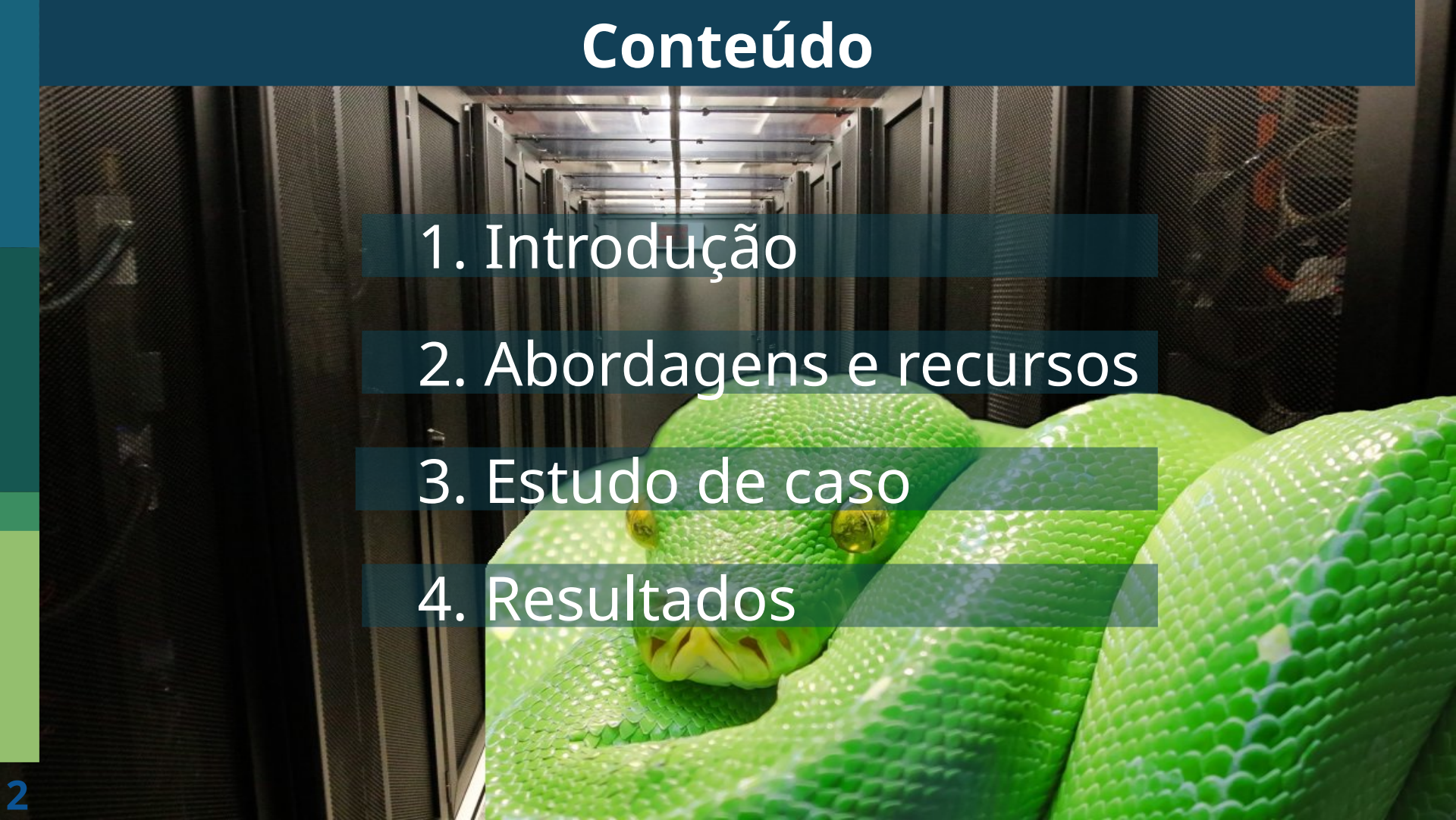
# Comparação de abordagens de computação de alto desempenho no ambiente Python para um estudo de caso de estêncil de cinco pontos

XV Brazilian e-Science Workshop (BreSci)

# Conteúdo



1. Introdução
2. Abordagens e recursos
3. Estudo de caso
4. Resultados

# 1

# Introdução

# Por que Python?

- Prototipagem rápida
- Interfaceamento fácil
- Fácil de ler e manter
- Comunidade código aberto
- Muitas bibliotecas disponíveis (incluindo PAD)

**Language Ranking: IEEE Spectrum**

| Rank | Language | Score |
|---|---|---|
| 1 | Python | 100.0 |
| 2 | Java | 96.3 |
| 3 | C | 94.4 |
| 4 | C++ | 87.5 |
| 5 | JavaScript | 79.4 |

http://spectrum.ieee.org

# Exemplo de módulo disponível no SDumont

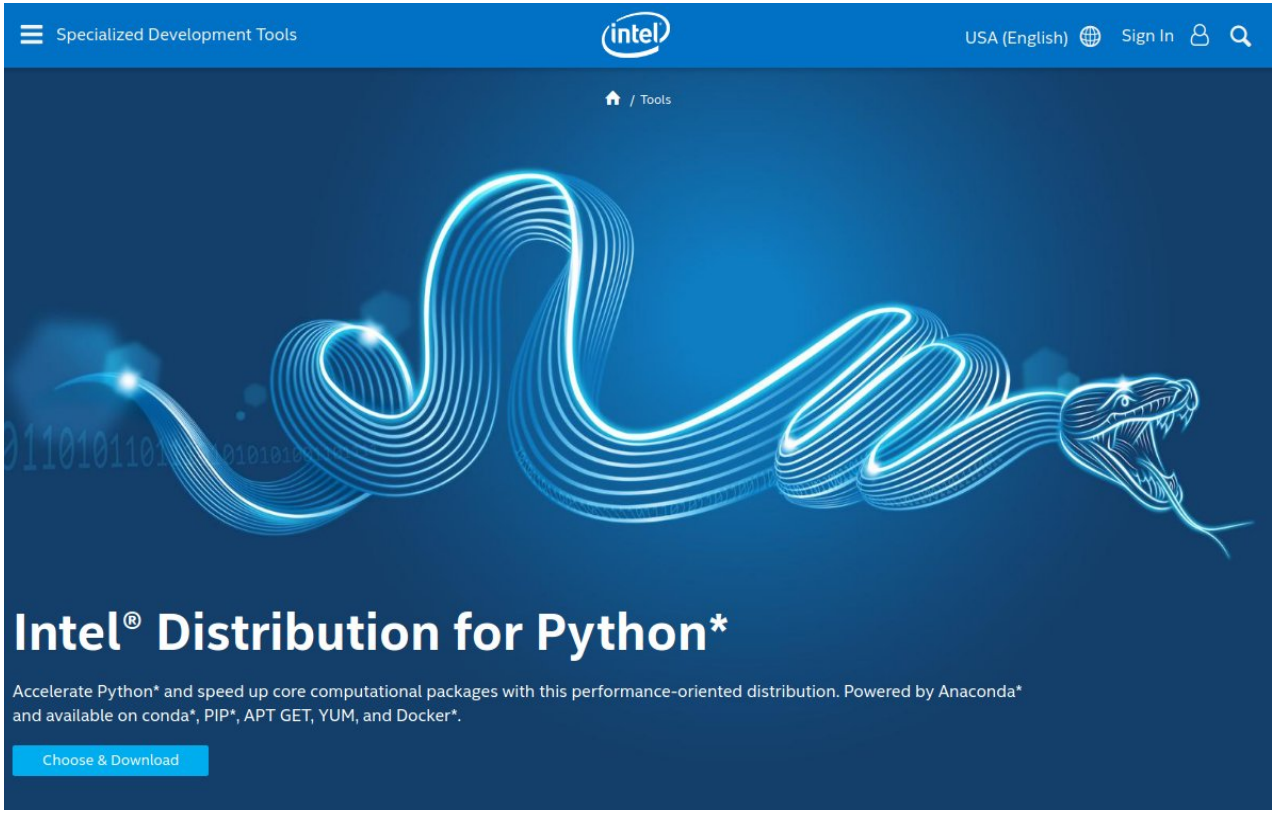
## Módulo para Deep Learning / IA:

https://sdumont.lncc.br/support_manual.php

```
module load deepl/deeplearn-py3.7
```

(TensorFlow 1.13, Keras, PyTorch)

# Exemplo de pacote de desenvolvimento Python Intel



# Objetivos (I)

**Python -> programação e prototipagem rápida, mas permite processamento de alto desempenho (PAD)?**

Compilação do código Python padrão para linguagem intermediária (bytecode)

Execução interpretada (lenta) por Python

Então Python não é adequado PAD?

# Objetivos (II)

**Avaliam-se aqui abordagens de PAD para Python para estudo de caso específico objetivando:**

Explorar diferentes abordagens PAD para Python utilizando a **biblioteca MPI**, executadas no supercomputador SDumont/LNCC

Avaliar o desempenho das abordagens

Referência: implementações F90 sequencial e paralela

Roteiro para o uso de recursos PAD em Python

2

# Algumas abordagens e recursos Python para PAD

# 2.1 - IPython Parallel

IPython é um *shell* para computação interativa

IPython Parallel é um pacote com uma coleção de scripts para controlar clusters

Instâncias IPython em paralelo, interativamente

Suporta paralelismo **MPI**, threads (cores/GPU), etc.

Aplicativos paralelos desenvolvidos, executados, depurados e monitorados interativamente

# 2.2 - Biblioteca *MPI for Python*

Paralelização usando biblioteca de comunicação por troca de mensagens **MPI** (Message Passing Interface)

Permite execução em um um mais nós de memória compartilhada de supercomputador

Permite comunicação **MPI** de arrays NumPy

# 2.3 - Compilador Cython

Compila código-fonte Cython/Python para código C, que é então compilado por um compilador C para linguagem de máquina

Desempenho depende da portabilidade das chamadas Python originais para as chamadas C/C++ correspondentes

Permite interagir com outras bibliotecas otimizadas na linguagem C/C ++

# 2.4 - Biblioteca PyTorch

Biblioteca de código aberto para aprendizado de máquina (Facebook)

Suporta arrays/tensores multidimensionais

Permite a execução em CPU ou GPU

# 2.5 - Biblioteca NumPy

Desenvolvida principalmente para arrays multidimensionais

Útil para aplicações científicas

Possui funções para álgebra linear, transformada de Fourier, etc.

Possui interface para Fortran (F2PY)

# 2.6 - F2PY (integrada à biblioteca NumPy)

Permite criar bibliotecas Python (compostas de módulos) a partir de códigos F90

Requer poucas modificações no código F90

Módulos da biblioteca podem ser usados no código Python

Boa integração com o ambiente Python

# 2.7 - Biblioteca PyCuda

Acesso a API CUDA padrão usando Python

Porta partes intensivas do código Python para execução em GPU

Parte não-intensiva do código Python executado de forma interpretada

# 2.8 - Compilador Numba

Permite compilação AOT ou JIT

Suporta compilação de parte de Python e Numpy

Porta partes intensivas do código Python para código de máquina executável em processador multicore ou GPU

Parte não-intensiva do código Python executado de forma interpretada

# 2.9 - Implementação padrão de Python

Execução interpretada e portanto lenta

Útil para prototipagem rápida ou prova de conceito

Portabilidade quase plena para diferentes plataformas

Otimização de desempenho feita numa segunda etapa especificamente para a plataforma (exemplo: GPU)

# 2.10 - Código F90 de referência

Código F90 sem Python

Compilador GNU/gfortran (flag -O3)

Também compatível com Jupyter Notebook para desenvolvimento, compilação, execução, e análise dos resultados

Implementações: sequencial e paralela **MPI**

# 2.11 - Outras abordagens de PAD para Python

Incluem computação distribuída, computação em nuvem ou grade, ambiente específicos (Dask), etc.

Abordagens existentes ativamente desenvolvidas e várias outras sendo propostas...

# 2.12 - Aplicativo Jupyter Notebook

Aplicativo web de código aberto para computação interativa

Permite criar documento com texto descritivo, equações LaTeX, trechos de código executável, etc.

Arquitetura servidor-cliente com servidor executado em uma máquina remota ou local

Permite executar programas, upload/download de arquivos, interfacear com sistemas de submissão de jobs (SLURM, etc.) e outras funcionalidades

# 2.13 - Distribuição Anaconda

Suporta Python e R para computação científica e inclui o aplicativo Jupyter Notebook

Inclui aplicativos de ciência de dados e aprendizado de máquina, processamento de dados em grande escala, análise preditiva, etc.

Utilizado neste trabalho no ambiente do supercomputador SDumont

3

# Estudo de caso

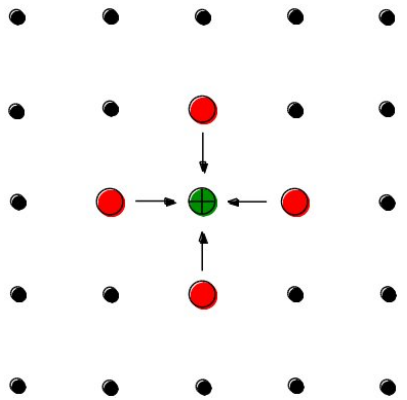
# 3.1 - Estudo de caso

## Estudo de caso selecionado

**Problema de difusão de calor** 2D modelado com a equação de Poisson e resolvido pelo método das diferenças finitas usando um estêncil de 5 pontos. Simulação ao longo de um número de **timesteps** em que a grade 2D é sucessivamente atualizada

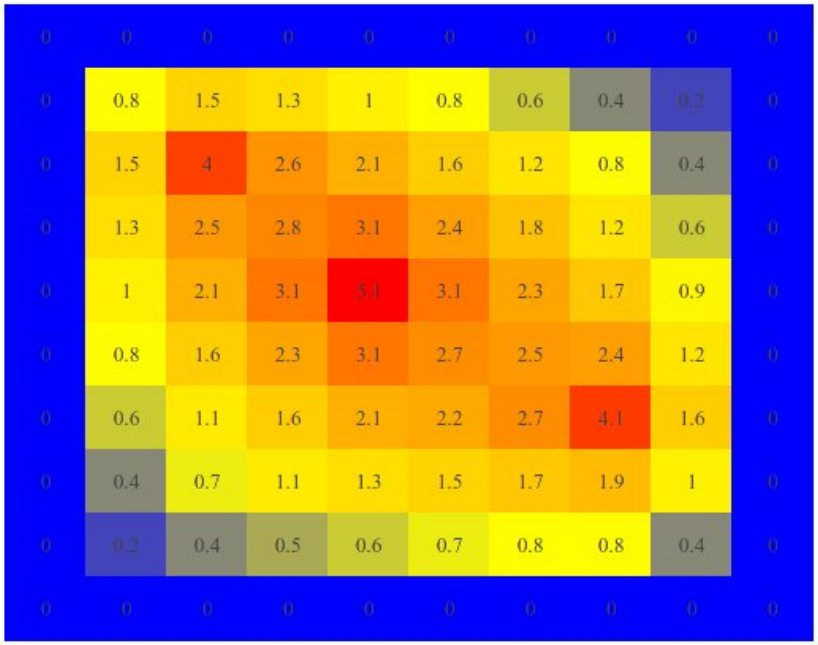
# 3.2 - Equação de Poisson 2D (difusão de calor)

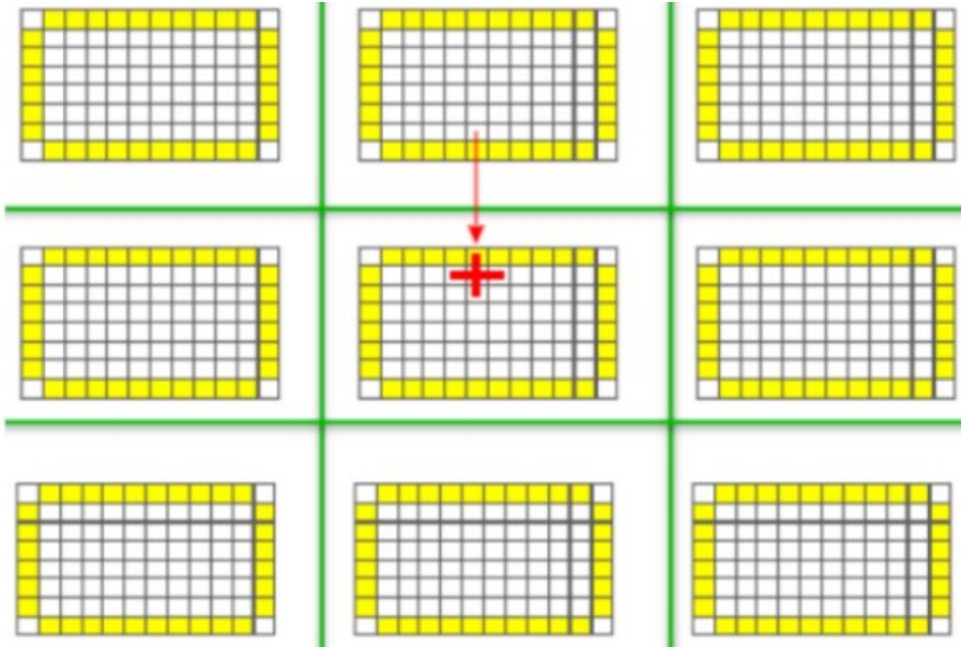
Campo de temperatura U definido em malha discreta 2D (x, y) com resolução Δx = Δy = h e estêncil de 5 pontos



$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \approx \frac{U_{i+1,j} + U_{i,j+1} - 4U_{i,j} + U_{i-1,j} + U_{i,j-1}}{h^2}$$

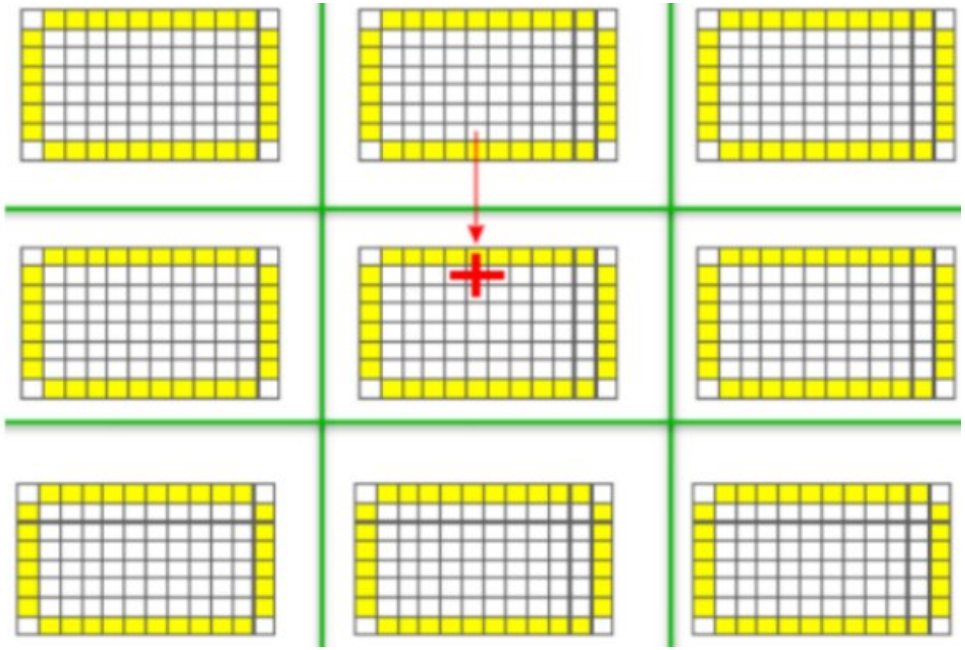
# 3.3 - Divisão do domínio 2D



**Paralelização**: domínio original é dividido em subdomínios **com replicação das bordas** nas fronteiras entre eles

# 3.4 - Atualização do domínio a cada timestep



A cada **timestep**, a atualização da grade com o estêncil de 5 pontos exige comunicação MPI das temperaturas nas bordas para subdomínios vizinhos

# 3.4 - Parte intensiva do código em questão

**F90**

```
do j=2,by+1
  do i=2,bx+1
    anew(i,j)=1/2*(aold(i,j)+1/4*(aold(i-1,j)+aold(i+1,j)+aold(i,j-1)+aold(i,j+1)))
  enddo
enddo
```

**Cython**

```
cpdef kernel(double[:,::1] anew, double[:,::1] aold, Py_ssize_t  by, Py_ssize_t  bx):
  for i in range(1,bx+1):
    for j in range(1,by+1):
      anew[i,j]=1/2*(aold[i,j]+1/4*(aold[i-1,j]+aold[i+1,j]+aold[i,j-1]+aold[i,j+1]))
```

**Numba**

```
@njit
def kernel(anew, aold):
  anew[1:-1,1:-1]=(
    1/2*(aold[1:-1,1:-1]+1/4*(aold[2:,1:-1]+aold[:-2,1:-1]+aold[1:-1,2:]+aold[1:-1,:-2])))
```

# 4

# Resultados: Análise de desempenho sequencial e paralelo

# 4.1 - Ambiente do supercomputador SDumont

**Nó B710**: 2 procs. **Xeon E5-2695v2** 12-core

**Nó B715**: 2 procs. **Xeon E5-2695v2** 12-core + 2 **Tesla K40**

**Nó Sequana X**: 2 procs. **Xeon 6152** 22-core + 4 **Volta V100**

GNU Fortran 7.4, GNU Fortran 8.3, OpenMPI 4.0.1, Intel Fortran 19.0.3, Intel MPI, Python 3.6.12, Cython 0.29.20, NumPy 1.18.1, Numba 0.41.0, e CUDA 10.1 e outros

# 4.3 - Tempos de processamento (em segundos)

| | Número de processos MPI | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | Seq. | 1 | 4 | 9 | 16 | 36 | 49 | 64 | 81 |
| F90 | **19.3** | **21.9** | **7.3** | **6.2** | 4.7 | **2.1** | 1.9 | **1.2** | 1.7 |
| F2Py | **18.9** | 23.6 | 7.5 | 6.2 | **4.6** | 2.1 | **1.6** | 1.3 | **1.0** |
| Cython | 24.0 | 24.0 | 7.5 | 6.3 | 4.7 | 2.2 | 1.7 | 1.3 | 2.1 |
| Numba (CPU) | 30.5 | 30.5 | 8.2 | 6.3 | 5.9 | 3.2 | 2.7 | 1.8 | 2.1 |
| Python | 212.4 | 227.2 | 64.7 | 44.8 | 33.5 | 15.2 | 10.4 | 7.8 | 6.7 |

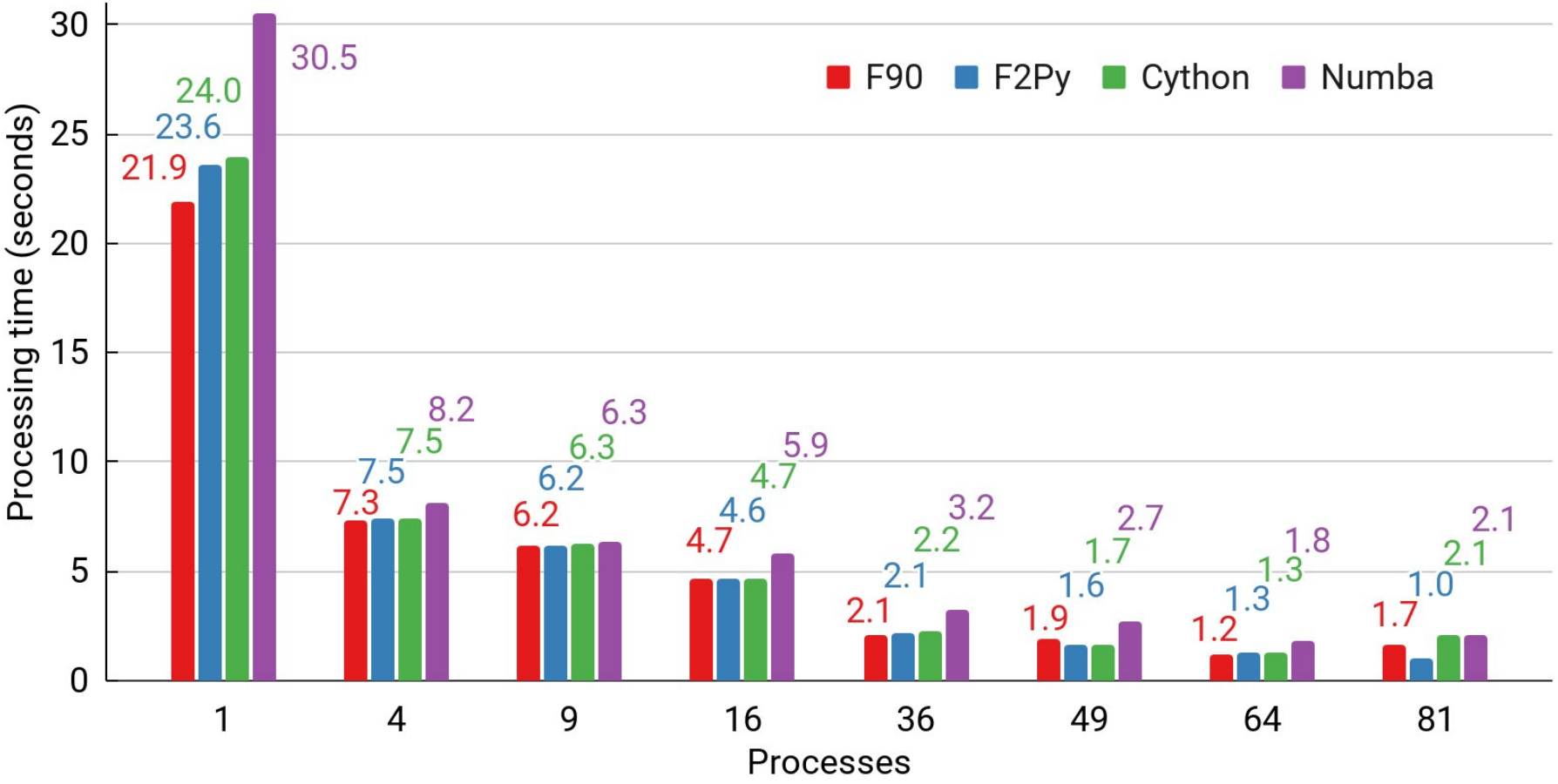
# 4.4 - Speedup

| | Número de processos MPI | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | **Seq.** | **1** | **4** | **9** | **16** | **36** | **49** | **64** | **81** |
| **F90** | **1.0** | **0.9** | **2.6** | **3.1** | 4.1 | **9.0** | 10.2 | **15.7** | 11.4 |
| **F2Py** | **1.0** | 0.8 | 2.6 | 3.1 | **4.2** | 9.0 | **11.8** | 15.1 | **19.0** |
| **Cython** | 0.8 | 0.8 | 2.6 | 3.1 | 4.1 | 8.6 | 11.6 | 14.7 | 9.4 |
| **Numba (CPU)** | 0.6 | 0.6 | 2.4 | 3.0 | 3.3 | 6.0 | 7.2 | 10.8 | 9.3 |
| **Python** | 0.1 | 0.1 | 0.3 | 0.4 | 0.6 | 1.3 | 1.8 | 2.5 | 2.9 |

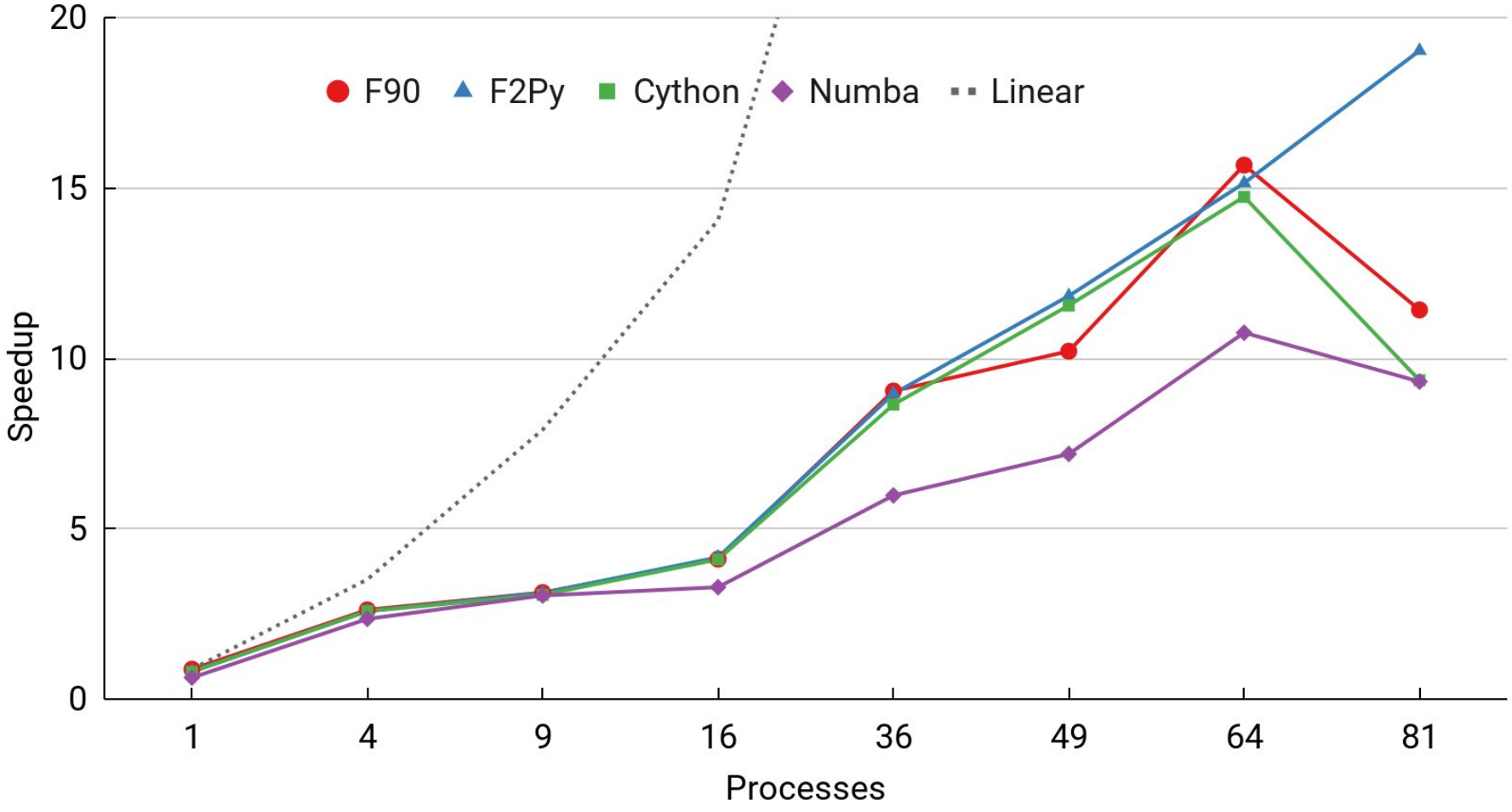
# 4.5 - Eficiência paralela

| | Número de processos MPI | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | **Seq.** | **1** | **4** | **9** | **16** | **36** | **49** | **64** | **81** |
| **F90** | **1.00** | **0.88** | **0.66** | **0.35** | 0.26 | **0.25** | 0.21 | **0.24** | 0.14 |
| **F2Py** | **1.02** | 0.82 | 0.65 | 0.35 | **0.26** | 0.25 | **0.24** | 0.24 | **0.23** |
| **Cython** | 0.80 | 0.80 | 0.65 | 0.34 | 0.26 | 0.24 | 0.24 | 0.23 | 0.12 |
| **Numba (CPU)** | 0.63 | 0.63 | 0.59 | 0.34 | 0.21 | 0.17 | 0.15 | 0.17 | 0.12 |
| **Python** | 0.09 | 0.08 | 0.07 | 0.05 | 0.04 | 0.04 | 0.04 | 0.04 | 0.04 |

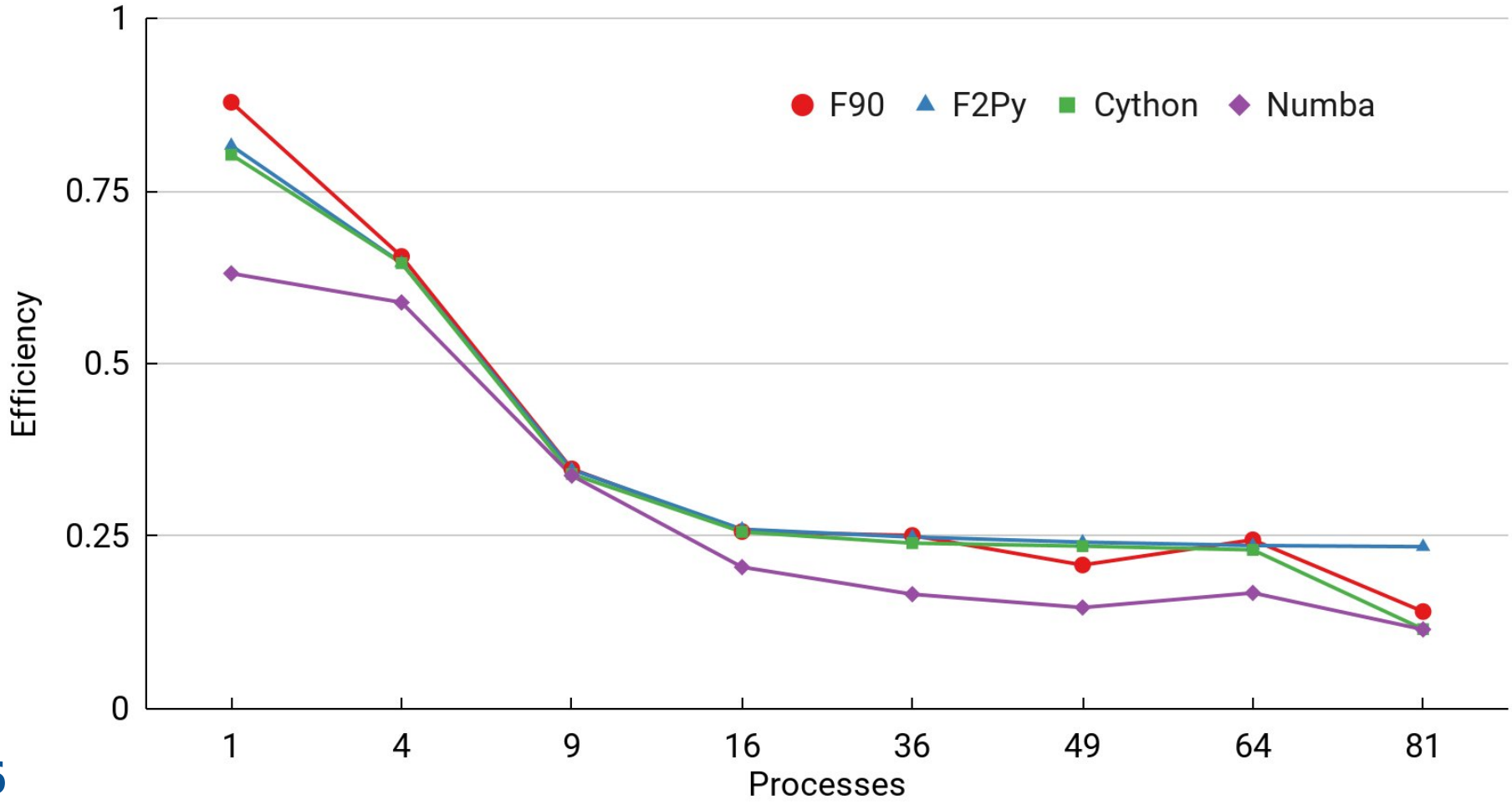
# 4.6 - Tempos de processamento (em segundos)



# 4.7 - Speedup


F90
F2Py
Cython
Numba
Linear
Speedup
Processes
0
5
10
15
20
1
4
9
16
36
49
64
81

# 4.8 - Eficiência paralela



# 4.9 - Comparação tempos (s) Numba-GPU x F90

| | GPU | Seq. | 1 | 4 | 9 | 16 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| F90/B715 | | 19.3 | 21.9 | 7.3 | 6.2 | 4.7 |
| F90/Seq-X | | 15.8 | 15.6 | 4.1 | 2.1 | 1.5 |
| Numba-GPU/B715 | 22.3 | | | | | |
| Numba-GPU/Seq-X | 8.0 | | | | | |

# Agradecimentos

Ao LNCC (Laboratório Nacional de Computação Científica), projeto 205341 AMPEMI (2020-I), para uso do supercomputador Santos Dumont (nó do SINAPAD, o Sistema Nacional de PAD)

# Obrigado!

**Código fonte:** https://github.com/efurlanm/bs21