



# **Comparação de abordagens de computação de alto desempenho no ambiente Python para um estudo de caso de computação científica**

**Apresentação para a disciplina CAP-425  
Tópicos Avançados em Modelagem Ambiental**

# 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>

## Módulo para Deep Learning / IA:

[https://sdumont.lncc.br/support\\_manual.php](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



The screenshot shows the Intel Distribution for Python website. The header is blue with the Intel logo in the center. To the left of the logo is a hamburger menu icon and the text "Specialized Development Tools". To the right are links for "USA (English)" with a globe icon, "Sign In" with a user icon, and a search icon. Below the header is a breadcrumb trail: a home icon followed by "/ Tools". The main content area has a dark blue background with a glowing blue Python logo (a snake) made of many thin lines. To the left of the snake's head, the binary code "0110101101" is visible. Below the snake, the text "Intel® Distribution for Python\*" is displayed in white. Underneath this, a smaller line of text reads: "Accelerate Python\* and speed up core computational packages with this performance-oriented distribution. Powered by Anaconda\* and available on conda\*, PIP\*, APT GET, YUM, and Docker\*." At the bottom left of the main content area is a blue button with the text "Choose & Download".

Specialized Development Tools

intel

USA (English) Sign In

/ Tools

**Intel® Distribution for Python\***

Accelerate Python\* and speed up core computational packages with this performance-oriented distribution. Powered by Anaconda\* and available on conda\*, PIP\*, APT GET, YUM, and Docker\*.

Choose & Download

# 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 Santos Dumont (SD) do 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 SD

# 3

## **Estudo de caso**

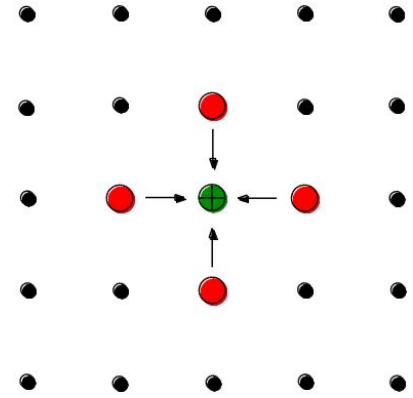
## 3.1 - Estudo de caso

- **Estudo de caso em Computação Científica**
  - **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



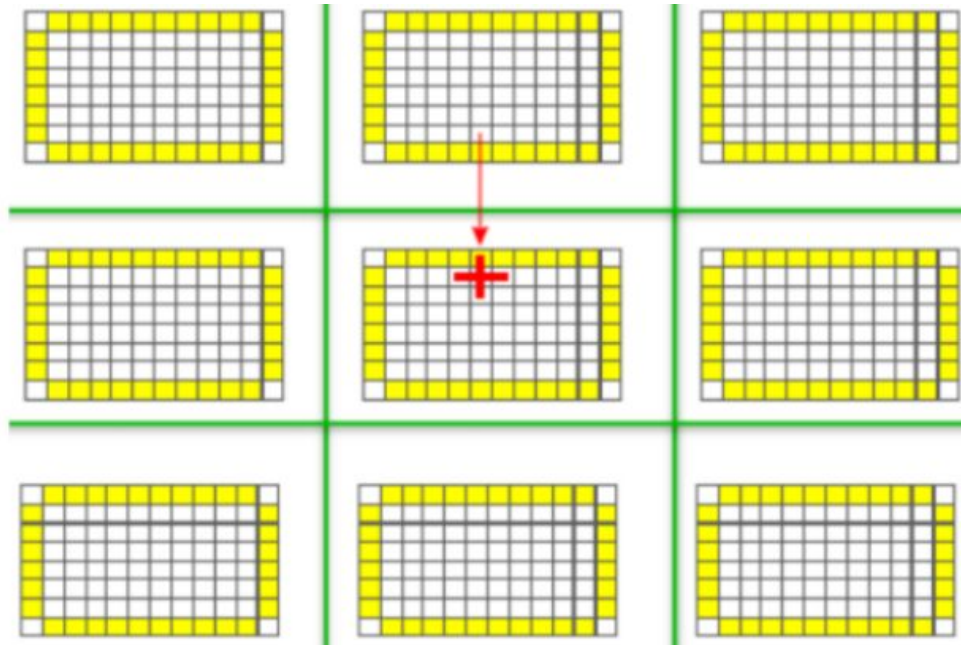
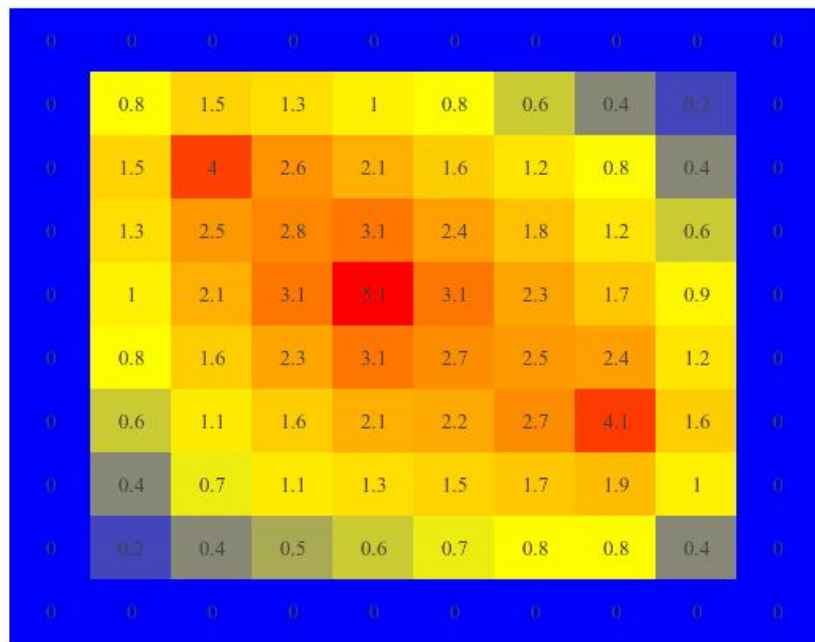
## 3.2 - Equação de Poisson 2D (difusão de calor)

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



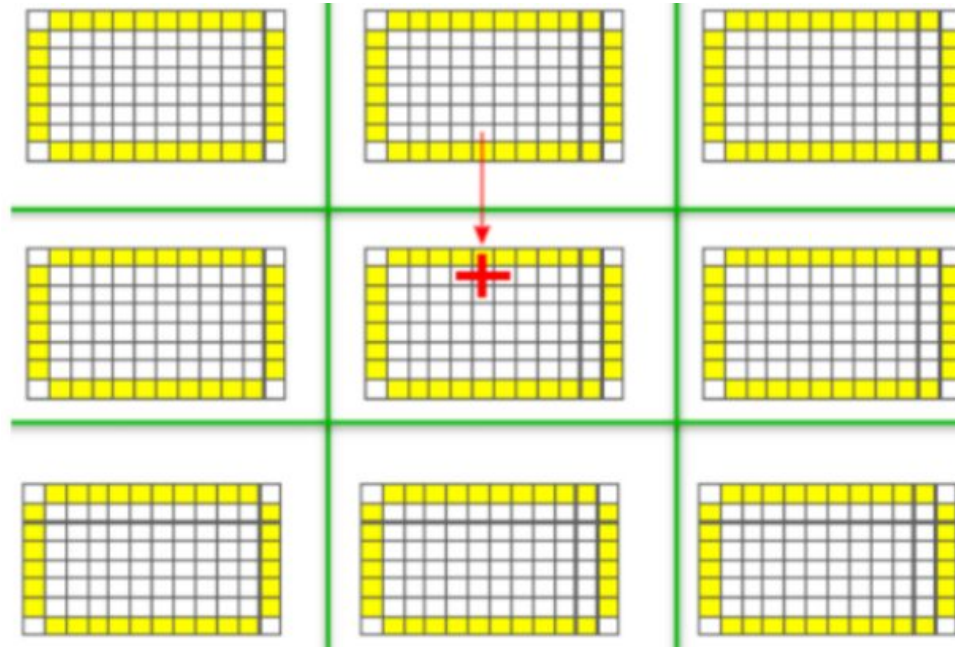
$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \approx \frac{U_{i+1,j} + U_{i,j+1} - 4U_{i,j} + U_{i-1,j} + U_{i,j-1}}{h^2}$$

## 3.3 - Divisão do domínio 2D



- **Paralelização:** o 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

```
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
```

**F90**

```
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]))
```

**Cython**

```
@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])))
```

**Numba**

# 4

## **Resultados: Análise de desempenho sequencial e paralelo (MPI)**

# 4.1 - Supercomputador Santos Dumont (SD)



**LNCC**  
Petrópolis, RJ

- Dedicado à pesquisa
- Posição 323 no [top500.org](https://www.top500.org/)

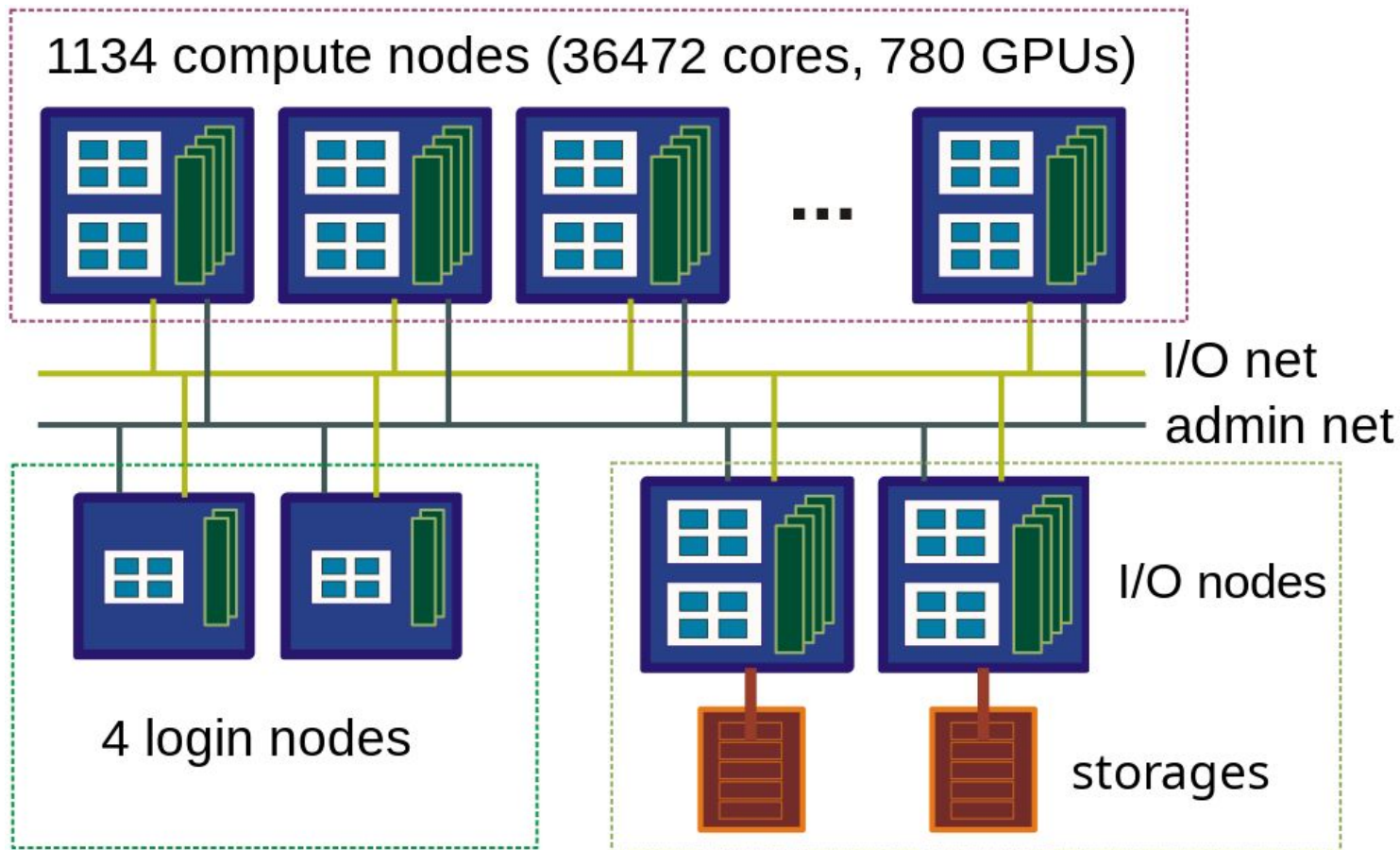


## 4.2 - Ambiente do supercomputador SD

- **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 - Arquitetura simplificada - SD





## 4.4 - SD - Tempos de processamento MPI (s)

	Seq.	Número de processos MPI							
		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

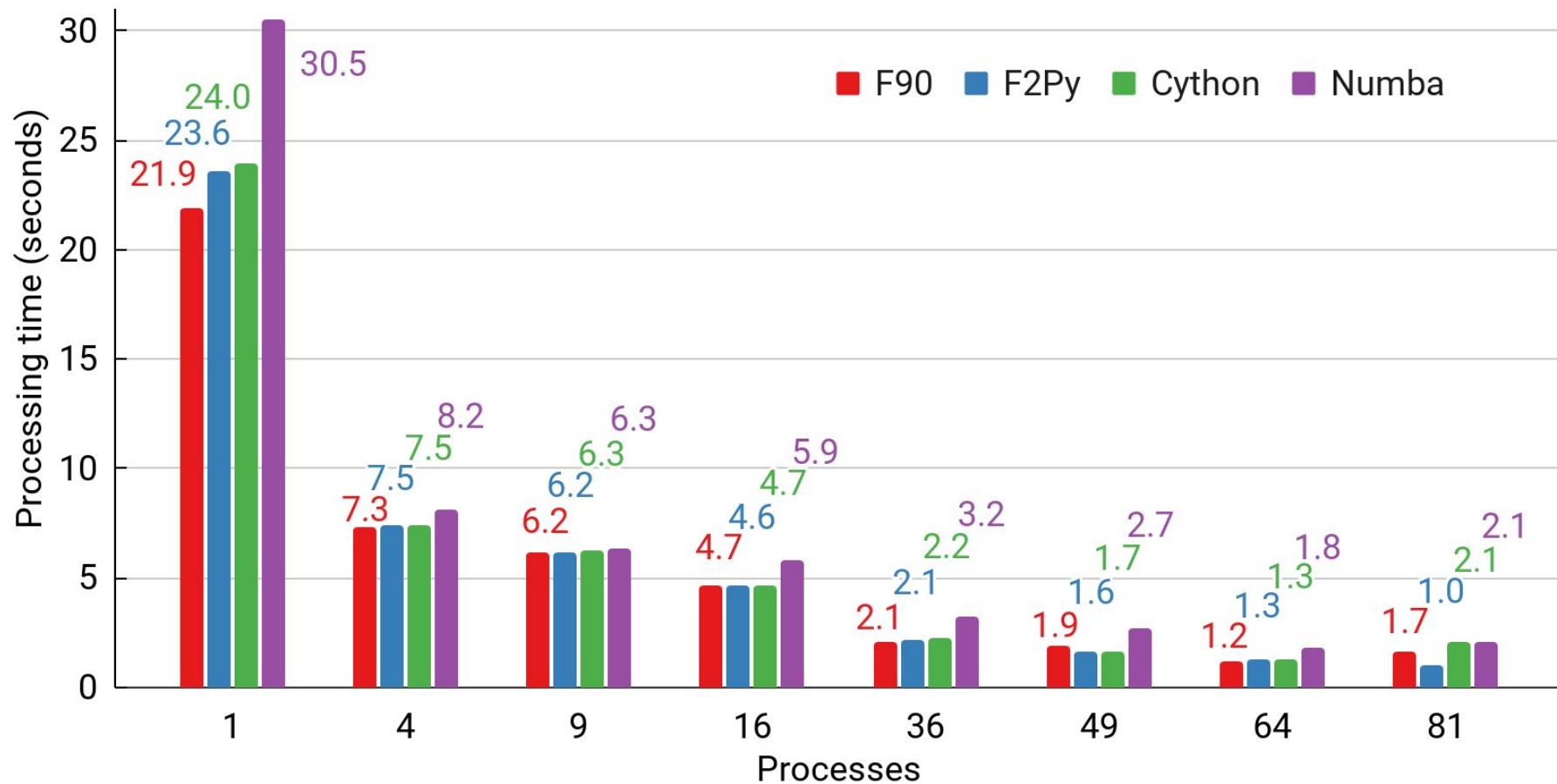
## 4.5 - SD - Speedup MPI

	Seq.	Número de processos MPI							
		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

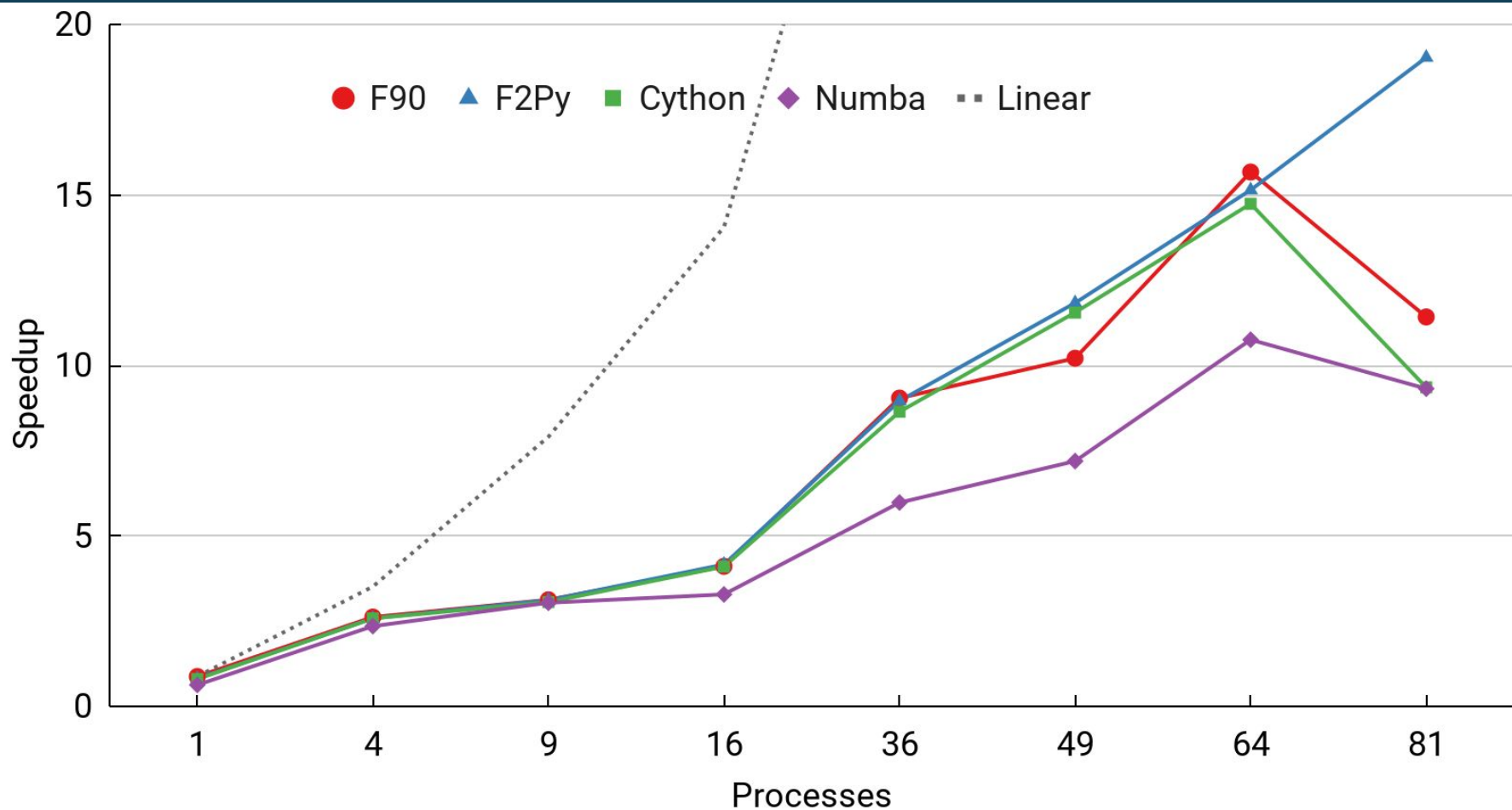
## 4.6 - SD - Eficiência paralela MPI

	Seq.	Número de processos MPI							
		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

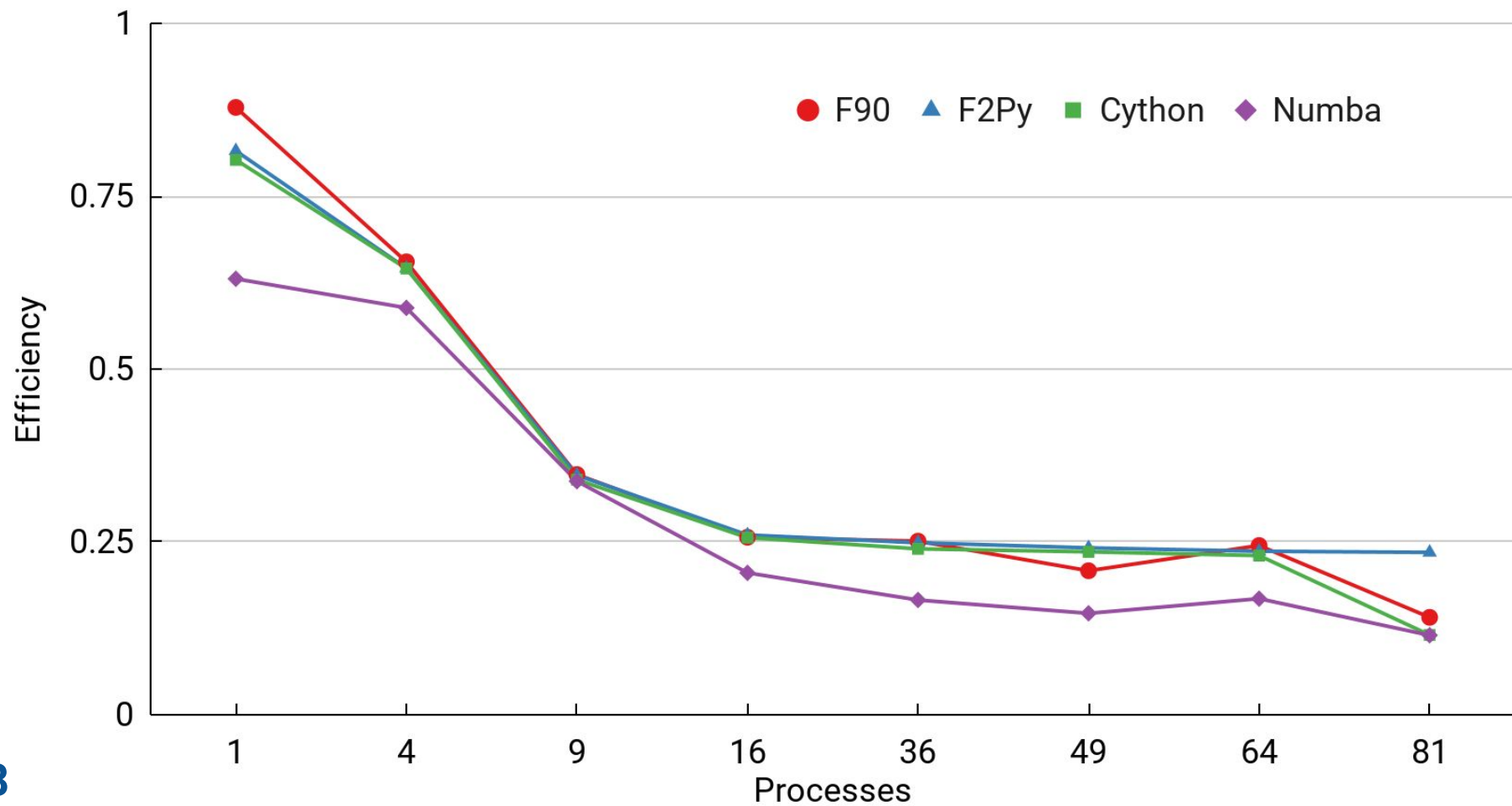
## 4.7 - SD - Tempos de processamento MPI (s)



## 4.8 - SD - Speedup MPI



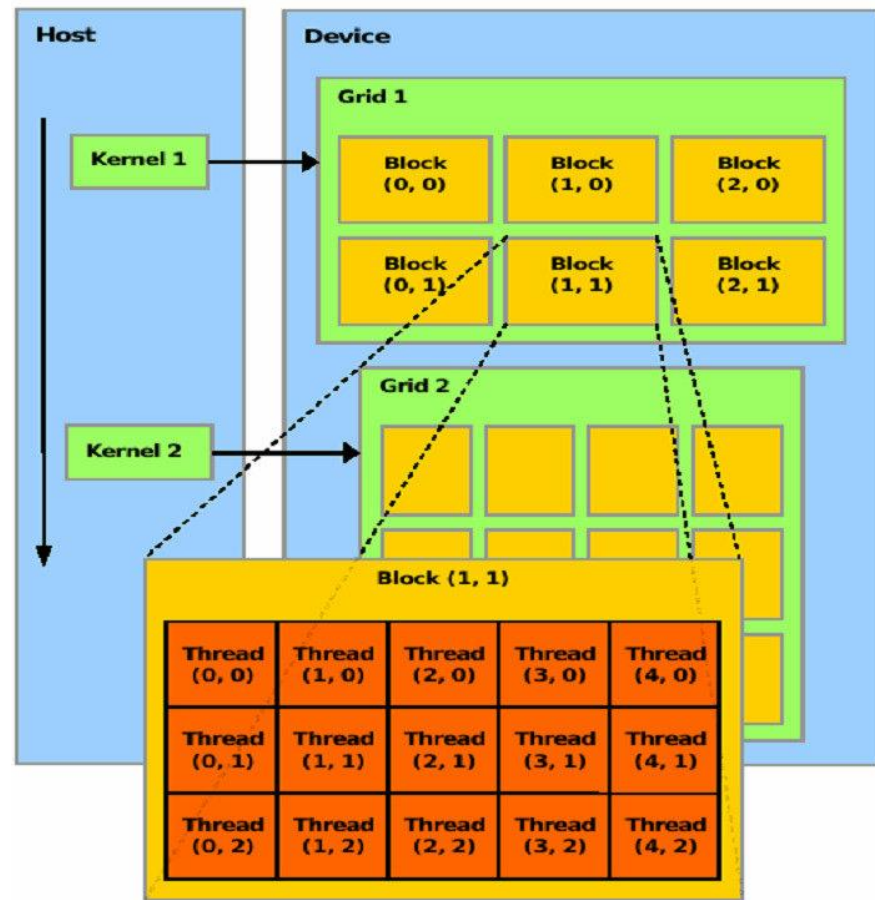
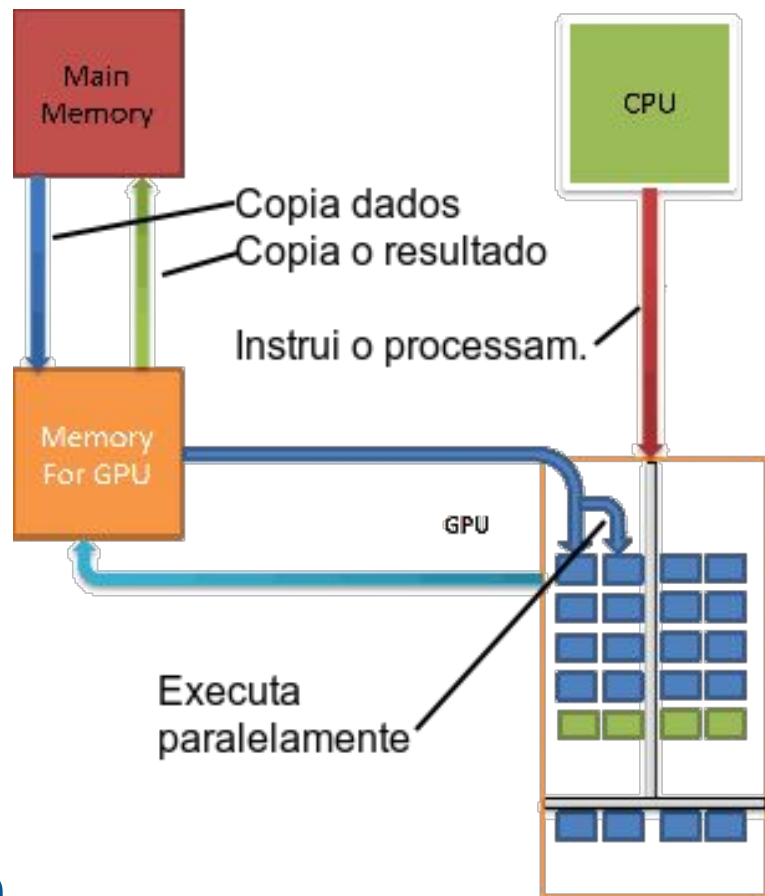
## 4.9 - SD - Eficiência paralela MPI



## 4.10 - SD - Comparação Numba-GPU x F90-MPI

(tempos em s)	GPU	Seq.	1	4	9	16
<b>F90/B715</b>		<u>19.3</u>	21.9	<u>7.3</u>	6.2	4.7
<b>F90/Seq-X</b>		15.8	15.6	4.1	2.1	1.5
<b>Numba-GPU/B715</b>	<u>22.3</u>					
<b>Numba-GPU/Seq-X</b>	<u>8.0</u>					

# 4.11 - Esquema padrão de execução em GPU





## 4.12 - SD - Exemplo executado “ao vivo”

- Jupyter Lab rodando no SD
- Sequencial: F90, Python padrão, e Numba
- Paralelo com threads: Numba
- Paralelo com MPI: Numba
- GPU: Numba
- Nós B-710 e Sequana, de login e de execução

## 4.13 - Não foi abordado nesta apresentação

- Biblioteca de threads específica para Python
- Fortran CUDA e similares para GPU
- DASK, LLVM, e ambientes similares
- Execução híbrida utilizando CPU e GPU ao mesmo tempo, aproveitando todos os recursos do nó.

# Mestrado CAP em andamento

Mestrado com término previsto para 2021 inclui também:

- Problema de difusão de calor (Numba/threads)
- Estudo de caso de FFTW (com *profiling*)
- Estudo de caso de Floresta Aleatória

# 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:** <http://github.com/efurlanm/tama21>