Programación paralela en Python

XI Semana de la Informática

Carlos García Sánchez

UCM

6 de febrero de 2025

- "Data Parallel C++ Programming Accelerated Systems Using C++ and SYCL", James Reinders

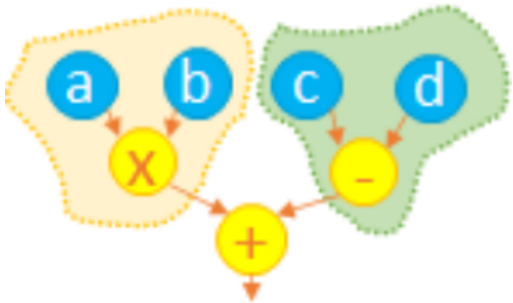
Outline

Python

- Lenguaje de programación destacado por **productividad**
- . . . pero con aplicaciones pesadas rendimiento puede verse comprometido
  - En la actualidad existen grandes esfuerzos por parte de la comunidad para optimizar paquetes empleados para "data-science"
  - . . . incluso explotación de los **niveles de paralelismo en un computador moderno**

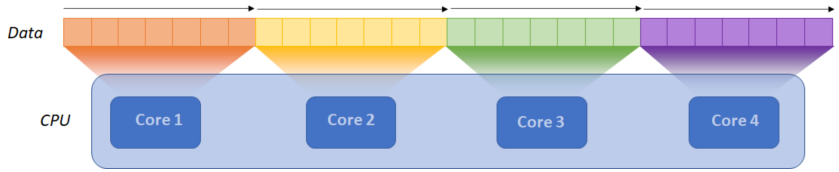
Niveles de paralelismo

- **ILP**: a nivel de instrucción si existen instrucciones independientes
  - En ej. instrucción '*' puede procesarse en paralelo con '-'

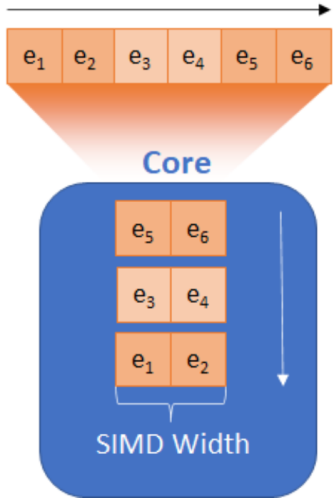


Niveles de paralelismo

- **Multiples cores**: multiples unidades de ejecución permiten procesar datos concurrentemente

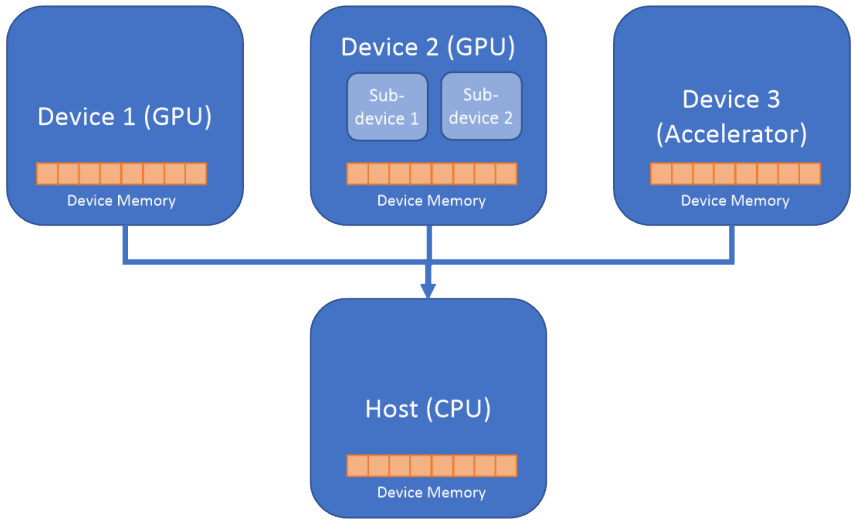


- **SIMD**: procesamiento en pequeños vectores
  - En ej. un SIMD=2 tardará la mitad



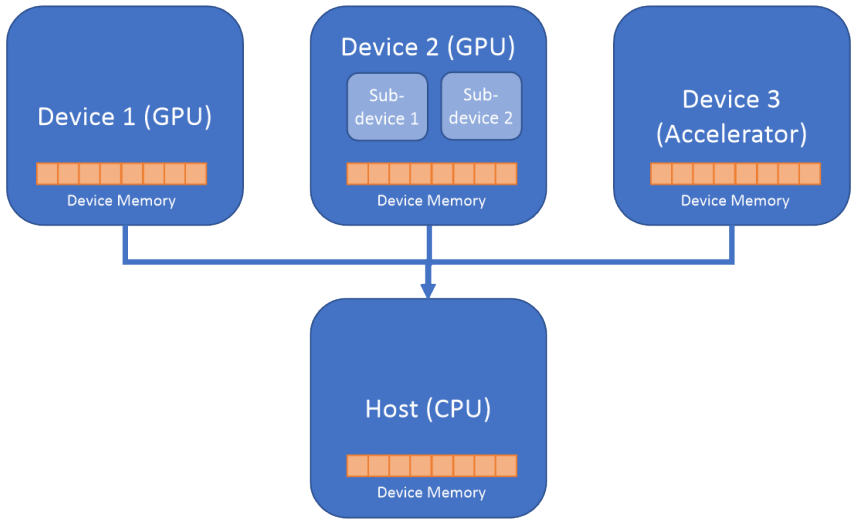
Computación heterogénea

- Python es un lenguaje interpretado, normalmente el código se ejecutará en CPU
  - . . . aunque conceptos de descargar código en "acelerador" o en los *offload devices* es útil para mejorar tiempos de ejecución



Computación heterogénea

- Esquema host-device
  - **Host** es el ejecutor del interprete de Python. Descarga trabajo en dispositivos
  - **Device** (o varios dispositivos: 2 GPUs y un acelerador) puede ejecutar cargas de trabajo o *kernels*



Computación heterogénea

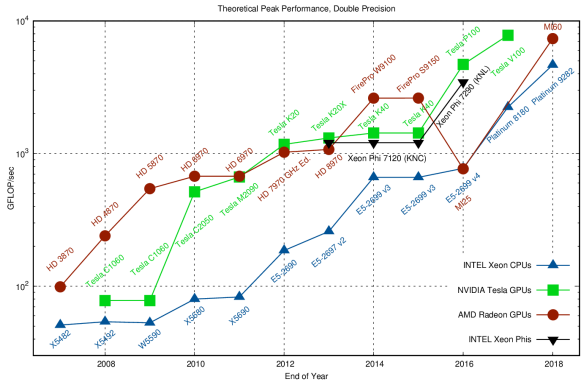
- Data Parallel Extensions for Python ofrece un modelo de programación donde el script de python permite la descarga de regiones paralelas en el/los dispositivo(s)
  - Se puede ejecutar multiples regiones paralelas y por tanto múltiples *offload kernels*
- Kernels son pre-compilados como librería como **dpnp** y alternativamente codificados en lenguajes heterogéneos como OpenCL o DPC++
- Data Parallel Extensions for Python permite la escritura directa en Python usando el compilador Numba con *numba-dpex* o la extensión del Data Parallel para Numba

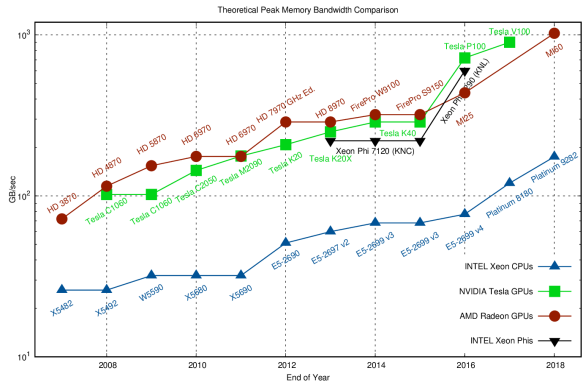
CPU vs GPU

- CPU
  - Propósito general
  - Bueno para el procesamiento en serie
  - Excelente para el paralelismo de tareas
  - Baja latencia por subproceso
  - Caché y control dedicados de área grande
- GPU
  - Altamente especializado para el paralelismo
  - Ideal para paralelismo de datos
  - alto rendimiento
  - Cientos de unidades de ejecución de punto flotante

CPU vs GPU

- GPU vs CPU (rendimiento)
  - GPU vista como co-procesadores de la CPU (**alto paralelismo**)
  - Descargan cómputo lanzado en *kernel* (lanzado asíncronamente)
  - CPU y GPU puede trabajar concurrentemente





Motivación

- Desafíos: muchos modelos de programación
  - Más abstración vs Más Rendimiento

+++ Abstraction					+++ Performance
python	C/C++ Fortran	OpenMP (Cores)	OpenMP target OpenACC	OpenCL CUDA	Vector Intrs. GPU Intrinsics

Retos

1. (Variedad): Muchos lenguajes con sus toolchains, versión a mantener e integrar
2. (Performance): Desarrollo de app con alto rendimiento habitualmente conlleva desarrolladores especializados
3. (Porting): Algunas abstracciones ofrecen soluciones para alto-rendimiento en diferentes arquitecturas

Algunas comparaciones

- Algunos modelos de programación para aceleradores

	CUDA	OpenACC	OpenMP (5.0)	SYCL
Language	C/C++	C/C++ Fortran	C/C++ Fortran	C/C++
Prog. Style		pragmas	pragmas	C++11 lambdas
Parallelism	SIMT	SIMD, Fork/join CUDA	SPMD, SIMD Tasks, Fork/join, CUDA	OpenCL
Licensing	Proprietary	Few comp.	Open-source	Open-source
Abstraction	Low	High	High	Medium

Alternativas en Python

- pycuda biblioteca en Python que permite interactuar con CUDA directamente
- pyopencl equivalente en OpenCL pero muy parecido a programar en OpenCL

Alternativas en Python

pycuda_vectoradd.py

```
import pycuda.autoinit
import pycuda.driver as cuda
import numpy as np
from pycuda.compiler import SourceModule

# kernel CUDA
mod = SourceModule(
"""
__global__ void add_vectors(float *a, float *b, float *c, int n) {
    int idx = threadIdx.x + blockIdx.x * blockDim.x;
    if (idx < n) {
        c[idx] = a[idx] + b[idx];
    }
}
"""
)
```

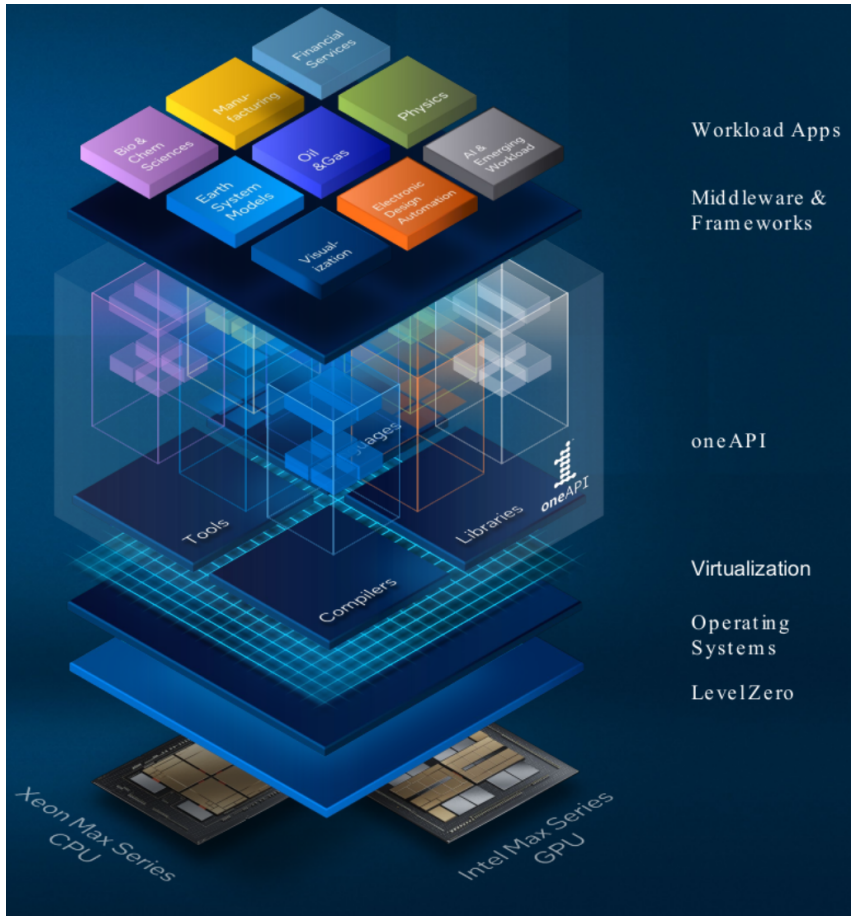
Alternativas en Python

pycuda_vectoradd.py

```
# kernel CUDA
...

n = 1024  # Tamaño del vector
h_a = np.random.rand(n).astype(np.float32)
h_b = np.random.rand(n).astype(np.float32)
h_c = np.empty_like(h_a)

# Reservar memoria en la GPU
d_a = cuda.mem_alloc(h_a.nbytes)
...

# Copiar datos a la GPU
cuda.memcpy_htod(d_a, h_a)
...

# Ejecutar el kernel CUDA
add_vectors = mod.get_function("add_vectors")
ths_per_block = 256
blocks_per_grid = (n + ths_per_block - 1) // ths_per_block
add_vectors(d_a, d_b, d_c, np.int32(n), block=(ths_per_block, 1, 1), grid=(blocks_per_grid, 1))

# Copiar el resultado de vuelta a la CPU
cuda.memcpy_dtoh(h_c, d_c)
```

oneAPI

- Modelo de programación unificado: diversas arquitecturas
- Lenguaje y bibliotecas optimizados
- Rendimiento equivalente lenguaje nativo de alto nivel
- Basado en estándares de la industria y especificaciones abiertas
- Compatible con los modelos de programación HPC

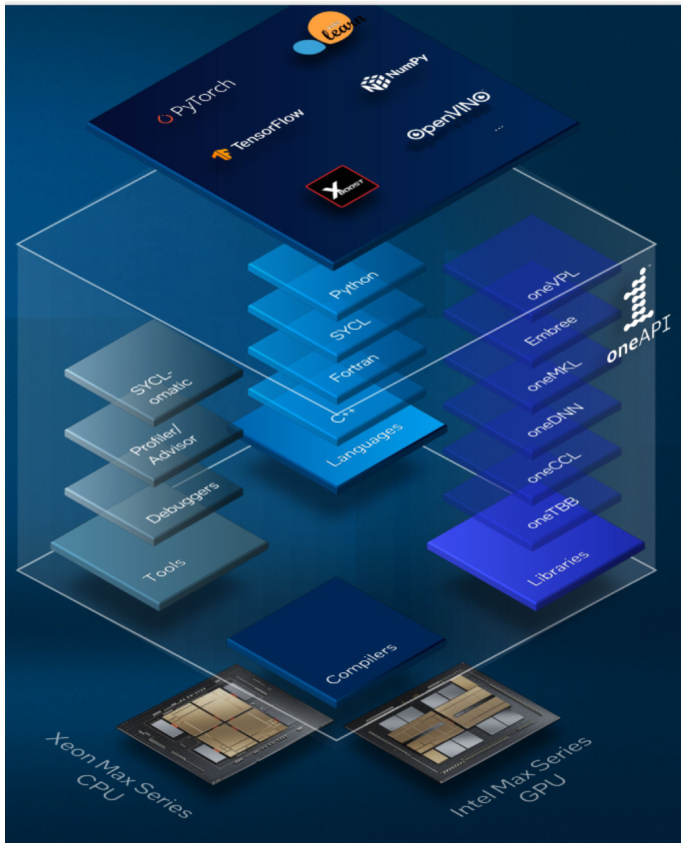


oneAPI

- Un lenguaje basado en estándares: C++ y SYCL
- Potentes API para acelerar funciones de dominio específico

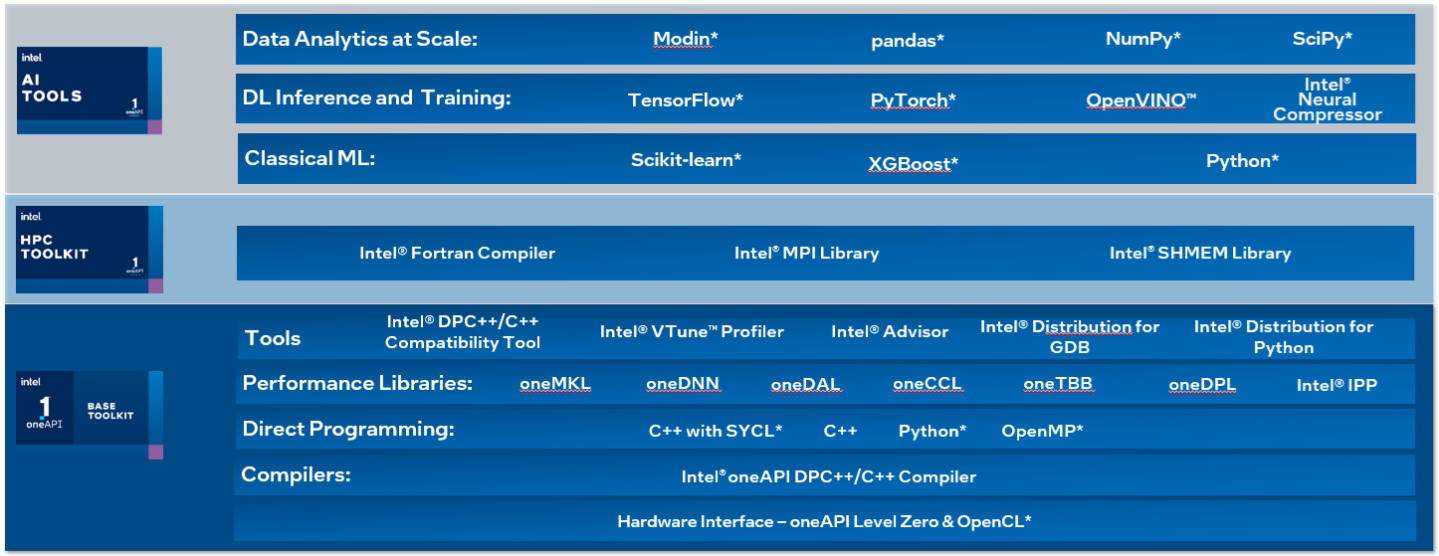
Soluciones a provedor único

- Estándar abierto para promover el apoyo de la comunidad y la industria
- Permite la reutilización de código en diferentes arquitecturas y proveedores



oneAPI

- Un conjunto completo de herramientas de desarrollo testeadas desde CPU a XPU
- Disponible para su instalación en Intel® oneAPI Toolkits



AI Tools Toolkit

- Acelera el flujo de trabajo desde un extremo al otro para aplicaciones IA y analítica de datos mediante librerías optimizadas para arquitecturas Intel
- ¿Para quién es interesante?
  - Desde científicos de datos, investigadores en IA, desarrolladores de aplicaciones IA y ML...
- Beneficios
  - Rendimiento en aplicaicones de DL desde el entrenamiento e inferencia: frameworks optimizados para archs Intel
  - Aceleraciones en aplicaciones de analítica de datos y ML intensivas en cómputo basadas en paquetes **python**

Numpy (vectorización)

- Reemplazando los bucles explícitos asociados a las operaciones entre vectores/arrays: SIMD
- En general operaciones entre arrays pueden lograrse entre 1 o 2 órdenes de magnitud de velocidad que las equivalentes *python puras*

Numpy (acelerada en oneAPI)

- Versión optimizada incluida en oneAPI
  - Última versión disponible en el Intel® AI Analytics Toolkit (AI Kit)

Python

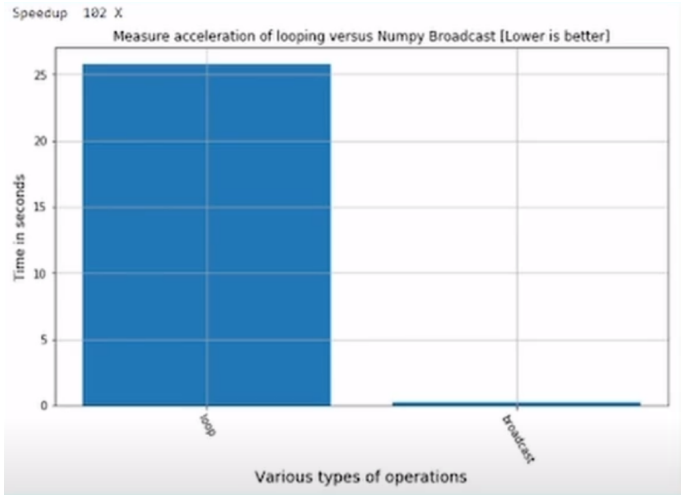
- Ventajas
  - Es rápido para desarrollar ideas
  - Se puede codificadar casi todo lo imaginable
  - Desarrolla un proyecto rápidamente... se pueden encontrar ejemplos en cualquier sitio
  - Fácil: sin tipado (dinámico) lo que hace la programación más sencilla
  - Rápido: gran cantidad de librerías disponible y fáciles de instalar
  - Aplicaciones de IA: sencillo de lograr portabilidad de los modelos desarrollados entre arquitecturas

Python

- . . . pero es **lento**
  - Tareas de bajo nivel repetitivas
  - Bucles largos
  - Bucles anidados
- Pero **exiten formas de mitigar los problemas**
  - Librerías optimizadas para las arquitecturas Intel
  - NumPy es un ejemplo
  - Otras librerías están también optimizadas

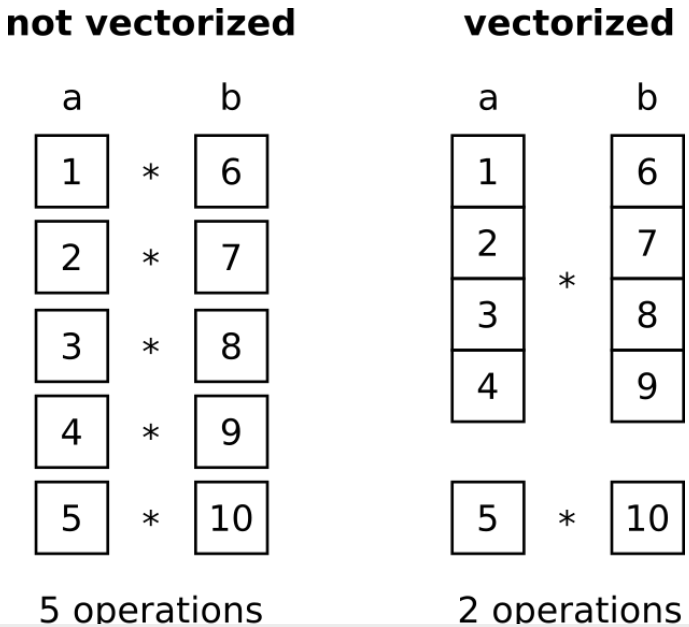
Vectorización

- La explotación de la vectorización **no es una teoría**
  - Altamente recomendable utilizar librerías optimizadas en Intel oneAPI como **NumPy**, **SciPy** y otras
  - Numpy (paralelismo inherente) permite explotar librerías optimizadas en oneAPI
- Ej: 100x de aceleración en Numpy *broadcasting* respecto al código descrito como bucle



Vectorización

- Python
  - Dinámicamente tipado
  - Hay que chequear el tipo de datos antes de operar...
- Incluso en operaciones tan "simples" como en enteros
  - Una clase o estructura puede contener: referencias (contadores) y otros valores

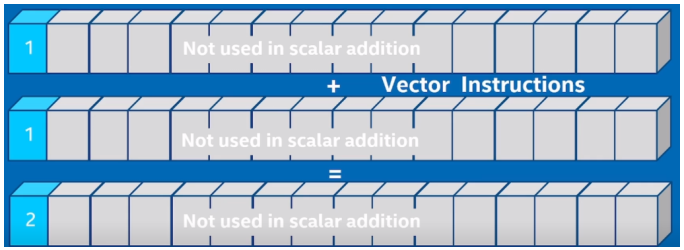


Vectorización

- Las operaciones escalares (no vectorizadas) no son eficientes
  - Como llevar un autobús con un pasajero en una ciudad
  - . . . trata de llenarlo

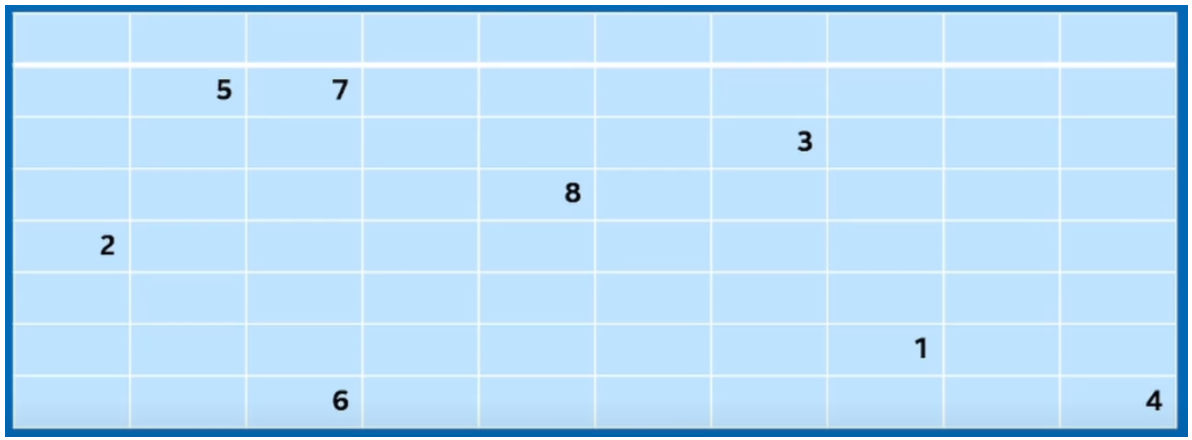
Terminal #1

```
>>> import numpy as np

>>> a = np.array([1, 2, 3, 4, 5])
>>> b = np.array([1, 7, 8, 9, 10])
>>> a + b
array([ 2, 9, 11, 13, 15])
```



Uso memoria ineficiente

- Una lista de enteros en python NO están contiguos en memoria
  - Ej: La lista [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]
- El acceso a estos datos en un bucle es muy costoso (cientos de ciclos)



Uso memoria ineficiente

- Los accesos a memoria "random" matan el rendimiento
  - Las CPUs modernas tienen un jerarquía de memoria para explotar "localidad espacial de datos"
  - Una línea de cache puede contener 16 elementos consecutivos
  - ... accesos aleatorios conlleva **no explotar localidad espacial**
- Símil: *Cocinero cocina un huevo frito*
  1. Abre el cartón de huevos
  2. Saca el huevo
  3. Lo fríe
- Más eficiente si hace 12 huevos al mismo tiempo y los fríe en una sartén grande
  - Pero acceder a datos "desordenados" supone abrir varios cartones de huevos para poder freirlos

Uso memoria eficiente y SIMD

- El uso de memoria de forma eficiente...
- ... accesos a datos consecutivos facilita la explotación SIMD
- El empaquetado de datos en el vector es inmediato y no conlleva hacer operaciones adicionales

Como puedo "reformular" el código a Numpy

- Numpy permite explotar la vectorización
  - Soporte de las funciones universales (ufuncs)
  - Indexación de datos evidente
  - Facilita broadcasting

Consejos

- Usar Numpy conlleva mejores patrones de acceso (explotación de jerarquía de memoria)
- Operaciones eficientes equivalentes a programar en "C"
- Reemplaza construcciones de bucles por construcciones con **ufuncs** incluso con condicionales:
  - Operaciones matemáticas: add, multiply, ... true_divide, power, log...
  - Operaciones trigonométricas: sin, cos... arctanh, ... degree, rad2deg...
  - Operaciones a nivel de bit: bitwise_and, ... left_shift,
  - Operaciones de comparación: greater, greater_equal, ... not_equal...
  - Operaciones de reducción

Paquete intel-numpy

- Disponible como paquete de python

Características

- NumPy optimizado con Intel® oneMKL para una multitarea, vectorización y gestión de memoria eficiente
- Proporciona objeto matriz N-dimensional, herramientas de integración (C/C++ y Fortran), funciones de álgebra lineal, transformadas de Fourier y números aleatorios...
- Distribuciones de NumPy en PyPI tienen licencia BSD

Hands-on

- Código disponibles en repositorio GitHub
- Instrucciones para crear cuenta en Intel® Tiber™ AI Cloud

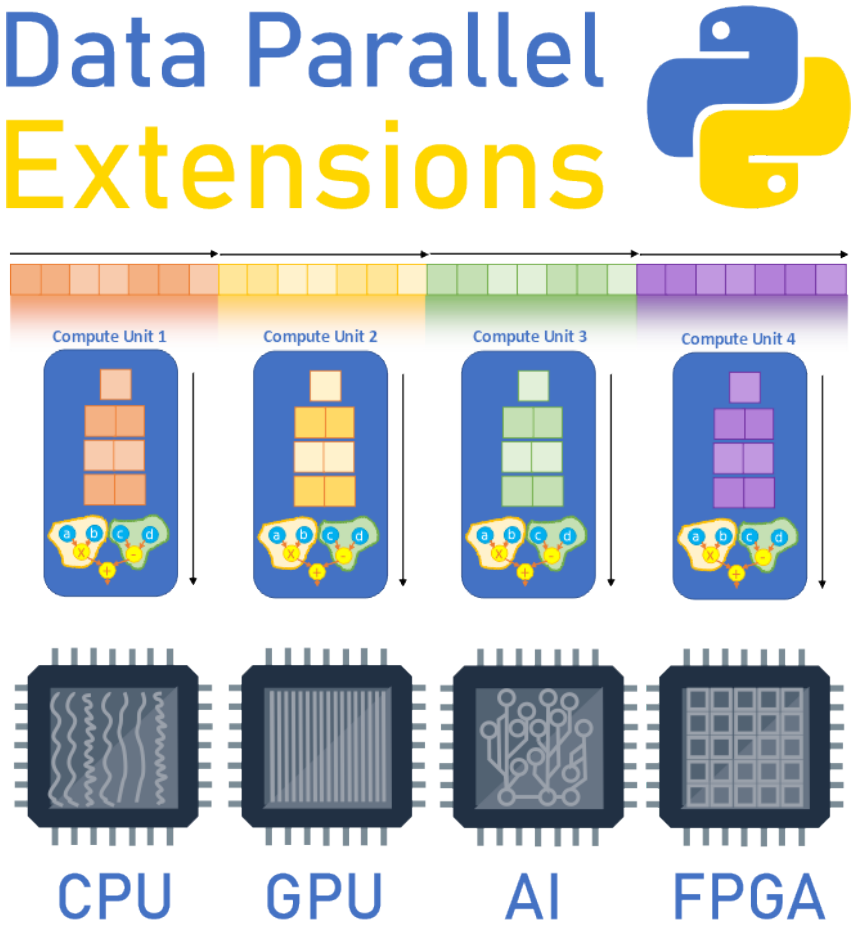
Instancias en Intel® Tiber™ Developer Cloud

- Core compute: Xeon 5th gen, Intel Core Ultra
- GPU: Intel Data Center GPU
- IA: Intel Gaudi HL

Hands-on

- Ejemplos que evidencian la mejora de rendimiento de Numpy en los cuadernos de Jupyter ML Speedups
  1. Cuaderno "Numpy/01_Numpy_How_Fast_Are_Numpy_Ops.ipynb" que evalúa las ganancias de NumPy vs bucles
  2. Cuaderno "Numpy/02_NumPy_UFUNCS.ipynb" presenta las ganancias de *ufuncs*
  3. Cuaderno "Numpy/03_NumPy_Aggregations.ipynb" presenta mejoras en operaciones de map&reduce
  4. Cuaderno "Numpy/04_NumPy_Broadcasting.ipynb" presenta mejoras en operaciones de expansión
  5. Cuaderno "Numpy/05_NumPy_Where_Select.ipynb" presenta ganancia en "selección" de valores
- **Cuaderno con ejercicios propuestos:** numpy.ipynb

Data Parallel para Python



Data Parallel para Python

- Las extensiones de Data Parallel para Python amplían las capacidades numéricas de Python
  - Más allá uso CPU: dispositivos de alto rendimiento como GPU
- Paquetes básicos:
  - **dpctl**: librería de control para seleccionar de dispositivos, la asignación de datos, datos tensoriales
  - **dpnp**: extensiones paralelas para Numpy
    - Implementa un subconjunto de Numpy
  - **numba_dpex**: extensiones del compilador Data Parallel para Numba
    - Extensión para el compilador Numba para programar dispositivos paralelos
- La implementación se basa en el estándar de SYCL

dpctl

- dpctl: contenedor ligero de Python sobre un subconjunto de la API de DPC++/SYCL
- Ej: selección de dispositivos

devices.py

```
import dpctl

d = dpctl.select_gpu_device()
d.print_device_info()
```

Terminal #1

```
    Name            Intel(R) Graphics
    Driver version  1.6.31294.120000
    Vendor          Intel(R) Corporation
    Filter string   level_zero:gpu:0
```

dpctl

- `dpctl.tensor` proporciona una descripción de un tensor N-dimensional
  - Tipos soportados int{8,16,32,64}, float{16,32,64}, bool, complex{64,1128}
- Creación de arrays (heredado de SYCL) soporta modelo USM
  - `to_device(device=target_device)`: mueve datos al dispositivo
  - `asarray()`: similar al anterior
  - `asnumpy(tensor)`: convierte un "usm_ndarray" en tipo numpy

dpctlExample.py

```
x_cpu = tensor.ones((2, 2), device="cpu")
x_gpu = tensor.ones((2, 2), device="gpu")
x_to_gpu = x_cpu.to_device("gpu")
x_np = numpy.ones((2,2))
x2_to_gpu = tensor.asarray(x_np, device="gpu")
```

dpctl

- `dpctl.tensor` proporciona una descripción de un tensor N-dimensional

dpctlExample.py

```
from dpctl import tensor
import numpy

x_cpu = tensor.ones((2, 2), device="cpu")
x_gpu = tensor.ones((2, 2), device="gpu")
x_to_gpu = x_cpu.to_device("gpu")
x_np = numpy.ones((2,2))
x2_to_gpu = tensor.asarray(x_np, device="gpu")

w = tensor.asarray([x_cpu, x_gpu, x_np, x_to_gpu, x2_to_gpu], device="cpu")
y = w + w + 1
print("Tensor y device:", y.device)
print("Tensor y shape:", y.shape)
y_np = tensor.asnumpy(y)
print("max: ", numpy.max(y_np))
```

dpctl

- `dpctl.tensor` proporciona una descripción de un tensor N-dimensional

Terminal #1

```
Tensor y device: Device(opencl:cpu:0)
Tensor y shape: (5, 2, 2)
max:  3.0
```

Datos escalares y arrays

- Tipos de datos básicos en Python y Numpy: `float`, `int`, `complex`
  - Representar datos escalares y se almancenan en el host
- Arrays se pueden almacenar en la memoria USM con `dpctl.tensor.usm_ndarray` y `dpnp.ndarray`
  - Recordar el concepto de Compute-Follow-Data

Extensión Data Parallel para NumPy-dpnp

- La librería `dpnp` (NumPy Drop-In Replacement for Intel(R) XPU) permite desarrollar aplicaciones en entorno NumPy en dispositivos paralelos
- Se puede partir de un script escrito en NumPy

```
# Original numpy code
import numpy

X = np.array([1,2,3])
Y = X * 4
```

Extensión Data Parallel para NumPy-dpnp

- Reemplazando un subconjunto de instancias a **numpy** ahora podemos ejecutar código en GPU

```
# Transformed numpy into dpnp
import dpnp as numpy

X = np.array([1,2,3])
Y = X * 4
print("Array X allocated on the device:", X.device)
```

Extensión Data Parallel para NumPy-dpnp

- `np.array` crea un array en el dispositivo SYCL por defecto, que puede ser una "gpu"
- De forma transparente para el desarrollador x se crea en el acelerador y se computa en el acelerador siguiendo el modelo "Compute-Follow-Data"

```
# Transformed numpy into dpnp
import dpnp as numpy

X = np.array([1,2,3])
Y = X * 4
print("Array X allocated on the device:", X.device)
```

Extensión Data Parallel para NumPy-dpnp

- La creación de array tiene unos argumentos adicionales opcionales:
  - device: para indicar el dispositivo asociado: “host”, “device” o “shared”
  - queue: para seleccionar la cola
  - usm_type: el tipo de memoria USM seleccionada

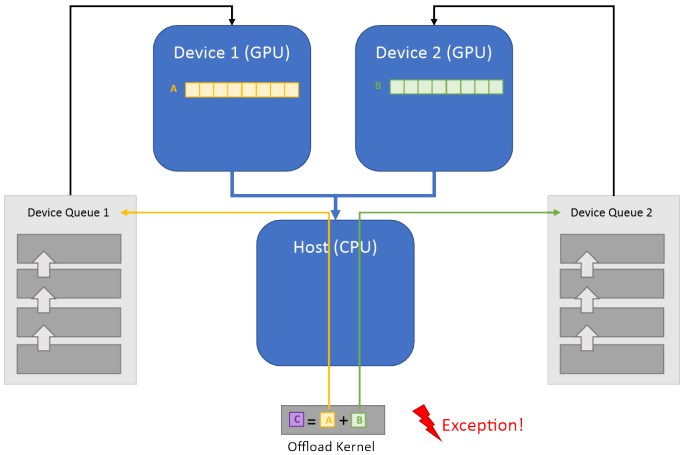
example2.py

```
import dpnp as np

x = np.empty(3)
try:
    x = np.asarray([1, 2, 3], device="gpu")
except:
    print("GPU device is not available")

print("Array x allocated on the device:", x.device)

y = np.sum(x)
```

Extensión Data Parallel para NumPy-dpnp

- "Data Parallel Extensions for Python" requiere que los datos (tensores/arrays) estén alojados en la misma cola de ejecución

```
A=dp.array([1,2,3], device="gpu:0")
B=dp.array([1,2,3], device="gpu:1")
C=A+B # Error! Array are on different devices
```



Gestión de datos y cómputo

- Modelo **offload** soportado
  - API común en python para cómputo offload en sintaxis python
  - La descarga del kernel se produce donde los datos residen ('compute follows data')

```
X = dp.array([1,2,3])
Y = X * 4
```

Executed on default device

```
X = dp.array([1,2,3], device="gpu:0")
Y = X * 4
```

Executed on "gpu:0" device

```
X = dp.array([1,2,3], device="gpu:0")
Y = dp.array([1,2,3], device="gpu:1")
Z = X + Y
```

Error! Arrays are on different devices

Hands-on

- Ejemplos para poder usar las funcionalidades del "Data Parallel Extension for Python"
  1. Cuaderno "DPEX/01-get_started.ipynb" que presenta la librería de control `dpctl`
  2. Cuaderno "DPEX/02-dpep_scalability_journey_example-pairwise_distance.ipynb" presenta ejemplos de uso de la libería `dpnp` tomando como caso de uso el cálculo de la distancia de pares de puntos en Numpy, y empleado `dpnp` tanto en CPU como GPU
- **Cuaderno con ejercicios propuestos:** ejercicio_dpnp.ipynb
  - Ejemplo de multiplicación de matrices
  - Cálculo de π mediante el método de Monte-Carlo
  - Simulación de *n-body* empleando la Ley de Gravitación Universal (Newton)

Recursos disponibles

- Curso ML con oneAPI
- Iniciativa oneAPI
- Intel IA Tools
- Documentación de Intel® Extension for Scikit-learn
- Repo Intel® Extension for Scikit-learn en GitHub
- Documentación de Intel® Extension for PyTorch
- Repo IPEX en GitHub