

# Wissenschaftliche Softwareentwicklung

Bausteine einer rechnergestützten Datenauswertung,  
die den Kriterien der Wissenschaftlichkeit genügt

## 19. Codeoptimierung

Till Biskup

Physikalische Chemie

Universität Rostock

12.12.2024





- 🔑 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 „Sauberem 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

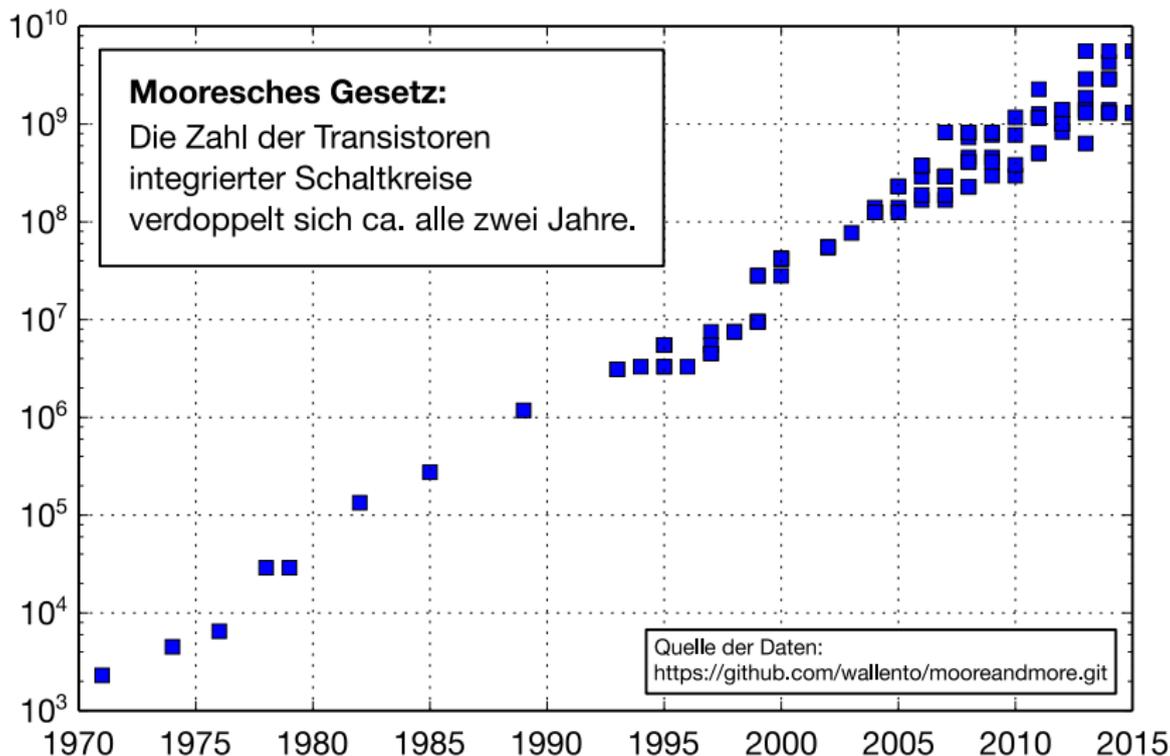
- ▶ Steigerung der Ausführungsgeschwindigkeit
- ▶ Verringerung des Ressourcenverbrauchs (meist Speicher)

Meist sind beide Aspekte nicht von Belang.

- ▶ Hardware wird schneller und billiger.
- ▶ Compiler sind mittlerweile sehr gut.
- ▶ Meist wartet der Computer eh auf den Nutzer.

# Warum Code optimieren?

Es gibt wenige wirklich gute Gründe.



- ▶ Anpassung komplexer Simulationen an Daten
  - iterativer Vorgang: viele Aufrufe ( $\geq 10^4$ ) der Simulationsfunktion
  - Laufzeit der Simulationsroutine ist entscheidend.
  - Faktor 5–10 kann über Durchführbarkeit entscheiden
- ▶ 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.

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\alpha & a\beta & b\alpha & b\beta \\ a\gamma & a\delta & b\gamma & b\delta \\ c\alpha & c\beta & d\alpha & d\beta \\ c\gamma & c\delta & d\gamma & d\delta \end{pmatrix}$$

### Beispiel

- ▶ Für  $N$  Teilchen ist die Matrix-Dimension  $2^N$ .
- ▶ Jedes Feld in der Matrix ist eine 64-Bit-Gleitkommazahl.
- ▶ Für  $N = 14$  sind das  $2^{14^2}$  Felder, also ca.  $2 \times 10^9$  Byte.
- ☛ Für  $N > 15$  wird es auch mit moderner Hardware eng...
- ☛ Dann helfen nur noch Näherungen.

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

- ▶  $g(n)$  ist die asymptotische obere 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 den realen Ressourcenverbrauch bzw. die Laufzeit 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.

Motivation

Voraussetzungen

Strategien

Zusammenhang mit „Sauberem Code“

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

– Kernighan und Pike

### Vier Voraussetzungen

- ▶ 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.
- 👉 Es gibt vor dem Optimieren erstmal genug zu tun...

“ *... 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.

Motivation

Voraussetzungen

Strategien

Zusammenhang mit „Sauberem Code“

“ *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
  - Hardwarearchitektur

- 1 bestehende Version sichern (Versionsverwaltung)
  - 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.
- ▶ Array-Operationen: Reihenfolge im Speicher beachten
  - row-major (C) vs. column-major (Fortran)
- ▶ 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
- 👉 Verantwortung des Programmierers:  
Grenzen der Näherungen sauber dokumentieren

Motivation

Voraussetzungen

Strategien

Zusammenhang mit „Sauberem Code“

“ *...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

- ▶ „Sauberer 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.

- ▶ Wissenschaftlichkeit setzt Nachvollziehbarkeit voraus.
  - Lesbarkeit von Quellcode ist essentiell.
  - Codeoptimierung geht meist zulasten der Lesbarkeit.
  - Lesbarkeit sollte *vorher* trainiert werden.
- ▶ Codeoptimierung ist fast nie relevant.
  - (Fast) nur für aufwendige Simulationen notwendig.
  - (Fast) niemand schreibt selbst Simulationsprogramme.
- ▶ Die Wahl des Algorithmus ist oft entscheidend.
  - Setzt tiefe Kenntnis der grundlegenden Mathematik voraus.
  - Viele Algorithmen sind in Bibliotheken implementiert.
- 👉 Codeoptimierung sollte nicht mit den Ansprüchen an die Wissenschaftlichkeit des Quellcodes kollidieren.



- 🔑 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.