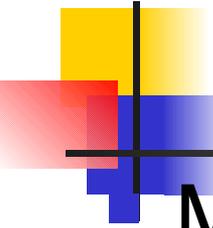
Domingo Giménez

Departamento de Informática y Sistemas

Universidad de Murcia, Spain

[dis.um.es/~domingo](http://dis.um.es/~domingo)

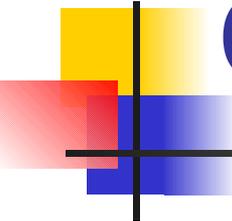




# Motivación

---

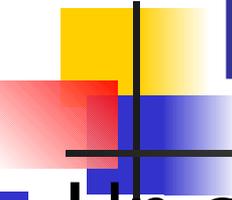
- Muchas veces son la parte más costosa de la resolución del problema
- Identificar rutinas básicas, estandarizar e implementarlas eficientemente:
  - Programación más fácil
  - Mantenimiento más fácil
  - Más portabilidad
  - Códigos eficientes



# Contenido y organización

---

- Planificado:
  - Visión histórica de las librerías matriciales de álgebra numérica (1Te+0 Pr+0 Tr)
  - BLAS (1.5 Te+1 Pr+3 Tr)
- Organización:
  - Visión general+BLAS: 1.5 horas
  - Prácticas ¿cuándo? ¿cómo?: 1 hora
  - Trabajo sin evaluar



# Motivación

---

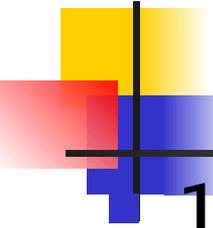
- Un gran número de aplicaciones científicas hacen uso del Álgebra Lineal Numérica:
  - Simulación de moléculas (problemas de valores propios)
  - Econometría (mínimos cuadrados)
  - Radiosidad (sistemas de ecuaciones)
  - Búsqueda de información en web (valores propios)
  - Reconocimiento de caras (valores propios)

# Antecedentes históricos

(fuente: Enrique Quintana, UJI)

---

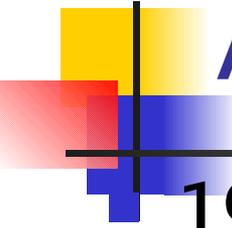
- 1962: Rounding errors, Wilkinson
- 1965: The Algebraic Eigenvalue Problem, Wilkinson. SVD, Golub, Kahan
- 1969: **NAG**. Strassen
- 1972: **EISPACK**. QZ, Moler, Stewart
- 1973: **BLAS** Report
- 1974: Inicio **LINPACK**. Inicio **BLAS-1**



# Antecedentes históricos (II)

---

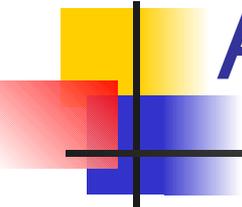
- 1975: ACM Trans. on Math. Soft.
- 1976: **EISPACK 2.0**
- 1977: Fortran 77
- 1978: **LINPACK. BLAS1** en ACM TOMS
- 1980: DV, Cupper
- 1982: Inicio **BLAS-2**
- 1983: Matrix computation, Golub, Van  
Loan



# Antecedentes históricos (III)

---

- 1984: **EISPACK 3.0.** netlib
- 1986: Inicio **BLAS3**
- 1987: Inicio **LAPACK.** **BLAS2** en ACM TOMS
- 1990: **BLAS3** en ACM TOMS.
- 1992: **LAPACK 3.0**
- 1993: Inicio **ScaLAPCK**

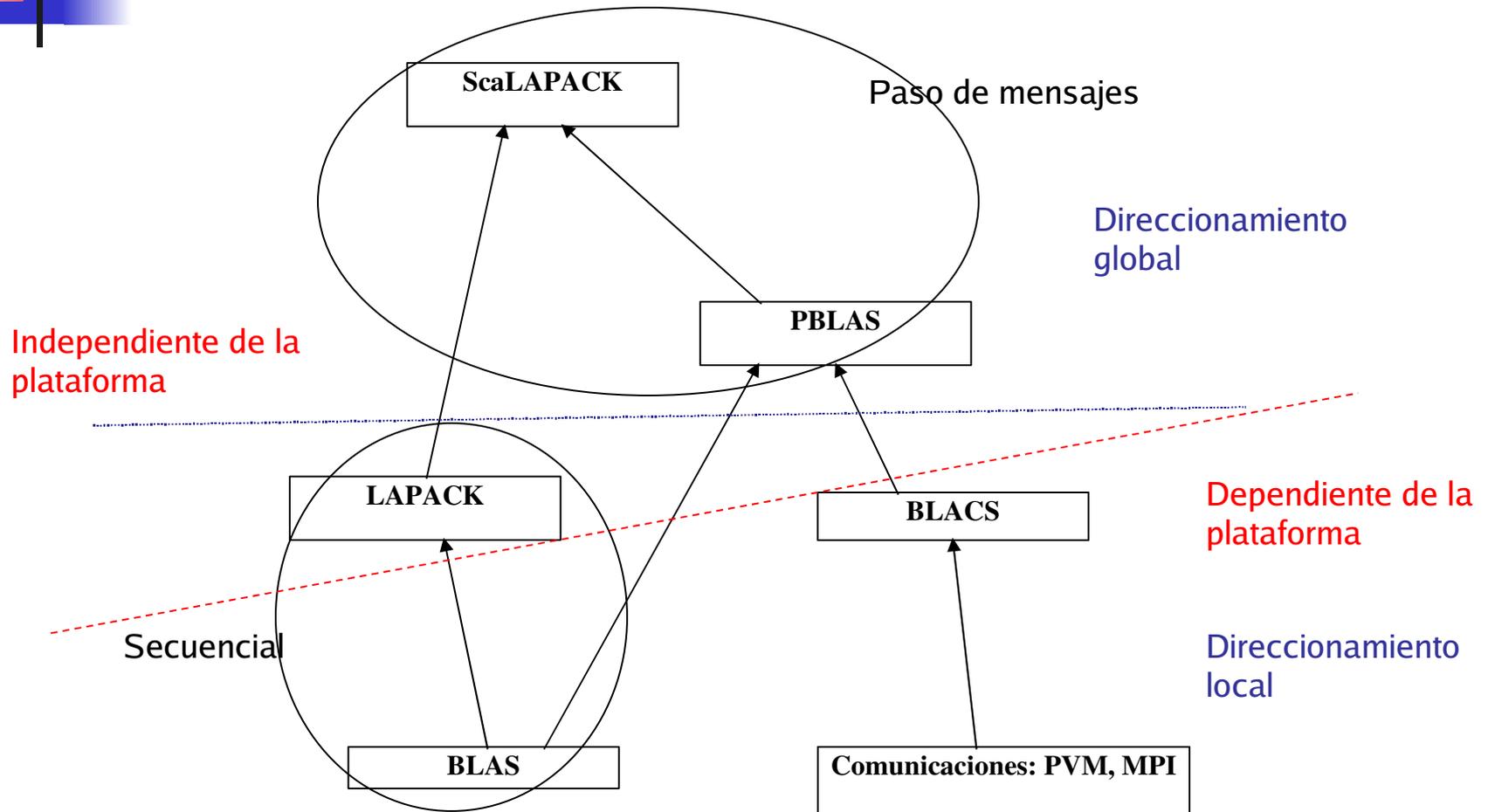


# Antecedentes históricos (IV)

---

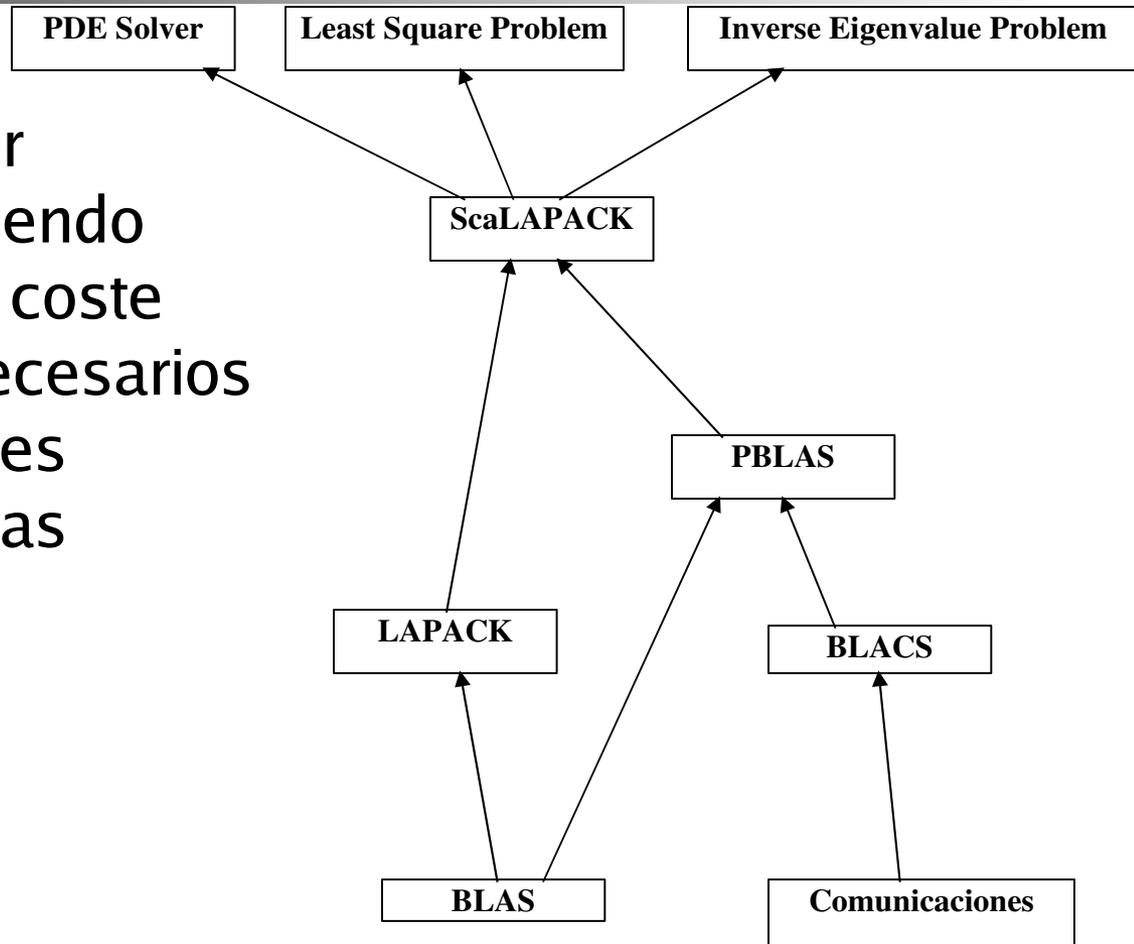
- 1996: **ARPACK**
- 1997: **ScaLAPACK. PLAPACK**
- 1999: **SuperLU**
- 2000: **ATLAS. PETSc**
- 2002: **GotoBLAS**
- ....: **FLAME. LAPACK07. HeteroScaLAPACK**

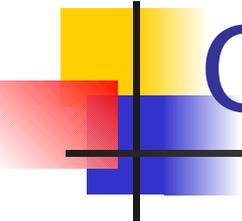
# Jerarquía de librerías



# Jerarquía de librerías

Se puede extender la jerarquía resolviendo problemas de alto coste computacional. Necesarios algoritmos eficientes en sistemas de altas prestaciones.



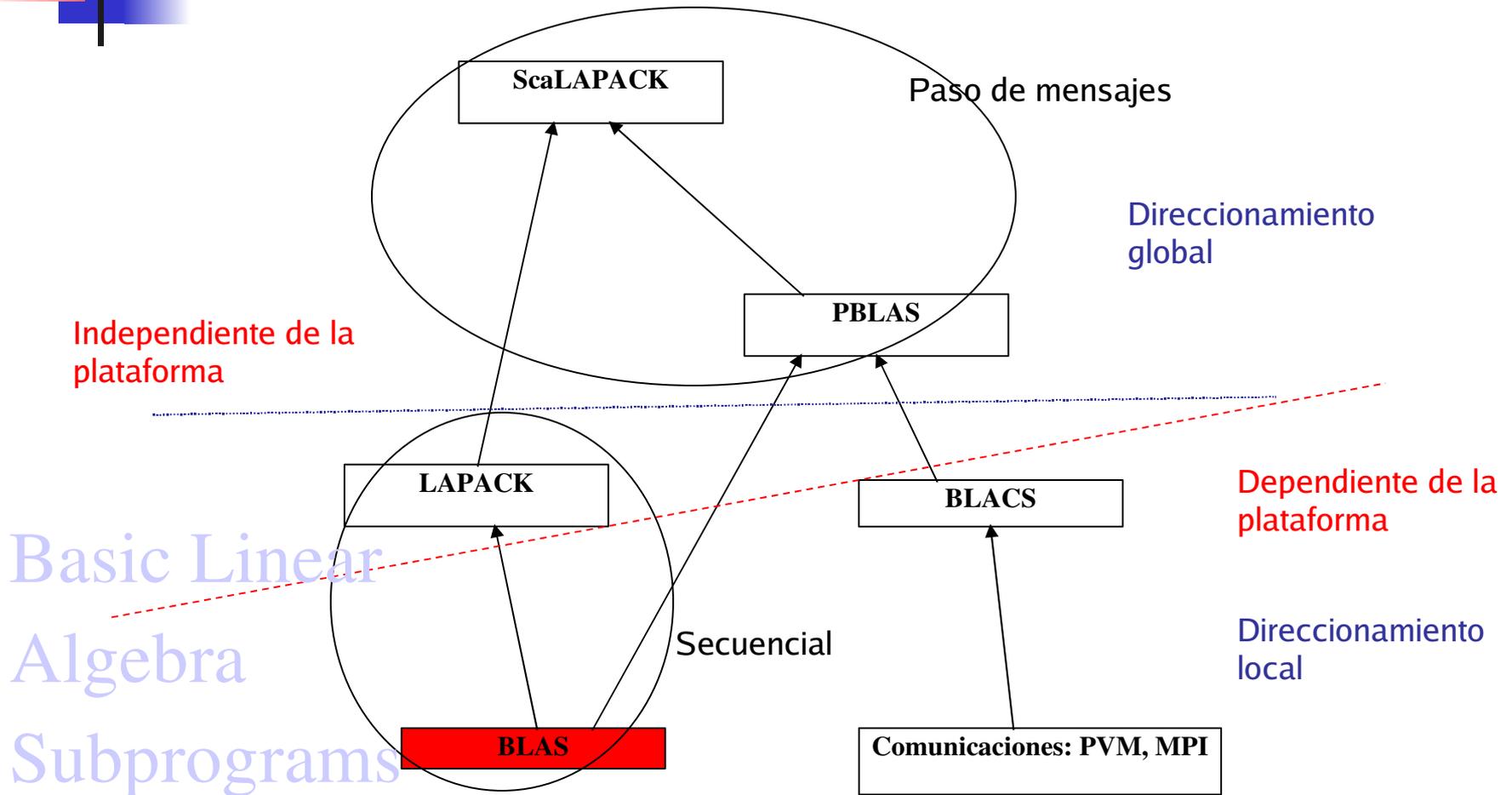


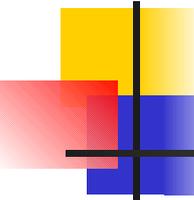
# Obteniendo información

---

- [www.netlib.org/liblist.html](http://www.netlib.org/liblist.html)
- [www.netlib.org/utk/people/JackDongarra](http://www.netlib.org/utk/people/JackDongarra)

# BLAS

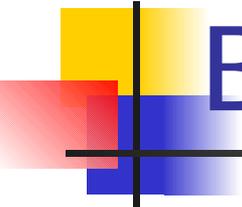




# BLAS

---

- Conjunto de rutinas para realizar operaciones básicas sobre vectores y matrices
  - C. L. Lawson, R. J. Hanson, D. Kincaid, and F. T. Krogh, *Basic Linear Algebra Subprograms for FORTRAN usage*, *ACM Trans. Math. Soft.*, 5 (1979), pp. 308--323.
  - J. J. Dongarra, J. Du Croz, S. Hammarling, and R. J. Hanson, *An extended set of FORTRAN Basic Linear Algebra Subprograms*, *ACM Trans. Math. Soft.*, 14 (1988), pp. 1--17.
  - J. J. Dongarra, J. Du Croz, I. S. Duff, and S. Hammarling, *A set of Level 3 Basic Linear Algebra Subprograms*, *ACM Trans. Math. Soft.*, 16 (1990), pp. 1--17.



# BLAS

---

- Hay tres niveles según el coste computacional:

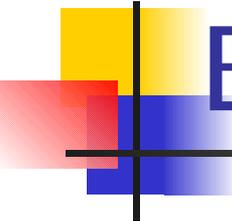
|       | tipo<br>operaciones | coste<br>computacional | accesos<br>memoria |
|-------|---------------------|------------------------|--------------------|
| BLAS1 | vector-vector       | $n$                    | $n$                |
| BLAS2 | matriz-vector       | $n^2$                  | $n^2$              |
| BLAS3 | matriz-matriz       | $n^3$                  | $n^2$              |



# BLAS 1

## Level 1 BLAS

|                       | dim    | scalar             | vector             | vector | scalars       | 5-element array |
|-----------------------|--------|--------------------|--------------------|--------|---------------|-----------------|
| SUBROUTINE xROTG (    |        |                    |                    |        | A, B, C, S )  |                 |
| SUBROUTINE xROTMG(    |        |                    |                    |        | D1, D2, A, B, | PARAM )         |
| SUBROUTINE xROT ( N,  |        |                    | X, INCX, Y, INCY,  |        | C, S )        |                 |
| SUBROUTINE xROTM ( N, |        |                    | X, INCX, Y, INCY,  |        |               | PARAM )         |
| SUBROUTINE xSWAP ( N, |        |                    | X, INCX, Y, INCY ) |        |               |                 |
| SUBROUTINE xSCAL ( N, | ALPHA, | X, INCX )          |                    |        |               |                 |
| SUBROUTINE xCOPY ( N, |        | X, INCX, Y, INCY ) |                    |        |               |                 |
| SUBROUTINE xAXPY ( N, | ALPHA, | X, INCX, Y, INCY ) |                    |        |               |                 |
| FUNCTION xDOT ( N,    |        | X, INCX, Y, INCY ) |                    |        |               |                 |
| FUNCTION xDOTU ( N,   |        | X, INCX, Y, INCY ) |                    |        |               |                 |
| FUNCTION xDOTC ( N,   |        | X, INCX, Y, INCY ) |                    |        |               |                 |
| FUNCTION xxDOT ( N,   | ALPHA, | X, INCX, Y, INCY ) |                    |        |               |                 |
| FUNCTION xNRM2 ( N,   |        | X, INCX )          |                    |        |               |                 |
| FUNCTION xASUM ( N,   |        | X, INCX )          |                    |        |               |                 |
| FUNCTION IxAMAX( N,   |        | X, INCX )          |                    |        |               |                 |



# BLAS 1

---

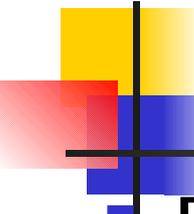
Ejemplo `ddot.f`

Calcula el producto escalar de dos vectores

Se puede usar en el bucle más interno de la multiplicación de matrices, dando lugar a una **versión con BLAS 1**

Se compila con (depende del sistema)

```
cc -O3 mb1.c -lblas -lm
```



# BLAS

---

## Formato de las funciones (niveles 2 y 3): **XYZZZZ**

**X**: Tipo de datos:

S : REAL

D : DOUBLE PRECISION

C : COMPLEX

Z : DOUBLE COMPLEX

**YY**: Tipo de matriz:

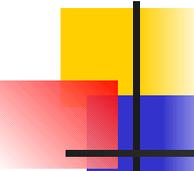
GE, GB, HE, HP, HB, SY, SP, TR, TP, TB

**ZZZ**: Operación:

MV: productor matriz vector

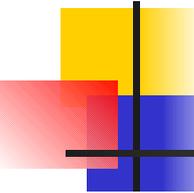
MM: producto matriz matriz

SV: sistema de ecuaciones ...



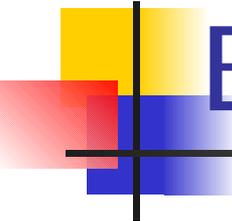
# BLAS 2

|       | options              | dim   | b-width | scalar | matrix  | vector    | scalar | vector    |
|-------|----------------------|-------|---------|--------|---------|-----------|--------|-----------|
| xGEMV | ( TRANS,             | M, N, |         | ALPHA, | A, LDA, | X, INCX,  | BETA,  | Y, INCY ) |
| xGEMV | ( TRANS,             | M, N, | KL, KU, | ALPHA, | A, LDA, | X, INCX,  | BETA,  | Y, INCY ) |
| xHEMV | ( UPLO,              | N,    |         | ALPHA, | A, LDA, | X, INCX,  | BETA,  | Y, INCY ) |
| xHEMV | ( UPLO,              | N, K, |         | ALPHA, | A, LDA, | X, INCX,  | BETA,  | Y, INCY ) |
| xHPMV | ( UPLO,              | N,    |         | ALPHA, | AP,     | X, INCX,  | BETA,  | Y, INCY ) |
| xSYMV | ( UPLO,              | N,    |         | ALPHA, | A, LDA, | X, INCX,  | BETA,  | Y, INCY ) |
| xSEMV | ( UPLO,              | N, K, |         | ALPHA, | A, LDA, | X, INCX,  | BETA,  | Y, INCY ) |
| xSPMV | ( UPLO,              | N,    |         | ALPHA, | AP,     | X, INCX,  | BETA,  | Y, INCY ) |
| xTRMV | ( UPLO, TRANS, DIAG, | N,    |         |        | A, LDA, | X, INCX ) |        |           |
| xTRMV | ( UPLO, TRANS, DIAG, | N, K, |         |        | A, LDA, | X, INCX ) |        |           |
| xTPMV | ( UPLO, TRANS, DIAG, | N,    |         |        | AP,     | X, INCX ) |        |           |
| xTRSV | ( UPLO, TRANS, DIAG, | N,    |         |        | A, LDA, | X, INCX ) |        |           |
| xTRSV | ( UPLO, TRANS, DIAG, | N, K, |         |        | A, LDA, | X, INCX ) |        |           |
| xTPSV | ( UPLO, TRANS, DIAG, | N,    |         |        | AP,     | X, INCX ) |        |           |



# BLAS 2

|       | options | dim   | scalar | vector   | vector   | matrix   |
|-------|---------|-------|--------|----------|----------|----------|
| xHER  | (       | M, N, | ALPHA, | X, INDX, | Y, INCY, | A, LDA ) |
| xHERU | (       | M, N, | ALPHA, | X, INDX, | Y, INCY, | A, LDA ) |
| xHERC | (       | M, N, | ALPHA, | X, INDX, | Y, INCY, | A, LDA ) |
| xHER  | ( UPLO, | N,    | ALPHA, | X, INDX, |          | A, LDA ) |
| xHPR  | ( UPLO, | N,    | ALPHA, | X, INDX, |          | AP )     |
| xHER2 | ( UPLO, | N,    | ALPHA, | X, INDX, | Y, INCY, | A, LDA ) |
| xHPR2 | ( UPLO, | N,    | ALPHA, | X, INDX, | Y, INCY, | AP )     |
| xsyr  | ( UPLO, | N,    | ALPHA, | X, INDX, |          | A, LDA ) |
| xspr  | ( UPLO, | N,    | ALPHA, | X, INDX, |          | AP )     |
| xsyr2 | ( UPLO, | N,    | ALPHA, | X, INDX, | Y, INCY, | A, LDA ) |
| xspr2 | ( UPLO, | N,    | ALPHA, | X, INDX, | Y, INCY, | AP )     |



# BLAS 2

---

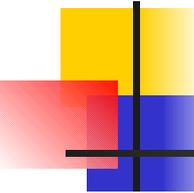
Ejemplo `dgemv.f`

Calcula el producto de una matriz por un vector

Se puede usar en el segundo bucle en la multiplicación de matrices, dando lugar a una `versión con BLAS 2`

Se compila con

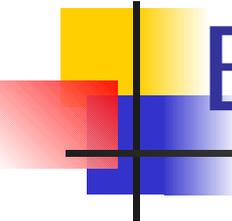
```
cc -O3 mb2.c -lblas -lm
```



# BLAS 3

---

|        | options               | dim         | scalar    | matrix  | matrix        | scalar | matrix |
|--------|-----------------------|-------------|-----------|---------|---------------|--------|--------|
| xGEMM  | ( TRANSA, TRANSB,     | M, N, K,    | ALPHA, A, | LDA, B, | LDB, BETA, C, | LDC )  |        |
| xSYMM  | ( SIDE, UPLO,         | M, N,       | ALPHA, A, | LDA, B, | LDB, BETA, C, | LDC )  |        |
| xHEMM  | ( SIDE, UPLO,         | M, N,       | ALPHA, A, | LDA, B, | LDB, BETA, C, | LDC )  |        |
| xSTRK  | ( UPLO, TRANS,        | M, K,       | ALPHA, A, | LDA,    | BETA, C,      | LDC )  |        |
| xHERK  | ( UPLO, TRANS,        | M, K,       | ALPHA, A, | LDA,    | BETA, C,      | LDC )  |        |
| xSTRCK | ( UPLO, TRANS,        | M, K,       | ALPHA, A, | LDA, B, | LDB, BETA, C, | LDC )  |        |
| xHERCK | ( UPLO, TRANS,        | M, K,       | ALPHA, A, | LDA, B, | LDB, BETA, C, | LDC )  |        |
| xTRMM  | ( SIDE, UPLO, TRANSA, | DIAG, M, N, | ALPHA, A, | LDA, B, | LDB )         |        |        |
| xTRSM  | ( SIDE, UPLO, TRANSA, | DIAG, M, N, | ALPHA, A, | LDA, B, | LDB )         |        |        |



# BLAS 3

---

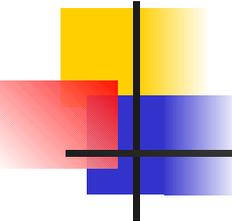
Ejemplo `dgemv.f`

Calcula el producto de una matriz por un vector

Se puede hacer la multiplicación de matrices llamando directamente a la rutina correspondiente de BLAS

Se compila con

```
icc -O3 mb3.c -lgslcblas -lm
```

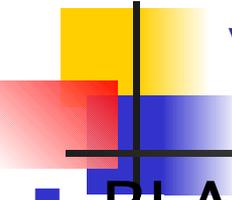


# BLAS

---

- Multiplicación de matrices (en kefren, pentium 4):

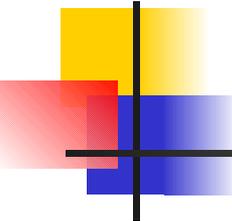
| <b>Método\tam</b> | <b>200</b>    | <b>400</b>    | <b>800</b>    |
|-------------------|---------------|---------------|---------------|
| <b>Normal</b>     | <b>0.0463</b> | <b>0.7854</b> | <b>7.9686</b> |
| <b>Blas 1</b>     | <b>0.0536</b> | <b>0.8190</b> | <b>8.2311</b> |
| <b>Blas 2</b>     | <b>0.0501</b> | <b>0.5861</b> | <b>5.9997</b> |
| <b>Blas 3</b>     | <b>0.0429</b> | <b>0.6115</b> | <b>4.7252</b> |



# Versiones de BLAS

---

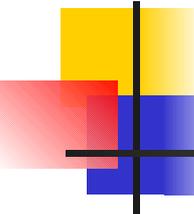
- BLAS de referencia: los códigos, los podemos instalar en nuestro sistema, no optimizado
- BLAS propietario: optimizado? por los vendedores para su sistema
  - Intel: mkl
  - IBM: ESSP ...
- GotoBLAS: muy eficiente en algunos casos
- Multitud de versiones libres optimizadas? para distintos sistemas, precompiladas
- ATLAS se autoinstala



# Algoritmos por bloques (en CAP)

---

- En vez de realizar operaciones elemento a elemento realizarlas con bloques de elementos: menos accesos a memoria para el mismo volumen de computación  $\Rightarrow$  menor tiempo de ejecución.
- Técnica utilizada desde los años 80. Se utiliza en **LAPACK** para obtener rutinas eficientes independientemente del sistema donde se ejecuten.



# BLAS - Práctica

---

- Una sesión presencial (¿cuándo? ¿dónde?) para explicar el uso de BLAS.
- Versiones de multiplicación de matrices, normal, con BLAS 1, 2 y 3:
  - Compilarlas lincando con BLAS
  - Ejecutar y comprobar el resultado, determinando la forma de llamar a las matrices en BLAS
  - Comparar tiempos de ejecución para las distintas versiones variando el tamaño de las matrices