HPC con Python

Algunas herramientas de optimización de alto nivel en python



Memoization

- La memoización es una técnica de optimización utilizada en programación y computación para mejorar el rendimiento de algoritmos, especialmente en casos donde se realizan cálculos costosos y recurrentes.
- El principio fundamental de la memoización es almacenar en memoria caché (memoria temporal) los resultados de cálculos anteriores para que, cuando se requieran nuevamente con los mismos parámetros de entrada, se puedan recuperar desde la memoria caché en lugar de volver a calcularlos.

```
In [2]: import time

def calculo_lento(x):
    time.sleep(3)
    return x ** 2

In [5]: %*time
    calculo_lento(2)

CPU times: user 1.74 ms, sys: 0 ns, total: 1.74 ms
Wall time: 3.01 s

Out[5]:
4
```

Memoization en memoria

Esto no es util para resultados y entradas grandes por que te explota el RAM

```
In [12]: import functools
calculo_lento = functools.cache(calculo_lente)

In [10]: %*time
    calculo_lento(20)

CPU times: user 2 μs, sys: 3 μs, total: 5 μs
Wall time: 7.15 μs
Out[10]:
400
```

Memoization

{2: 4, 3: 9}

decorar la función al momento de la creación

```
In [16]: cache = {}
        def calculo lento(x):
    if x not in cache:
        time.sleep(3)
        cache[x] = x ** 2
    return cache[x]
In [13]: import functools
        import time
@functools.cache
def calculo lento(x):
    time.sleep(3)
    return x ** 2
In [22]: %time
        cache
CPU times: user 2 \mus, sys: 0 ns, total: 2 \mus
Wall time: 4.29 μs
Out[22]:
```

Problema

```
In [30]: %time
    import numpy as np
import joblib

def open_file(idx):
    fname = "fake_files/file_{{}}.npy".format(idx)
    with open(fname, "rb") as fp:
        nums = np.load(fp)
    return nums

with joblib.Parallel() as P:
    open_file_d = joblib.delayed(open_file)
    queue = (open_file_d(idx) for idx in range(500))
    results = P(queue)
```

CPU times: user 84.8 ms, sys: 183 ms, total: 268 ms Wall time: 267 ms $\,$

Joblib



Ayudante simple para facilitar la escritura de código paralelo legible y depurarlo rápidamente.

\$ pip install joblib
\$ conda install joblib

Joblib - Multiprocessing

```
In [31]: %time
    import numpy as np
import joblib # import Parallel, delayed

def open_file(idx):
    fname = "fake_files/file_{}.npy".format(idx)
    with open(fname, "rb") as fp:
        nums = np.load(fp)
    return nums

with joblib.Parallel(n_jobs=-1, backend="loky") as parallel:
    delayed_open_file = joblib.delayed(open_file) # una decoracion
    queue = (delayed_open_file(idx) for idx in range(5000))
    results = parallel(queue)
```

```
CPU times: user 2.57 s, sys: 3.69 s, total: 6.26 s Wall time: 6.69 s
```

Joblib - Comunicación de procesos

Como hay varios backends y la idea es ser genérico para todos, joblib no brinda mecanismos de comunicación ni de sincronización portables entre backends. En lugar de eso, propone usar numpy memmap, que es un array en disco.

```
In [33]: def open file(idx, means):
            fname = "fake_files/file_{}.npy".format(idx)
    with open(fname, "rb") as fp:
        nums = np.load(fp)
    means[idx] = np.mean(nums)
    return nums
In [34]: means = np.memmap("archivo.mm", mode="w+", dtype=float, shape=5000)
with joblib.Parallel(n jobs=-1, backend="loky") as parallel:
    delayed open file = joblib.delayed(open file) # una decoracion
    results = parallel(
        delayed_open_file(idx, means)
        for idx in range(5000)
In [35]: means
Out[35]:
memmap([-0.00238283, 0.00066254, 0.00398775, ..., 0.00048522,
         0.00108556, 0.002679751)
```

Joblib - Multi-Threading

```
In []: %time
import joblib # import Parallel, delayed

def open_file(idx):
    fname = "fake_files/file_{{}}.npy".format(idx)
    with open(fname, "rb") as fp:
        nums = np.load(fp)
    return nums

with joblib.Parallel(n_jobs=1, backend="threading") as parallel:
    results = parallel(
        joblib.delayed(open_file)(idx) for idx in range(5000))
```

Joblib - Memoization en disco!

Útil para datos grandes! (pero te aumenta el I/O) 🎃

```
In [36]: from joblib import Memory
        mem = Memory("mi cache")
@mem.cache
def calculo_lento(x):
    time.sleep(3)
    return x ** 2
In [38]: %time calculo_lento(2)
CPU times: user 458 μs, sys: 576 μs, total: 1.03 ms
Wall time: 995 μs
Out[38]:
4
In [43]: joblib.dump(1, "archivo.jb")
Out[43]:
1
In [39]: !ls mi_cache/joblib
main --tmp-ipykernel-3768585022
```

Multithreaded programming





In []: