

极客大学机器学习训练营

Python 性能调优指南

王然

众微科技 AI Lab 负责人

二〇二一年四月二十八日

1 核心脉络

2 优化方法论

3 实践部分

4 实践环节

5 要点回顾及预习

6 参考文献

- 1 核心脉络
- 2 优化方法论
- 3 实践部分
- 4 实践环节
- 5 要点回顾及预习
- 6 参考文献

- ▶ 虽然很多人说只要 python 写得好，python 性能可以超过 C；但是实际上，python 很容易写出很慢的代码，并且想优化还很难。
- ▶ python 优化重点不在于所谓的 python trick 而在于：
 - ▶ 识别代码瓶颈并找到原因 → Profiler 使用；
 - ▶ 首先从宏观上寻找修改策略；
 - ▶ 采用更接近于底层的语言（Cython 或者 C++）进行操作；
 - ▶ 并行：多进程或者多线程。

1 核心脉络

2 优化方法论

3 实践部分

4 实践环节

5 要点回顾及预习

6 参考文献

- ▶ 大部分的代码瓶颈都在某一段上；换句话说，如果你不同代码块之间耗费几乎是一样的，说明你已经优化很好了。
- ▶ 假设有一部分代码是瓶颈所在有两种情况：
 - ▶ 这段代码你改不了（例如：其他框架）→ 换方向换工具或者提 bug
 - ▶ 这段代码你可以改 → 改完就可以收工了

- ▶ 常见错误，一顿骚操作改了 1% 的损耗部分。
 - ▶ 蚂蚁金服面试题：要求优化一个十秒钟的程序。
 - ▶ ACM 金牌大佬采用各种骚操作，优化了一秒。
 - ▶ 但是这个程序往屏幕上打印了 100 多万个数字。
 - ▶ 如果对 stream 进行优化，就可以优化掉 9 秒。
 - ▶ 结果：直接拒。
- ▶ 记住一句话：Premature Optimization Is the Root of All Evil(Stackify 2020)。

► 优化按照重要性排序是这样的：

- 算法本身：例如 A 算法 100 轮迭代就可以收敛，B 算法需要迭代 1000000 轮，B 算法再优化也不如 A 算法效果好。
- 算法复杂度：如果一个算法多做了一些操作（比如说循环两遍但是只需循环一遍），导致性能降低则必然可以进行优化。
- 实现细节：比如说 hash 的设计如果不合适，内存存储顺序不合适，没有利用到 simd 都会导致变慢。
- 并行：没有充分利用多线程

- ▶ 不要上来就并行；并行有很多坑。
- ▶ 避免恶意抢资源：前同事开 5000 个线程，这样操作系统会分给他更多资源（有其他服务），但是其他服务基本全部瘫痪（该程序员已被开除）。
- ▶ 一些框架可以进行扩容，例如
 - ▶ 模型推断服务可以开一个服务多线程；
 - ▶ 也可以开多个服务（例如利用 docker+k8s），后者可以进行资源动态调配，是优先方案。

- ▶ 寻找 hotspots 往往可以通过 Profiler 实现
 - ▶ Profiler 一般会分为 function profiler 和 line profiler;
 - ▶ 对于 python 来说, 没有特别好的 profiler, VTune 理论上是最好的;
 - ▶ line profiler 可能需要你把 python 代码拆散, 因为 python 一行可能会实现很多功能, 这导致 profiler 很有侵入性。

- ▶ 寻找原因 → 极其难以做到。原因：
 - ▶ 只能看到 CPU/GPU 底层的表现，不能看到造成这种表现的原因；
 - ▶ 对于 Python 这种高级语言，控制底层常常是很困难的；
 - ▶ 很多优化必须要结合算法本身。
- ▶ 一般规则：
 - ▶ 不论是 CPU 还是 GPU，内存读取往往是瓶颈的核心，所以如果想不到原因，优先找内存操作。
 - ▶ SIMD 是提速的一个非常好的办法。

- ▶ 内存层次：内存 → Cache → Register。
- ▶ 理解：
 - ▶ 内存：仓库、汽车；
 - ▶ Cache：货架、飞机；
 - ▶ Register：工作台、火箭。
- ▶ 从上倒下存储量越来越小，但是速度越来越快。
- ▶ CPU 只能在 Register 当中工作。
- ▶ 我们无法控制 Cache，但是 Cache 往往是出事的根源。

- ▶ 不好读进来：
 - ▶ 一般来说读内存地址都是成批读临近数据进 Cache 的；
 - ▶ 但如果不在一块，就非常麻烦。
- ▶ 得反复读：
 - ▶ 一般都是读一块数据进来，但如果读错了。
 - ▶ 比如说 branch prediction，如果 if 条件变了，那么就得重新清空 cache。
 - ▶ 在比如说不同线程都在改一段内存，由于 cache 必须跟内存一直，所以得一直读。
 - ▶ Cache miss 是一个很大的课题 (hazelcast 2020)
- ▶ 除去这个以外，很多 CPU 都会出各种奇怪的问题，感兴趣的强烈推荐阅读 Vtune-Cookbook (2020)

- ▶ 现代 CPU 往往可以同时做多个计算 (Register 更大), 但是操作必须得是一样的 (比如说都是乘或加)。
- ▶ 一些编译器会自动进行优化, 一些不会。
- ▶ 不同 CPU 能够并行计算的大小不一样, 所以不同服务器需要重新编译。
- ▶ 实现这个要求数组排列连续并符合某些性质。
- ▶ 实现方式:
 - ▶ OpenMP 指令 (只能用 C/C++); 需要 directory;
 - ▶ 或者使用 intrinsics (近乎于汇编程度)。

1 核心脉络

2 优化方法论

3 实践部分

■ Profiler ■ Cython ■ 并行

4 实践环节

5 要点回顾及预习

6 参考文献

1 核心脉络

2 优化方法论

3 实践部分

■ Profiler ■ Cython ■ 并行

4 实践环节

5 要点回顾及预习

6 参考文献

- ▶ Function Profiler 可以采用 cProfile;
- ▶ Line Profiler 选择很多, 都不太好, 我们采用 `line_profiler`;
- ▶ Vtune 只支持 C++, 但理论上 python 的使用方法是一致的。

- ▶ 假设我们的目标变量是 0, 1, 0 表示负样本, 1 表示正样本。
- ▶ 我们的解释变量是一个离散的变量, 并且有很多类 (比如说职业)。
- ▶ 我们如何拟合模型呢? 我们没法表示 $1 \times$ 程序员. 所以我们需要把这些改为一种编码。
- ▶ 一种编码称之为 target encoding, 这种方法的实现逻辑如下。

- ▶ 假设我们这里有两类：程序员和保安，目标是预测是否收入会超过 10k。
- ▶ 我们发现程序员当中 90% 超过了 10k，保安只有 10% 超过了 10k。
- ▶ 那么我们就可以用 0.9 替换程序员，用 0.1 替换保安。
- ▶ 但这里有一个问题。

- ▶ 考虑极端例子：每一个样本都是一个新的类。
- ▶ 按照上面的做法：则我们等于知道了 y 值。这个模型将会毫无意义。
- ▶ 解决方法：在计算比例的时候，将该值对应的 y 去掉再求平均。
- ▶ 这类问题称之为 target leakage。本质是 x 直接把对应 y 的信息包含了进来，而且预测的时候，这部分信息是没有的。这个问题很复杂，可以参见 Prokhorenkova et al. (2018)。
- ▶ 代码实现见 `target_encoding_v1.py`

- ▶ 需要在终端中运行命令。
- ▶ 命令为 `python -m cProfile myscript.py`
- ▶ 输出为：
 - ▶ `tottime`→ 整体运行时间（不包括调用其他函数）
 - ▶ `cumtime`→ 累计运行时间（包含调用其他函数）

- ▶ 缺乏 call-tree (可以通过其他方法补充);
- ▶ 缺乏每行代码运行时间 (存在其他 line profiler);
- ▶ 缺乏其他 profiling 信息, 尤其是底层信息;
- ▶ 难以处理多语言情况;
- ▶ 没有图形界面;
- ▶ 很多时候时间不准确。

- ▶ 我们选取的 profiler 是 line_profiler;
- ▶ 安装命令 `pip install line_profiler`;
- ▶ 需要在需要 profile 的函数加上装饰器 `@profile`;
- ▶ 运行 `kernprof -l -v myscript.py`。

- ▶ 付费软件，为 Intel Parallel Studio 一部分。
- ▶ 但是，有个网站是[好东西](#)。
- ▶ 运行时先要进入对应 vtune 文件夹运行 `source ./vtune-vars.sh`。

1 核心脉络

2 优化方法论

3 实践部分

■ Profiler ■ Cython ■ 并行

4 实践环节

5 要点回顾及预习

6 参考文献

- ▶ 官网；
- ▶ Python 的 superset：全部 (?) python 代码都可以运行，但是并不是其长项；
- ▶ 更好的办法是把他想成 C/C++；
- ▶ 最大的区别：静态类；
- ▶ 一个额外的作用：代码保护。

- ▶ Cython: 避免 C/C++ 复杂的语法; 利用 Python 的现有语言内容; 不能充分利用底层 C/C++ 的语法; 无法实现并行和 SIMD; 转换成 C/C++ 的过程仍然有可能有效率损失;
- ▶ C/C++: 语言功能强大但是同时也非常复杂; 学习成本高; debug 成本高; 不能利用任何 python 语法, 这在异常处理中十分麻烦 (举例: NaN 的处理, 数组在内存中的排列);
- ▶ 建议:
 - ▶ 对于 C/C++ 不是十分熟悉: 尽量用 Cython;
 - ▶ 对于 C/C++ 十分熟悉: 仅仅使用 Cython 进行异常处理, 其他直接交给 C 进行处理;

见 hello 文件夹及注释。注意：

- ▶ 运行命令 `python setup.py install`;
- ▶ 注意：Cython 的建议是每个文件是一个 module。所以建议 install 来配置 (docker)。
- ▶ 同理：Cython 互相引用会出很多问题。
- ▶ 很多时候你可能很希望用 intel 编译器，见[这个例子](#)。但是很多时候会出很多问题。

见 `connect_c` 文件夹

见 `cython_example.ipynb`

- ▶ 所有类型均应该有 type。
- ▶ 注意 numpy 的排列。
- ▶ 尽量使用 C++ 自带数据结构。
- ▶ 通用方法：numpy 使用 view 传递给 C；C 使用 openmp 或者 Eigen；使用 Map 可以使用类似的 matlab 的语法。但是不支持 OpenMP。
- ▶ 所有内存分配和传递都应该在 python 中完成。临时变量用 C++ 类进行构建。

1 核心脉络

2 优化方法论

3 实践部分

■ Profiler ■ Cython ■ 并行

4 实践环节

5 要点回顾及预习

6 参考文献

- ▶ 由于 Python 中 GIL(Python 2020) 的存在, 使得本质上 python 只能用一个进程进行。
- ▶ 这使得并行 python 十分困难。
- ▶ python 自带多进程库不太好用, 所以建议使用 ray。
- ▶ ray 长处在于可以调用任何 python 函数, 并可以共享数据 (使得不用 copy)。
- ▶ 但是共享的数据只读。
- ▶ ray 的语法见 ray 文件夹。

- ▶ OpenMP是一套非常复杂的并行计算模块。
- ▶ 整体想法，采用注释的方式使非并行的东西变成并行。
- ▶ 最大问题：对 C++ 支持极差，所以不适合 Eigen（主流矩阵计算库）。如果要用 C++，请用oneTBB。
- ▶ 建议的解决方法：使用 Intel 编译器及oneTBB的Dependency Graph+Eigen::Map。Cython 只做数据预处理。注意：这样做编译过程将会十分痛苦。
- ▶ 如果要在 cython 中运用 openmp，只可以用 prange，并且必须满足各种需求。见具体文件。

- 1 核心脉络
- 2 优化方法论
- 3 实践部分
- 4 实践环节
- 5 要点回顾及预习
- 6 参考文献

- ▶ 我们将从算法角度考虑如何优化。
- ▶ 作业中：学员将会将这段代码改为 Cython（最好加入并行），并比较速度。

我们一起来动手!!!

- ▶ 我们的核心问题在于每一次计算 groupby 都需要重新遍历，groupby 计算的是平均值。那么有没有办法不这样做呢？
- ▶ 办法：两次循环。第一次计算 sum（map-reduce）模式，第二次我们在 sum 中减去目前观测的，就得到了具体值。
- ▶ 下面时间给大家来实现。

- ▶ 普通：请将该代码改为 cython 代码并比较速度区别（如可以实现并行可加分）。
- ▶ 附加题：完全符合真实工作需求，得分较高者会额外优先进行内推
 - ▶ 查看 [B-spline](#) 的介绍。
 - ▶ 使用 cython 实现对输入多列返回 b-spline basis 的操作。
 - ▶ 注意：禁止使用函数 recursive call。
 - ▶ 注意：必须要处理异常情况（例如缺失值，inf 等）。

可采用下面的练习。




- ▶ 使用 cython 定义如下函数：输入为三个 3×3 的矩阵，假设为 A, B, C 。
- ▶ 要求：计算 $(A + B)$ 和 AC 矩阵乘法，并将两个结果相加。要求 $A + B$ 和 AC 的计算必须并行。
- ▶ 必须使用 cmake 进行编译和安装。
- ▶ 建议方案：
 - ▶ 使用 `Eigen::Map` 将指针转化为矩阵。
 - ▶ 使用 `tbb` 的 `Dependency Graph` 实现复杂的操作。
 - ▶ 编译请根据[这个例子](#)进行修改。注意增加 `numpy` 的编译。
 - ▶ 需要手动先用 `Cython` 生成 `C++` 文件。剩下只是安装问题。

- 1 核心脉络
- 2 优化方法论
- 3 实践部分
- 4 实践环节
- 5 要点回顾及预习
- 6 参考文献

- ▶ Profiling 的基本原则。建议阅读参考材料。
- ▶ Cython 的各种语法及使用事项。

- ▶ 请预习 pandas 的基本操作。建议使用教材为McKinney (2012)。
- ▶ 该书也为非常常用的速查手册。建议可以常备。

- 1 核心脉络
- 2 优化方法论
- 3 实践部分
- 4 实践环节
- 5 要点回顾及预习
- 6 参考文献

-  hazelcast (2020). *What's a Cache Miss? Policies That Reduce Cache Misses*. URL: <https://hazelcast.com/glossary/cache-miss/>.
-  McKinney, Wes (2012). *Python for data analysis: Data wrangling with Pandas, NumPy, and IPython*. "O'Reilly Media, Inc."
-  Prokhorenkova, Liudmila et al. (2018). "CatBoost: unbiased boosting with categorical features". In: *Advances in neural information processing systems*, pp. 6638–6648.
-  Python, Real (2020). *What Is the Python Global Interpreter Lock (GIL)?* URL: <https://realpython.com/python-gil/>.
-  Stackify (2020). *Why Premature Optimization Is the Root of All Evil*. URL: <https://stackify.com/premature-optimization-evil/>.
-  Vtune-Cookbook (2020). *Intel® VTune™ Profiler Performance Analysis Cookbook*. URL: <https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/documentation/vtune-cookbook/top.html>.

Thanks!