

Programmierkonzepte in der Physikalischen Chemie

21. Codeoptimierung

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg



**UNI
FREIBURG**

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Wintersemester 2017/18



Zentrale Aspekte

- ❏ Laufzeit und Ressourcenverbrauch sind in den seltensten Fällen ein ernsthaftes Problem.
- ❏ Code sollte nur dann optimiert werden, wenn es unumgänglich ist.
- ❏ Voraussetzungen für erfolgreiche Optimierung sind Messbarkeit, Tests und Versionsverwaltung.
- ❏ Optimierungsstrategien hängen oft von Architektur, Programmiersprache und Compiler ab.
- ❏ Optimierungen haben häufig (ungewollt) Einfluss auf die Funktionalität.

Motivation

Voraussetzungen

Strategien

Zusammenhang mit „Clean Code“

Warum Code optimieren?

Es gibt wenige wirklich gute Gründe.



“ *...the first principle of optimization is don't.*

– Kernighan und Pike

Zwei Motivationen für Codeoptimierung

- ▶ Steigerung der Ausführungsgeschwindigkeit
- ▶ Verringerung des Ressourcenverbrauchs (meist Speicher)

Meist sind beide Aspekte nicht von Belang.

- ▶ Hardware wird schneller und billiger.
- ▶ Compiler sind mittlerweile sehr gut.

- ▶ Anpassung komplexer Simulationen an Daten
 - iterativer Vorgang: viele Aufrufe der Simulationsfunktion
 - Laufzeit der Simulationsroutine ist entscheidend.
- ▶ Pulvermittlung in Simulationsprogrammen
 - Mittelung über Simulationen für viele Orientierungen
 - Punkte gleichmäßig auf einer Kugel zu verteilen ist schwer.
- ▶ quantenmechanische Behandlung vieler Teilchen
 - häufig mit innerem Produkt zweier Matrizen ($\otimes$) verbunden
 - Matrixdimensionen steigen quadratisch an: Speicherplatz!
- ☞ Die Lösung ist in allen Fällen meist keine Codeoptimierung, sondern eine intelligente Wahl von Algorithmen.

$$\mathcal{O}(g(n)) = \{f(n) \mid \exists c > 0 \exists n_0 \in \mathbb{N} \forall n \geq n_0 : f(n) \leq c \cdot g(n)\}$$

- ▶ $g(n)$ ist die obere asymptotische Schranke von $f(n)$.
- ▶ $\mathcal{O}(g(n))$ ist die Menge aller $f(n)$,
für die $g(n)$ eine asymptotische obere Schranke ist.

Anwendung in der Informatik

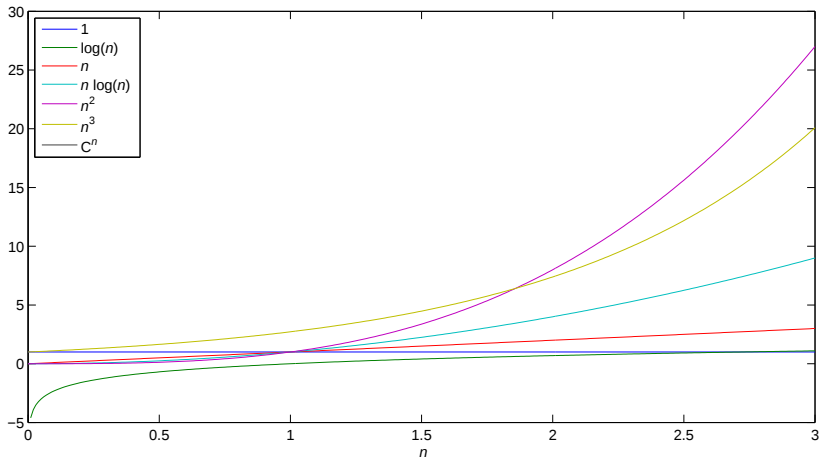
- ▶ gilt sowohl für Ausführungsgeschwindigkeit als auch für Ressourcenverbrauch (meist Speicher)
- ▶ gibt jeweils den „worst case“ (obere Grenze) an
- ▶ sagt nichts über die reale Geschwindigkeit eines Algorithmus für fixes n aus

Ordnung	typisches Beispiel
$\mathcal{O}(1)$	Zugriff auf Vektorelement
$\mathcal{O}(\log(n))$	Binärsuche
$\mathcal{O}(n)$	sequentielle Suche
$\mathcal{O}(n \log(n))$	Quicksort, Heapsort
$\mathcal{O}(n^2)$	Selectionsort
$\mathcal{O}(n^3)$	Multiplikation zweier $n \times n$ -Matrizen
$\mathcal{O}(C^n)$	Problem des Handlungsreisenden

- ➡ Häufig lässt sich $\mathcal{O}(n^2)$ zu $\mathcal{O}(n \log(n))$ reduzieren.
- ➡ Algorithmen mit $\mathcal{O}(n^2)$ Speicherbedarf sind problematisch.

Komplexität von Algorithmen

Grafische Repräsentation einzelner Ordnungen



Die Größe von n kann entscheidend sein.

Bevor man anfängt zu optimieren

Vier essentielle Voraussetzungen für Codeoptimierungen



“ *A fast program that gets the wrong answer doesn't save any time.*

– Kernighan und Pike

- ▶ funktionierender Code
- ▶ Tests mit ausreichender Testabdeckung
- ▶ Versionsverwaltung
- ▶ Messungen der Codegeschwindigkeit
- ☞ (fast) gleiche Voraussetzungen wie für Refactoring
- ☞ Erst Geschwindigkeit messen, (*nur*) dann optimieren.

- ▶ funktionierender Code
 - möglichst in einer Hochsprache entwickeln
 - Code sollte das gesamte System abbilden.
 - Optimierung ist oft auf Systemebene effektiver.
- ▶ Tests mit ausreichender Testabdeckung
 - Codeoptimierung führt oft zu subtilen Fehlern.
 - Nur automatisierte Tests können ausreichend sicherstellen, dass Code (immer noch) funktioniert.
 - Tests sollten nach jedem Optimierungsschritt durchlaufen.
- ▶ Versionsverwaltung
 - Codeoptimierung ist nie ein linearer Prozess.
 - Funktionierende Versionen des Codes dienen als Referenz.

“ *...intuition is a poor guide to where the bottlenecks are, even for one who knows the code in question intimately.*

– Eric S. Raymond

► Regeln zur Messung der Codegeschwindigkeit

- Werkzeuge verwenden (Profiler etc.)
- mehrfach messen (Streuung ist teilweise erheblich)
- Messergebnisse sauber mitdokumentieren (Logbuch!)

☞ Meist sind weniger als fünf Prozent des Codes für 90 Prozent der Ausführungszeit verantwortlich.

☞ Intuition weist meist vollständig in die Irre.

“ *The most effective way to optimize your code is to keep it small and simple.*

– Eric S. Raymond

- ▶ Problem mit konkreten Optimierungsstrategien:
 - von vielen Parametern abhängig
 - gelten jeweils nur für wenige Spezialfälle
- ▶ mögliche Abhängigkeiten – eine Auswahl:
 - Programmiersprache und Version
 - Compiler, dessen Flags und Version
 - verwendete Bibliotheken und deren Versionen
 - Architektur

- 1 bestehende Version sichern (VCS)
 - 2 Geschwindigkeit messen (Profiler o.ä.)
 - 3 Grund für schlechte Leistung herausfinden
 - 4 entdeckten Flaschenhals beheben (Refactoring)
 - 5 nach jedem Einzelschritt Geschwindigkeit messen
 - 6 wenn erfolglos: zurück zur gesicherten Vorversion
- ☞ Meist sind über die Hälfte der Versuche erfolglos.
 - ☞ (Erfolgreiche) Optimierung ist ein iterativer Prozess.
 - ☞ nur optimieren, wenn es wirklich angebracht ist
 - ☞ saubere Buchführung über erreichte Geschwindigkeiten

- ▶ **Compileroptimierungen verwenden**
 - Moderne Compiler bieten oft Optimierungsmöglichkeiten.
 - Optimierung durch Compiler ist oft besser als per Hand.
- ▶ **teure durch billige Berechnungen ersetzen**
 - abhängig von der jeweiligen Programmiersprache
 - Division ist meist „teurer“ als Multiplikation.
- ▶ **häufige Berechnungen nur einmal durchführen**
 - Bsp.: Berechnung eines festen Wertes in einer Schleife
 - Speicherplatz ist oft ausreichend vorhanden.
- ▶ **Werte vorberechnen**
 - Bsp.: langwierige Berechnungen fixer, oft genutzter Werte
 - Werte können ggf. aus einer Datei eingelesen werden.

- ▶ Reihenfolge verschachtelter Schleifen optimieren
 - Schleifeninitialisierung kostet Rechenzeit.
 - Innere Schleifen sollten häufiger laufen als äußere.
- ▶ Näherungen statt exakter Werte
 - Nicht immer ist die maximale Genauigkeit notwendig.
 - Genauigkeit korreliert direkt mit Speichergröße.
- ▶ Auslagern in maschinennähere Sprache
 - setzt Kenntnisse in mehr als einer Sprache voraus
 - kann entscheidende Geschwindigkeitsvorteile bringen
 - wichtig: besonderer Fokus auf größtmögliche Lesbarkeit
- ☞ Kenntnis der jeweiligen Sprache und ihrer Eigenheiten und genaue Messung der Laufzeiten ist essentiell.

These

Die intelligente Wahl von Algorithmen ist meist wesentlich effizienter als jede Strategie zur Codeoptimierung.

- ▶ Näherungen sind oft die einzige gangbare Möglichkeit.
 - Die Grenzen der Näherungen müssen bekannt sein.
 - Ein Einsatz jenseits der Grenzen verfälscht die Ergebnisse.
 - Der Anwender ist für den korrekten Einsatz verantwortlich.
- ▶ Näherungen setzen ein tiefes Verständnis voraus.
 - Verantwortungsbereich der Naturwissenschaftler
 - Realität: Programme häufig als „black box“ eingesetzt

Keine Optimierung ohne sauberen Code

Sauberer Code ist eine zwingende Voraussetzung für Optimierung.

“ *...the only result of optimization you can usually be sure of without measuring performance is that you've made your code harder to read.*

– Steve McConnell

- ▶ „Clean Code“ ist (zwingende) Voraussetzung für erfolgreiche Optimierung.
- ▶ Optimierende Compiler tun sich oft wesentlich leichter mit sauber geschriebenem Code als mit „handoptimiertem“.
- ▶ Ausführungsgeschwindigkeit ist kein Grund für schlechte Lesbarkeit und schlecht gepflegten Code.

- ▶ Optimierung und Lesbarkeit stehen oft im Widerspruch.
 - Die schnellste Implementierung ist selten die lesbarste.
 - Lesbarkeit hat immensen Einfluss auf die Qualität.
- ▶ Lesbarkeit ist meist wichtiger als Geschwindigkeit.
 - Lesbarkeit sorgt für bessere Erweiterbar- und Wartbarkeit.
- ▶ Optimierung erfordert besonderen Fokus auf Lesbarkeit.
 - Es gibt auch bei optimiertem Code noch genug Potential.
 - Bsp.: gute Namen und übersichtliche Codeformatierung
- ▶ Optimierung schränkt oft die Plattformunabhängigkeit ein.
 - immer den nichtoptimierten, portablen Code behalten
- ☞ Optimiert werden sollte nur, wenn es unumgänglich ist, und immer nur soviel wie unbedingt nötig.



Zentrale Aspekte

- ❏ Laufzeit und Ressourcenverbrauch sind in den seltensten Fällen ein ernsthaftes Problem.
- ❏ Code sollte nur dann optimiert werden, wenn es unumgänglich ist.
- ❏ Voraussetzungen für erfolgreiche Optimierung sind Messbarkeit, Tests und Versionsverwaltung.
- ❏ Optimierungsstrategien hängen oft von Architektur, Programmiersprache und Compiler ab.
- ❏ Optimierungen haben häufig (ungewollt) Einfluss auf die Funktionalität.