Лекция 8: Оптимизация выполнения кода, векторизация, Numba

Автор: Сергей Вячеславович Макрушин, 2022 г.

e-mail: s-makrushin@yandex.ru (mailto:s-makrushin@yandex.ru)

При подготовке лекции использованы материалы:

• Документация к рассмотренным пакетам

V 0.6 30.10.2022

Разделы:

- Профилирование
- Numba
- Векторизация в NumPy
 - Векторизация для скалярных функций NumPy
 - Векторизация для векторных функций в NumPy
 - Векторизация в Numba

• к оглавлению

```
In [1]: # загружаем стиль для оформления презентации
from IPython.display import HTML
from urllib.request import urlopen
html = urlopen("file:./lec_v2.css")
HTML(html.read().decode('utf-8'))
```

Out[1]:

Задача оптимизации

В процессе разработки кода и создания конвейеров обработки данных всегда присутствуют компромиссы между различными реализациями. В начале создания алгоритма забота о подобных вещах может оказаться контрпродуктивной. Согласно знаменитому афоризму Дональда Кнута: «Лучше не держать в голове подобные "малые" вопросы производительности, скажем, 97 % времени: преждевременная оптимизация — корень всех зол».

Однако, как только ваш код начинает работать, часто бывает полезно заняться его производительностью. Иногда бывает удобно проверить время выполнения заданной команды или набора команд, а иногда — покопаться в процессе оптимизации и выяснить, где находится узкое место какого-либо сложного набора операций.

Профилирование

• к оглавлению

Профилирование — сбор характеристик работы программы, таких как:

• время выполнения отдельных фрагментов (например. функций)

- число верно предсказанных условных переходов
- число кэш-промахов
- объем используемой оперативной памяти
- ит.д.

Инструмент, используемый для анализа работы, называют **профайлером** (profiler). Обычно профилирование выполняется в процессе оптимизации программы.

Магические функции IPython для профилирования:

- %time длительность выполнения отдельного оператора;
- %timeit длительность выполнения отдельного оператора при неоднократном повторе (может использоваться для обсепечения большей точности оценки);
- %prun выполнение кода с использованием профилировщика;
- %1prun пошаговое выполнение кода с применением профилировщика;
- %memit оценка использования оперативной памяти для отдельного оператора;
- %mprun пошаговое выполнение кода с применением профилировщика памяти.

Для работы с одной строкой кода использутся строчные магические команды (например, %time), для работы с целой ячейкой их блочные аналоги (например, %time).

Магические функции в python

Магические функции (magic functions) — одно из важных улучшений, которые предлагает IPython по сравнению со стандартной оболочкой Python. Эти волшебные команды предназначены для решения распространенных задач при анализе данных с помощью Python. Фактически они контролируют поведение самого IPython.

Волшебные команды позволяют дают более удобный способ решения задач там, где использование синтаксиса Python было бы не очень эффективно / удобно.

Есть два типа магических команд:

- Line magics аналог вызова команд в командной строке консоли. Эти команды начинаются с символа %, остальная часть строки это аргумент, переданный без скобок или кавычек. Остальная часть строки это аргумент line magic, переданный без скобок или кавычек. Магические линии могут использоваться как выражения, а их возвращаемое значение может быть присвоено переменной.
- Cell magics вызов применяется на несколько строк всей ячейки, для которой применяетс данная функция. Эти команды начинаются с префикса %%. Cell magic получает тескт всей ячейки как пеменную строку и может вносить произвольные изменения в получаемые входные данные, которые вообще не обязательно должны быть корректным кодом на Python.

При необходимости можно создавать собственные магические команды.

1.1 s ± 278 ms per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 1 loop each)

Команда %timeit выполняет оценку времени многократного выполнения фрагментов кода и автоматически подстраивает колчество повторов выполненеия под длительность работы функции.

Дольные приставки Си при измерении времени:

- 1 ms 1 миллисекунда (мс): 1/1000 секунды
- 1 µs 1 микросекунда (мкс): 1/1 000 000 секунды
- 1 ns 1 наносекунда (нс): 1/1 000 000 000 секунды

CPU times: total: 938 ms Wall time: 936 ms

Команда %time выполняет однократный запуск кода. В отличие от %timeit %time не выполняет специальных действий, предотвращающих системные вызовы, поэтому часто выполнение того же кода с замером %time происходит несколько медленнее чем с %timeit.

Задача: за разумное время найти дубликаты в списке фильмов, содержащемся в файле tmdb_5000_credits.csv (размер: 4803 строки).

```
In [42]: import csv
                        def read movies(src, skip header=True, title column ind=1):
                                 Parameters:
                                            src (String): имя файла с фильмами
                                            skip header (bool, optional): Пропускать ли заголовок?
                                           title column ind (int, optional): Столбец с названиями фильмов
                                 Returns:
                                           list: Список названий фильмов из файла (столбец title column ind в CSV)
                                 with open(src) as fd:
                                            csv reader = csv.reader(fd, delimiter=',')
                                            movies = [row[title column ind] for row in csv reader]
                                            if skip header:
                                                      movies = movies[1:]
                                            return movies
                        # with open('employee birthday.txt') as csv file:
                        #
                                      csv reader = csv.reader(csv file, delimiter=',')
                        #
                                       line count = 0
                        #
                                      for row in csv_reader:
                        #
                                                if line count == 0:
                        #
                                                           print(f'Column names are {", ".join(row)}')
                        #
                                                           line count += 1
                        #
                                                else:
                        #
                                                           print(f'\setminus \{row[0]\}\ works\ in\ the\ \{row[1]\}\ department,\ and\ was\ born\ in\ \{row[0]\}\ department,\ and\ wa
                        #
                                                           line_count += 1
                                      print(f'Processed {line_count} lines.')
In [43]: movies = read movies('tmdb 5000 credits.csv')
                       movies[:5], type(movies), len(movies)
Out[43]: (['Avatar',
                              "Pirates of the Caribbean: At World's End",
                             'Spectre',
                              'The Dark Knight Rises',
                              'John Carter'],
                          list,
                          4803)
In [44]: # 1я попытка:
                        def is_duplicate(needle, haystack):
                                 for movie in haystack:
                                            if needle.lower() == movie.lower():
                                                      return True
                                  return False
                        def find_duplicate_movies(src='tmdb_5000_credits.csv'):
                                 movies = read_movies(src)
                                 duplicates = []
                                 while movies:
                                           movie = movies.pop()
                                            if is_duplicate(movie, movies):
                                                      duplicates.append(movie)
                                  return duplicates
```

Магическая функция %prun выдает результаты в формате, принятом у модулей профайлеров profile и cProfile (см. https://docs.python.org/3/library/profile.html (https://docs.python.org/3/library/profile.html)).

Столбцы содержат следующую информацию:

- **ncalls** количество вызовов функций (если дано 2 значения, например 3/1, то это означает, что функция вызывалась рекурсивно (первое число общее количество вызовов, второе количество primitive call (вызовов которые не были порождены рекурсией))
- **tottime** общее количество времени, провдеенное в данной функции (*ИСКЛЮЧАЯ время* проведенное в вызовах подфункций)
- percall tottime / ncalls
- **cumtime** общее количество времени, провдеенное в данной функции (*ВКЛЮЧАЯ время проведенное в вызовах подфункций*), это значение корректно расчитывается и для рекурсивных вызовов функций
- percall cumtime / primitive calls
- filename:lineno(function) расположение функции

```
In [47]:
         # дополнительная информация по %prun :
         %prun?
In [48]: # исправляем очевидное "слабое место" - огромное количество вызовов Lower()
         def is_duplicate2(needle, haystack):
             for movie in haystack:
                 if needle == movie:
                     return True
             return False
         def find_duplicate_movies2(src='tmdb_5000_credits.csv'):
             movies = [movie.lower() for movie in read_movies(src)]
             duplicates = []
             while movies:
                 movie = movies.pop()
                 if is_duplicate2(movie, movies):
                     duplicates.append(movie)
             return duplicates
```

Иногда больше пользы может принести построчный отчет профилировщика. Такая функциональность не встроена в язык Python или оболочку IPython, но можно установить пакет line profiler, обладающий такой возможностью.

Установка пакета line profiler:

CPU times: total: 2.7 s

Wall time: 2.69 s

- с помощью pip: \$ pip install line profiler
- с помощью conda (в Anaconda Prompt): \$ conda install -c anaconda line_profiler

Документация: https://github.com/pyutils/line_profiler#id2 (https://github.com/pyutils/line_profiler#id2 (https://github.com/pyutils/line_profiler#id2 (https://github.com/pyutils/line_profiler#id2)

Другой аспект профилирования — количество используемой операциями памяти. Это количество можно оценить с помощью еще одного расширения оболочки IPython — memory profiler.

Установки пакета memory_profiler:

- с помощью pip: \$ pip install memory_profiler
- с помощью conda (в Anaconda Prompt): conda install -c anaconda memory_profiler

Документация:

```
In [18]: # !pip install line_profiler

In [21]: # !pip install memory_profiler

In [51]: # загружаем функционал line_profiler в Jupyther:
%load_ext line_profiler

The line_profiler extension is already loaded. To reload it, use:
%reload_ext line_profiler

In [23]: %reload_ext line_profiler

In [24]: # загружаем функционал memory_profiler в Jupyther:
%load_ext memory_profiler

In [52]: %lprun?
```

Сохраняем профилируемый код в файл .py:

Overwriting mprun_demo.py

```
In [54]: # импортируем интересующую функцию из файла:
from mprun_demo import sum_of_lists
```

```
In [55]: %memit sum_of_lists(5000)
```

```
peak memory: 68.51 MiB, increment: 0.00 MiB
```

```
In [56]: %lprun -f sum_of_lists sum_of_lists(5000)
```

Необходимо указать ей явным образом, какие функции мы хотели быть профилировать, например так:

```
In[10]: %lprun -f sum_of_lists sum_of_lists(5000)
```

Записываем интересующий код в файл и импортируем из него:

```
#v.1
         import csv
         def read movies(src, skip header=True, title column ind=1):
             Parameters:
                 src (String): имя файла с фильмами
                 skip header (bool, optional): Пропускать ли заголовок?
                 title column ind (int, optional): Столбец с названиями фильмов
             Returns:
                 list: Список названий фильмов из файла (столбец title column ind в CSV)
             with open(src) as fd:
                 csv_reader = csv.reader(fd, delimiter=',')
                 movies = [row[title column ind] for row in csv reader]
                 if skip header:
                     movies = movies[1:]
                 return movies
         # исправляем очевидное "слабое место" - огромное количество вызовов Lower()
         def is_duplicate2(needle, haystack):
             for movie in haystack:
                 if needle == movie:
                     return True
             return False
         def find_duplicate_movies2(src='tmdb_5000_credits.csv'):
             movies = [movie.lower() for movie in read_movies(src)]
             duplicates = []
             while movies:
                 movie = movies.pop()
                 if is_duplicate2(movie, movies):
                     duplicates.append(movie)
             return duplicates
         Overwriting fdm_v2.py
In [58]: | from fdm_v2 import find_duplicate_movies2
```

In [57]: %%writefile fdm v2.py

Более 80% времени выполняется проверка is_duplicate2(). Переработаем алгоритм, для оптимзиации этой проверки:

In [59]: %lprun -f find_duplicate_movies2 find_duplicate_movies2()

```
In [32]: # исправляем очередное "слабое место": неоптимальную проверку дубликатов:

def find_duplicate_movies3(src='tmdb_5000_credits.csv'):
    duplicates = []
    unique = set()
    for movie in read_movies(src):
        movie = movie.lower()
        if movie in unique:
            duplicates.append(movie)
        else:
            unique.add(movie)
        return duplicates
In [60]: %%time
```

Если планируется профилировать код модулей и скриптов на Python вне Jupyter то для профилирования может быть удобно использовать следующую технику:

- Добавить перед интересующими функциями декоратор @profile
- Запуститить профилирование с помощью утилиты kernprof, пример прфилирования скрипта primes.py: kernprof -1 -v primes.py
- Подробнее см.: https://dwinston.github.io/python-second-language/extras/profiling.html)

На основе cProfile (лежащего в основе prun) можно сделать декоратор:

```
In [61]: import cProfile, pstats, io

def profile(fnc):
    """A decorator that uses cProfile to profile a function"""

def inner(*args, **kwargs):
    pr = cProfile.Profile()
    pr.enable()
    retval = fnc(*args, **kwargs)
    pr.disable()
    s = io.StringIO()
    sortby = 'cumulative'
    ps = pstats.Stats(pr, stream=s).sort_stats(sortby)
    ps.print_stats()
    print(s.getvalue())
    return retval
    return inner
```

```
In [63]: find_duplicate_movies4()
```

19396 function calls in 1.915 seconds

Ordered by: cumulative time

```
ncalls
         tottime percall cumtime
                                     percall filename:lineno(function)
        1
             0.008
                     0.008
                               1.915
                                        1.915 C:\Users\alpha\AppData\Local\Temp\ipyker
nel_7184\3142646199.py:1(find_duplicate_movies4)
             0.000
                     0.000
                               1.903
                                        1.903 C:\Users\alpha\AppData\Local\Temp\ipyker
nel 7184\507437900.py:3(read movies)
             1.704
                     1.704
                               1.902
                                        1.902 C:\Users\alpha\AppData\Local\Temp\ipyker
nel 7184\507437900.py:14(<listcomp>)
             0.010
                                        0.000 C:\Users\alpha\.conda\envs\teach e2\lib
     4890
                     0.000
                               0.198
\encodings\cp1251.py:22(decode)
    4890
            0.188
                     0.000
                              0.188
                                        0.000 {built-in method codecs.charmap decode}
     4803
                                        0.000 {method 'lower' of 'str' objects}
             0.002
                               0.002
                     0.000
     4800
            0.002
                     0.000
                              0.002
                                        0.000 {method 'add' of 'set' objects}
       1
             0.000
                     0.000
                               0.000
                                        0.000 {built-in method io.open}
       1
             0.000
                     0.000
                               0.000
                                        0.000 {method '__exit__' of '_io._IOBase' obje
cts}
             0.000
        1
                     0.000
                               0.000
                                        0.000 C:\Users\alpha\.conda\envs\teach e2\lib
\ bootlocale.py:11(getpreferredencoding)
             0.000
                               0.000
                                        0.000 {built-in method _locale._getdefaultloca
        1
                     0.000
le}
       1
             0.000
                               0.000
                     0.000
                                        0.000 {built-in method _csv.reader}
                                        0.000 {method 'append' of 'list' objects}
       3
             0.000
                     0.000
                               0.000
        1
             0.000
                      0.000
                               0.000
                                        0.000 C:\Users\alpha\.conda\envs\teach_e2\lib
\codecs.py:260(__init__)
                                        0.000 {method 'disable' of '_lsprof.Profiler'
             0.000
                      0.000
                               0.000
objects}
```

```
Out[63]: ['the host', 'out of the blue', 'batman']
```

Numba

• к оглавлению

Numba - JIT компилятор с открытым исходным кодом, который компилирует подмножество кода Python и NumPy в быстрый машинный код.

- Официальная страница проекта: https://numba.pydata.org/)
- **JIT-компиляция** (Just-in-time compilation, компиляция «на лету»), динамическая компиляция (dynamic translation) технология увеличения производительности программных систем, использующих байт-код, путём компиляции байт-кода в машинный код или в другой формат непосредственно во время работы программы.

Преимущества и накладные расходы:

- достигается высокая скорость выполнения по сравнению с интерпретируемым байт-кодом (сравнимая с компилируемыми языками)
- накладные расходы: увеличение потребления памяти (для хранения результатов компиляции) и дополнительные затраты времени на компиляцию на лету.

Ускорение функций на Python

- Numba компилирует функции Python в оптимзированный машинный код с использованием библиотеки для компиляции промышленного уровня LLVM (https://ru.wikipedia.org/wiki/LLVM). Численные алгоритмы откомпелированные с помощью Numba могут достигать скорости сопоставимой с исполнением откомпилированного кода на С или FORTRAN.
- Numba обеспечивает удобство работы:
 - нет необходимости уходить от использования обычного интерпретатора Python
 - нет необходимости выполнять отдельную компиляцию кода
 - нет необходимости в установке компилятора C/C++
 - Дотстаточно использовать декораторы Numba для ваших функций, Numba выполнит все необходимы шаги автоматически.

Разработан для научных вычислений

- Numba спроектирована для работы с массивами и функциями NumPy.
- Numba генерирует специализированный код для различных типов массивов и их размещения для оптимизации производительности.
- Специализированные декораторы могут созвать ufunc которые могут использоваться для распространения по массивам NumPy, также как это делают ufunc NumPy.
- Numba хорошо интегрирована с работой Jupyter notebooks для обеспечения интерактивных вычислений и с распеределнными вычислительными средами, такими как Dask и Spark.

Выполняет распараллеливание ваших алгоритмов

- Numba поддерживает Simplified Threading: может автоматически параллельно выполнять выражения для NumPy на нескольких ядрах CPU, что делает простым написание параллельных циклов.
- Numba поддерживает SIMD Vectorization: Numba может автоматически транслировать некоторые циклы в векторные инструкции для CPU, что может обеспечивать 2-4 кратный прирост производительности. Numba адаптируется к имеющимся возможностям CPU, определяя и используя поддержку таки SIMD возможностей CPU как SSE, AVX или AVX-512.
- Numba **поддерживает ускорение вычислений на GPU**: поддерживаются драйверы NVIDIA CUDA и AMD ROCm. Numba позволяет писать параллельные GPU алгоритмы полностью из Python.

Переносимые результаты компиляции

- Numba обеспечивает высокую производительность приложений на Python без сложностей бинарной компиляции и создания пакетов. Исходный код остается написан на чистом Python, а Numba обеспечивает его компиляцию на лету. Numba проходит тестирование на более чем 200 различных программно-апаратных конфигурациях.
- Numba поддерживает:
 - разные CPU: Intel and AMD x86, POWER8/9, ARM.
 - разные GPU: NVIDIA и AMD.
 - разные версии Python: Python 2.7, Python 3.4-3.7
 - разные операционные системы: Windows, macOS, Linux
- Бинарные поставки Numba доступны для большинства систем в виде паетов conda и wheel для инсталляции с помощью рір.

Документация и учебные материалы:

http://numba.pydata.org/numba-doc/latest/index.html (http://numba.pydata.org/numba-doc/latest/index.html)

Основные возможности Numba:

- генерация кода "на лету" (во время импорта или во время исполнения, по выбору пользователя)
- генерация нативного кода для CPU (по умолчанию) или для GPU
- интеграция со стеком технологий Python для научных вычислений (на основе NumPy)

```
In [89]:
     import numpy as np
     import numba
     from numba import jit, njit
In [90]:
     # наивная реализация суммы квадратов элементов матрицы:
     def sum_sq_2d(arr):
       m, n = arr.shape
       result = 0.0
       for i in range(m):
          for j in range(n):
            result += arr[i,j] ** 2
        return result
In [91]: np.full((10, 10), 42.0)
In [92]: | arr = np.full((1000, 1000), 42.0)
     arr[:3, :3], arr.shape
Out[92]: (array([[42., 42., 42.],
          [42., 42., 42.],
          [42., 42., 42.]]),
      (1000, 1000))
     Время работы наивной реализации:
In [93]:
     %%timeit
     sum_sq_2d(arr)
     2.15 s ± 564 ms per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 1 loop each)
     Время работы реализации с использованием NumPy:
In [94]: | %%timeit
     np.sum(arr ** 2)
     20.5 ms ± 4.05 ms per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 100 loops each)
```

Как работает Numba:

- 1. Читает байткод Python для декорированной функции.
- 2. Собирает информацию о типах входных аргументов функций.
- 3. Анализирует и оптимизирует код.
- 4. Использует библиотеку для компиляции LLVM для генерации машинного кода фонкции для конкретного CPU.
- 5. Данный машинный код используется каждый раз при вызове данной функции (с аргументами тогоже типа).

Когда Numba даст хороший прирост производительности:

- Если код ориентирован на численные операции, в т.ч.:
 - активно использует NumPy
 - имеется много циклов (большое количество итераций)

Как получить байткод Python:

```
In [95]:
         import dis
In [96]: dis.dis(sum_sq_2d)
                       0 LOAD_FAST
                                                  0 (arr)
           4
                       2 LOAD_ATTR
                                                  0 (shape)
                       4 UNPACK_SEQUENCE
                                                  2
                       6 STORE_FAST
                                                  1 (m)
                       8 STORE_FAST
                                                  2 (n)
           5
                      10 LOAD CONST
                                                  1 (0.0)
                      12 STORE_FAST
                                                  3 (result)
           6
                      14 LOAD GLOBAL
                                                  1 (range)
                      16 LOAD FAST
                                                  1 (m)
                      18 CALL_FUNCTION
                                                  1
                      20 GET_ITER
                                                 38 (to 62)
                      22 FOR_ITER
                      24 STORE_FAST
                                                 4 (i)
           7
                      26 LOAD_GLOBAL
                                                  1 (range)
                      28 LOAD FAST
                                                  2 (n)
                      30 CALL_FUNCTION
                                                  1
                      32 GET_ITER
                                                 24 (to 60)
                      34 FOR ITER
                      36 STORE_FAST
                                                  5 (j)
           8
                      38 LOAD_FAST
                                                  3 (result)
                      40 LOAD_FAST
                                                  0 (arr)
                      42 LOAD_FAST
                                                  4 (i)
                      44 LOAD FAST
                                                  5 (j)
                      46 BUILD_TUPLE
                                                  2
                      48 BINARY SUBSCR
                      50 LOAD_CONST
                                                  2 (2)
                      52 BINARY_POWER
                      54 INPLACE_ADD
                                                  3 (result)
                      56 STORE_FAST
                      58 JUMP_ABSOLUTE
                                                 34
                 >> 60 JUMP_ABSOLUTE
                                                 22
           9
                 >>
                      62 LOAD_FAST
                                                  3 (result)
                      64 RETURN_VALUE
```

• Реализация **CPython** (не путайте с Cython!) интерпретирует не непосредственно исходный

код, а компилирует его в байт код и исполняет (интерпретирует) его с помощью виртуальной машины (см: https://en.wikipedia.org/wiki/CPython (https://en.wikipedia.org/wiki/CPython)).

- Байткод Python хранится в автоматических создаваемых при компиляци файлах с расширением рус в папках __pycache__ находящихся в папках рядом с файлами с расширением ру (кодом модулей и скриптов на Python).
- Байткод создается при комплияции "на лету" кода на Python исполняемого в первый раз.
- Среда Python автоматически отслеживает актуальность байткода в файлах с расширением рус и при необходимости выполняет их обновление.

Numba является хорошим выбором если ваш код численно ориентирован (выполняет много математических вычислений), много использует NumPy и/или имеет много циклов. В этом примере мы применим самый фундаментальный из JIT-декораторов Numba, @jit, чтобы попытаться ускорить некоторые функции.

Пример использования декоратора @jit .

Декоратор @jit имеет два режим работы:

- режим nopython
 - Устанавливается параметром nopython=True или использованием декоратора @njit
 - Это рекомендуемый для использования и наиболее быстрый режим.
 - Приводит к компиляции кода функции практически не используещего интерпретатор Python.
- режим object

```
In [98]:  %%time  # во время первого запуска с данным типом параметров производистя компиляция функции: sum_sq_2d_jit__(arr)
```

CPU times: total: 203 ms Wall time: 205 ms

Out[98]: 1764000000.0

Время работы откомпилированной реализации:

4.47 ms \pm 276 μ s per loop (mean \pm std. dev. of 7 runs, 100 loops each)

Возможно просмотреть код LLVM, который был сгенирирован при компиляции:

```
sum_sq_2d_jit (array(float64, 2d, C),)

# File: C:\Users\alpha\AppData\Local\Temp\ipykernel_7184\399773312.py
# --- LINE 3 ---
@njit

# --- LINE 4 ---

def sum_sq_2d_jit(arr):

# --- LINE 5 ---
# label 0
# arr = arg(0, name=arr) :: array(float64, 2d, C)
# $4load_attr.1 = getattr(value=arr, attr=shape) :: UniTuple(int64 x 2)
# $6unpack_sequence.4 = exhaust_iter(value=$4load_attr.1, count=2) :: UniTuple(int64 x 2)
# del $4load_attr.1
# $6unpack_sequence.2 = static_getitem(value=$6unpack_sequence.4, index=0, in
```

Векторизация в NumPy

• к оглавлению

In [100]: sum sq 2d jit.inspect types()

Векторизация для скалярных функций NumPy

• к оглавлению

Векторизация позволяет записывать применение функции для перобразования множества значений (вектора) за одну операцию.

Векторизация позвоялет:

- писать более компактный и выразительный код
- оптимизировать выполенние векторных операций по сравнению с применением циклов за счет специальных оптимизаций, в т.ч. за счет использования специальных возможностей процессоров, многие из которых поддерживают векторные операции на аппаратном уровне.

В контексте высокоуровневых языков, таких как Python, теримн векторизация означает использование оптимизированного заранее откомпилированного кода, написанного на низкоуровневом языке (например С) для выполнения математических операций над множестовм значений (вектором, массивом (в т.ч. многомерным)). Это делается вместо явного итерирования по данным на исходном высокоуровневом языке (например с помощью циклов Python).

• Пример решения задачи на скалярном языке (С):

```
for (i = 0; i < n; i++)
  for (j = 0; j < n; j++)
    a[i][j] += b[i][j];</pre>
```

Пример решения задачи на языке, поддерживающим векторные операции:

```
a = a + b
```

- Аналогичные примеры можно привести при переходе от кода на Python к использованию ufunc в NumPy.
- Современные языки, поддерживающие векторные операции: APL, J, Fortran 90, Mata, MATLAB, Analytica, TK Solver (as lists), Octave, R, Cilk Plus, Julia, Perl Data Language (PDL), Wolfram Language, библиотека NumPy в Python.
- Но: реализованное в NumPy множестов ufunc не обеспечивает решения всех возможных задач преобразования массивов.

Пример для применения векторизации:

```
In [127]:
          # подсчитываем количество нулей:
          def count zeros(v):
              result = 0
              while v:
                  v, digit = divmod(v, 10)
                  if digit == 0:
                       result += 1
              return result
In [128]:
          import numpy as np
          import numpy.random
In [129]: numpy.random.randint(0, 10000, 100)
Out[129]: array([9676, 3944, 2869, 7123, 3192, 9918, 4089, 9426, 4486, 4305,
                  394, 2221, 6931, 926, 2032, 8022, 4850, 4459, 3796, 8545, 642,
                  2552, 6435, 9517, 1239, 5958, 3400, 5267, 8400, 453, 346, 4320,
                 5441, 2427, 5942, 4484, 7418, 3399, 5982, 5718, 9141, 2043, 7299,
                 5466, 6541, 5550, 6876, 9055, 1920, 4457, 315, 5068, 9992, 8619,
                 9038, 3341, 7278, 3180, 4122, 8494, 2410, 4681, 9963, 8403, 2924,
                 9574, 4428, 1704, 7969, 5115, 1037, 1352, 8773, 5096, 9011, 9083,
                 6601, 5801, 9093, 763, 7848, 6871, 3099, 8565, 9931, 5600, 8111,
                 6550, 6402, 9263, 4193, 2105, 8565, 9127, 9425, 619, 4859, 2579,
                 4323])
In [131]: vals = numpy.random.randint(0, 10_000, 1_000_000)
In [132]: | %%time
          z_{count} = 0
          for v in vals:
              z_count += count_zeros(v)
          print(z_count)
          287641
          CPU times: total: 10.1 s
          Wall time: 11.5 s
In [134]: |np.sum(np.sin(vals))
Out[134]: 1375.8971837527477
```

numpy.vectorize - это класс обобщенных функций, который позволяет создавать векторизованные функции в NumPy.

- numpy.vectorize позволяет определять векторизованные функции которые принимают массивы NumPy (или вложенные последовательности объектов) и возвращают массивы NumPy (единичные или кортежи).
- Конструктор класса выглядит следующим образом: class numpy.vectorize(pyfunc, otypes=None, doc=None, excluded=None, cache=False, signature=None)
- Ключевым аргументом является функция руfunc функция, которую требуется векторизовать.
- В результате применения конструктора numpy.vectorize появляется вызываемый (callable) объект типа numpy.vectorize, по сути это есть векторизованная функция.
- Векторизованная функция вызывает функцию pyfunc для элементов входных массиов аналогично функции map в Python, при этом применяются правила распространения (broadcasting) NumPy.

Подробнее о параметрах numpy.vectorize:

- pyfunc : callable функция Python которую необходимо векторизовать
- otypes : str or list of dtypes, optional тип выходных значений векторизованной функции. Может быть передан как строка с описанием кодов типов (typecode characters) или как список спецификаций типов данных. (*См примеры*)
- doc : str, optional строка докумнетации функции, если передан None (значение по умолчанию) будет использована стрка документации функции руfunc.
- excluded : set, optional определение параметров по которым функция НЕ БУДЕТ векторизована, передается множество строк или чисел определяющих аргументы по именам параметров или по их позиции.
- cache : bool, optional если True то при первом вызове кэшируется количество выходных значений, если параметр otypes не передан.
- signature: string, optional обобщенная сигнатура функции, например (m,n),(n)->(m) для векторизованного матрично-векторного умножения. Если праметр передан рубилс будет вызван для массивов с формой заданной размером соответсвующих измерений. По умолчанию считается что рубилс принимает на вход скаляры и возвращает скаляры.

287641

CPU times: total: 2.61 s

Wall time: 2.61 s

```
In [139]: |type(z_count)
Out[139]: numpy.ndarray
In [140]: # Тип возвращаемых значений определен автоматически:
          z count[:3], type(z count[0])
Out[140]: (array([1, 1, 0]), numpy.int32)
In [141]: vcount zeros f = np.vectorize(count zeros, otypes=[float]) # явное задание возвращаемого
In [142]: | z_count_f = vcount_zeros_f(vals[:100])
          z count f[:3], type(z count f[0])
Out[142]: (array([1., 1., 0.]), numpy.float64)
          Пример использования параметра excluded:
In [143]: # Расчет значения полинома с коэффциентами р для значения х:
          def mypolyval(p, x):
              _p = list(p)
              res = _p.pop(0)
              while _p:
                  res = res*x + _p.pop(0)
              return res
In [144]: # При векторизации исключаем параметр р из параметров, по которым проводится векторизаци
          vpolyval = np.vectorize(mypolyval, excluded=['p'])
In [145]: vpolyval(p=[1, 2, 3], x=[0, 1, 2, 3])
Out[145]: array([ 3, 6, 11, 18])
In [146]: vpolyval(p=[1, 2, 3], x=np.linspace(-1, 1, 100))
                            , 2.00040812, 2.00163249, 2.00367309, 2.00652995,
Out[146]: array([2.
                 2.01020304, 2.01469238, 2.01999796, 2.02611978, 2.03305785,
                 2.04081216, 2.04938272, 2.05876951, 2.06897255, 2.07999184,
                 2.09182736, 2.10447913, 2.11794715, 2.1322314 , 2.1473319 ,
                 2.16324865, 2.17998163, 2.19753086, 2.21589634, 2.23507805,
                 2.25507601, 2.27589022, 2.29752066, 2.31996735, 2.34323028,
                 2.36730946, 2.39220488, 2.41791654, 2.44444444, 2.47178859,
                 2.49994898, 2.52892562, 2.5587185, 2.58932762, 2.62075298,
                 2.65299459, 2.68605244, 2.71992654, 2.75461688, 2.79012346,
                 2.82644628, 2.86358535, 2.90154066, 2.94031221, 2.97990001,
                 3.02030405, 3.06152433, 3.10356086, 3.14641363, 3.19008264,
                 3.2345679 , 3.2798694 , 3.32598714, 3.37292113, 3.42067136,
                 3.46923783, 3.51862055, 3.56881951, 3.61983471, 3.67166616,
                 3.72431385, 3.77777778, 3.83205795, 3.88715437, 3.94306703,
                 3.99979594, 4.05734109, 4.11570248, 4.17488011, 4.23487399,
                 4.29568411, 4.35731048, 4.41975309, 4.48301194, 4.54708703,
                 4.61197837, 4.67768595, 4.74420977, 4.81154984, 4.87970615,
                 4.94867871, 5.0184675 , 5.08907254, 5.16049383, 5.23273135,
                 5.30578512, 5.37965514, 5.45434139, 5.52984389, 5.60616264,
                 5.68329762, 5.76124885, 5.84001632, 5.91960004, 6.
                                                                            ])
```

Векторизация для векторных функций в NumPv

• к оглавлению

Обобщенная сигнатура функции

Имеется потребность проводить векторизацию не только скалярных функций (принимающих в качестве аргументов один или несколько (фиксированное число!) скалярных аргументов и возвращающая одно значение), но и "векторных"(в нотации NumPy - работающих с массивами ndarray или анлогоичными структурами) функций.

- В результате векторизации векторные функции могут эффективно (в смысле компактности записи и эффективности вычислений) применяться для массивов бОльших разменостей.
- Для реализации этого механизма конструктору numpy.vectorize необходимо передать информацию о том какая векторная структура у входных параметров и выходных значений. Это делается с помощью передачи обобщенной сигнатуры функции через параметр signature.

Обобщенная сигнатура функции (generalized ufunc signature) определяет как размерности каждого из входных/выходных массивов разбиваются на размерности относящиеся к ядру (т.е. становятся параметрами единичного вызова векторизуемой функции руfunc) и на размерности, использующиеся для векторизации.

Основные парвила:

- каждое измерение в сигнатуре соотносится с измерениями соответствующих передаваемых массивов (соответствие строится начиная с конца кортежа, определяющего форму (shape) предаваемого массива).
- Измерения ядра, которым присвоены одинаковые имена, должны точно совпадать по размерам, в этом случае распространение (bradcasting) не производится.
- При применении векторизации измерения ядра убираются из всех входов, а для остающиеся измерений выполняется бродкастинг для выполнения итераций по ним в рамках работы векторизации.

Примеры обобщенных сигнатур различных функций:

Имя функции	Сигнатуры	Описание
add	(),()->()	сложение, бинарная ufunc
sum1d	(i)->()	сумма элементов вектора (reduction)
inner1d	(i),(i)->()	скалярное произведение двух векторов (vector- vector multiplication)
matmat	(m,n),(n,p)->(m,p)	матричное умножение
vecmat	(n),(n,p)->(p)	умножения одномерного вектора (рассматривается как вектор-строка) на матрицу (vector-matrix multiplication)
matvec	(m,n),(n)->(m)	умножение матрицы на одномерный вектора (рассматривается как вектор-столбец) (matrix-vector multiplication)
matmul	(m?,n),(n,p?)->(m?,p?)	функция, которая реализует все 4 варианта, рассмотренные выше
outer_inner	(i,t),(j,t)->(i,j)	произведение двух матриц не по правилу "строка на столбец", а по правилу "строка на строку", при этом индекс второй строки определяет индекс столбца в котором будет помещено произведение в итоговой матрице
cross1d	(3),(3)->(3)	Векторное произведение двух векторов размерности 3 (_https://ru.wikipedia.org/wiki/

Векторное_произведение)

- numpy.ufunc.signature: https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.ufunc.signature.html (https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.ufunc.signature.html)
- более подробно про обобщенную сигнатуру функции: https://numpy.org/doc/1.17/reference/capi.generalized-ufuncs.html (https://numpy.org/doc/1.17/reference/c-api.generalized-ufuncs.html)

Для реализованных в NumPy ufunc можно просмотреть их сигнатуру:

```
In [147]:
          print(np.add.signature)
          None
          Отсутствие сигнатуры означет эквивалентно '(),()->()' (с поправкой на количество параметров
          функции).
In [148]: | np.linalg._umath_linalg.det.signature
Out[148]: '(m,m)->()'
In [149]: def my_vecmat1(a, b):
              return np.sum(a * b)
In [150]: my_vecmat1(np.arange(1,4),np.ones(3))
Out[150]: 6.0
In [151]: a1 = np.arange(1,13).reshape(3,4)
          a1, a1.shape
Out[151]: (array([[ 1, 2, 3, 4],
                   [5, 6, 7, 8],
                  [ 9, 10, 11, 12]]),
           (3, 4))
In [152]: np.ones(4)
Out[152]: array([1., 1., 1., 1.])
In [153]: # (наверное) неожиданный результат:
          my_vecmat1(a1, np.ones(4))
Out[153]: 78.0
In [155]: def my_vecmat2(a, b):
              return sum(x*y for x, y in zip(a, b))
In [156]: my_vecmat2(np.arange(1,4),np.ones(3))
Out[156]: 6.0
In [270]: # (наверное) неожиданный результат:
          my_vecmat2(a1, np.ones(3))
Out[270]: array([15., 18., 21., 24.])
```

```
In [157]: # выполняем векторизацию векторной функции ту vecmat1 с описанием сигнатуры:
          vmy vecmat1 = np.vectorize(my vecmat1, signature='(i),(i)->()')
In [158]:
          a1
Out[158]: array([[ 1, 2,
                            3,
                                4],
                 [5, 6, 7, 8],
                 [ 9, 10, 11, 12]])
In [159]: np.ones(4)
Out[159]: array([1., 1., 1., 1.])
In [160]: # применение векторизованной векторной функции:
          vmy vecmat1(a1, np.ones(4))
Out[160]: array([10., 26., 42.])
          Что произошло:
            1. На входе: (3, 4),(4)
            2. Сигнатура ядра: (i),(i)->()
            3. Векторизаця: (A, i), (i) -> (A), где A=3, i=4
            4. Результат: (3)
In [161]: vmy_vecmat2= np.vectorize(my_vecmat2, signature='(i),(i)->()')
In [162]: # указание правильной сигнатуры при векторизации позволило получить ожидаемый результат.
          vmy_vecmat2(a1, np.ones(4))
Out[162]: array([10., 26., 42.])
In [163]: b2 = np.vstack((np.ones((1,4)), np.full((1,4), 2), np.full((1,4), 3)))
          b2, b2.shape
Out[163]: (array([[1., 1., 1., 1.],
                   [2., 2., 2., 2.],
                  [3., 3., 3., 3.]]),
           (3, 4))
In [164]: a1
Out[164]: array([[ 1, 2, 3, 4],
                 [5, 6, 7, 8],
                 [ 9, 10, 11, 12]])
In [165]: vmy_vecmat1(a1, b2)
Out[165]: array([ 10., 52., 126.])
          Что произошло:
            1. На входе: (3, 4),(3, 4)
            2. Сигнатура ядра: (i),(i)->()
```

```
3. Векторизаця: (A, i),(A, i)->(A), где A=3, i=4 4. Результат: (3)
```

На самом деле это даже более простой случай, т.к. в первом случае для второго аргумента использовалось распространение (broadcasting)!

Кроме numpy.vectorize имется еще функция numpy.frompyfunc которая позволяет проеобразовывать скалярные функции Python в ufunc NumPy и использовать их с применением правил распространения.

Векторизация в Numba

• к оглавлению

Применение векторизации в Numba

```
# простой способ определить, какой тип Numba будет использовать для этих значений:
In [167]:
          numba.typeof(vals[0])
Out[167]: int32
In [168]: # векторизация с помощью Numba (в явном виде передаем типы, компиляция происходит сразу)
          numba_vcount_zeros = numba.vectorize(['int32(int32)'])(count_zeros)
In [169]: | %%time
          z_count = numba_vcount_zeros(vals)
          print(np.sum(z_count))
          287641
          CPU times: total: 31.2 ms
          Wall time: 24.9 ms
In [170]: # альтернативный способ:
          from numba import vectorize
          @vectorize(['int32(int32)'])
          def numba2_vcount_zeros(v):
              result = 0
              while v:
                  v, digit = divmod(v, 10)
                  if digit == 0:
                      result += 1
               return result
```

287641

CPU times: total: 31.2 ms

Wall time: 30.9 ms

Декоратор @guvectorize

А что, если ускорить рассчет перенеся все выполняемые вычисления в векторизованную функцию?

- декоратор vectorize() в Numba позволяет реализовывать скалярные ufuncs, которые обрабатывают один элемент за раз.
- декоратор guvectorize() идет на шаг вперед и позволяет векторизовать векторные ufunc которые обрабатывают массиывы определенных размеров и возвращают массивы определенных размеров. Типовой пример, это расчет медианы или фильтры свертки (convolution filter).
- в отличие от функций, полученных с помощью vectorize(), функции, полученные с помощью guvectorize(), не возвращают своих значенйи, вместо этого они получают массив для возвращаемого значения как аргумент функции и заполняют его во время работы. Это происходит из-за того что в реальности массив формируется с помощью механизмов NumPy и потом для него вызывается код сгенерированный с помощью Numba.
- Обобщенные универсальные функции (generalized universal functions) требуют описания сигнатуры размерностей для которых реализована функция ядра. В Numba эта сигнатура определяется аналогично NumPy generalized-ufunc signature. (He надо путать с сигнатурой типов, которую обычно требует Numba). Подробнее см.: https://numpy.org/doc/1.17/reference/c-api.generalized-ufuncs.html (https://numpy.org/doc/1.17/reference/c-api.generalized-ufuncs.html)

Рассмтрим, намриер сигнатуру матичного умножения '(m,n), (n,p) -> (m,p)' . Из нее видно, что:

- Ппервая с конца размерность первого аргумента и вторая с конца размерность второго аргумента должны совпадать (т.е. должно выполняться правило матричного умножения).
- Последние две размерности результата определяются соответствующими (по именам) размерностями первого и второго аргумента.
- Важно помнить: **соответствие** реальных размерностей передаваемых массивов именам **сигнатуры строится начиная с конца кортежа, определяющего форму (shape) предаваемого массива**.

каждое измерение в сигнатуре соотносится с измерениями соответствующих передаваемых массивов (

При написании функции ядра для gufunc необходимо:

- Продумать сигнатуру (generalized-ufunc signature) функции.
- Рреализовывать функции соблюдая правила для размерностей вынесенные в сигнатуре
- Функция ядра для gufunc в Numba принимает в качестве параметров как сами аргументы функции так и переменную в которую будет помещаться результат работы функции
- Входной параметр для хранения результата является последним параметром функции.
- У функции не должно быть возвращаемых значений, все результаты должны сохраняться в последнем входном параметре функции.
- Последствия изменения значений других аргументов, кроме последнего, неопределены, поэтому полагаться на эти изменения нельзя.

- Обратите внимание как размерности m, n и р извлекаются из входных аргументов.
- Размерность n извлекается дважды, для того чтобы подчеркнуть необходимость совпадения значений. На практике это действие не является необходимым.

Для построения generalized-ufunc из созданной функции ядра можно как явно вызывать функцию numba.guvectorize так и использовать декторатор @guvectorize. Интерфейс numba.guvectorize аналогичен функции vectorize, но дополнительно требует передачи сигнатуры.

Результат: gufunc, которая может быть исолпьзована как любая gufunc в NumPy. Поддерживается распространение по правилам NumPy.

```
In [176]: matrix_ct = 10000
gu_test_A = np.arange(matrix_ct * 2 * 4, dtype=np.float32).reshape(matrix_ct, 2, 4)
gu_test_B = np.arange(matrix_ct * 4 * 5, dtype=np.float32).reshape(matrix_ct, 4, 5)
In [177]: %timeit gu_matmul(gu_test_A, gu_test_B)
```

```
3.72 ms \pm 538 \mus per loop (mean \pm std. dev. of 7 runs, 100 loops each)
```

Различия между функциями vectorize и guvectorize:

- 1. vectorize генерирует ufuncs, guvectorize генерирует generalized-ufuncs
- 2. В обоих случаях сигнатуры для типов входных аргументов и возвращаемых значений представлены в виде списка, но в функции vectorize для их определения используются сигнатуры, тогда как в guvectorize вместо этого используются списки типов, и последним специфириуется возвращаемое значение.
- 3. Для guvectorize необходимо передать сигнатуру NumPy generalized-ufunc signature. Эта сигнатура дложна соответствовать переданной сигнатуре типов.
- 4. Помните, что в guvectorize результат передается через последний параметр функции, тогда как в vectorize результат возвращается функцией ядра.

```
In [178]: @guvectorize(['int32[:], int32'], '(n)->()')
          def numba_vcount_zeros_arr(arr, result):
               result = 0
               for i in range(arr.shape[0]):
                   v = arr[i]
                   while v:
                       v, digit = divmod(v, 10)
                       if digit == 0:
                           result += 1
In [185]: vals.shape
Out[185]: (1000000,)
In [184]: %%timeit
           z_count = numba_vcount_zeros_arr(vals)
          # print(z_count)
           5.71 \mus ± 486 ns per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 100,000 loops each)
            • базовая реализаия - 12 s
            • реализация с векторизацией - 2.6 s 5x
            • реализация с векторизацией на Numba - 31 ms 400x
            • реализация с guvectorize на Numba - 6.2 mks 1 935 483x
In [183]: # Итоговый прирост производительности:
          12/0.0000062
Out[183]: 1935483.870967742
  In [ ]:
```