PythonからC++ライブラリを呼び出す話

T. Aoyama (KEK)

第13回 HPC-Phys勉強会
2021/11/25

Outline

- はじめに
- Python extension を書く
- 事例紹介: PyBridge++
- 落とし穴
- まとめ

Python Programming Language

- Pythonとは
  - 動的型付けのオブジェクト指向言語。
  - 簡潔で表現力の高いコードでプログラムを記述できる。
  - 様々なライブラリ・フレームワークなどが開発され、エコシステムを形成している。
  - 近年は、AIや機械学習の文脈でよく利用されている。
  - 様々なプラットフォームで動作する。UNIX/Linux, Windows, MacOS など。intel Python などのdistributionもある。

Python Programming Language

- Python を”拡張”する:
  - Pythonプログラムの Hot Spot を C/C++ で高速化する
  - 既存の C/C++ ライブラリを Python から使えるようにする
    - 今回は後者の視点

- 数値シミュレーションの文脈では:
  - Rapid prototyping によるプログラム開発
  - 数値計算と解析を統合
    - 数値計算 → 結果の出力 → 統計処理・可視化
    - jupyter notebook 上で一連の処理を実行
  - パラメータファイルと計算ロジックを融合
    - cf. スクリプト言語をフロントエンドとして埋め込み

Writing Python Extension

- Python Extension を書くには:
  - CPython (標準実装, C API を提供)
  - Cython (Python-like な文法で exntesion を記述する言語)
  - SWIG (グルーコードを生成する汎用ツール)
  - Boost.Python (C++用の Python binding)
  - **pybind11** (C++ テンプレートライブラリ)
  - and others.

Writing Python Extension

C++ code

```
class Field {
 public:
  Field(int size) { ... }
  double norm() const { ... }
};
```

Python binding by pybind11

```
#include <pybind11/pybind11.h>

namespace py = pybind11;

PYBIND11_MODULE(pybridge, m) {
  py::class_<Field>(m, "Field")
    .def(py::init<int>())
    .def("norm", Field::norm);
}
```

using from Python

```
import pybridge as pyb

f = pyb.Field(size)
v = f.norm()
```

具体例:

C++ で記述された Field クラス (Vectorのようなもの) を pybind11 により Python から使えるようにする

Writing Python Extension

C++ code

```
class Field {
 public:
  Field(int size) { ... }
  double norm() const { ... }
};
```

C++で”Field”クラスを定義。
int引数のコンストラクタと
doubleを返すnorm()メソッドを
導入。

Python binding
by pybind11

```
#include <pybind11/pybind11.h>

namespace py = pybind11;

PYBIND11_MODULE(pybridge, m) {
  py::class_<Field>(m, "Field")
    .def(py::init<int>())
    .def("norm", Field::norm);
}
```

using from Python

```
import pybridge as pyb

f = pyb.Field(size)
v = f.norm()
```

Writing Python Extension

C++ code

```
class Field {
 public:
  Field(int size) { ... }
  double norm() const { ... }
};
```

Python binding by pybind11

```
#include <pybind11/pybind11.h>

namespace py = pybind11;

PYBIND11_MODULE(pybridge, m) {
  py::class_<Field>(m, "Field")
    .def(py::init<int>())
    .def("norm", Field::norm);
}
```

using from Python

```
import pybridge as pyb

f = pyb.Field(size)
v = f.norm()
```

まず pybind11.h ヘッダを include

“pybridge”モジュールを定義するマクロ

“Field”クラスを Python 側に導入

コンストラクタとnorm() メソッドを追加

.def() 指示はチェインできる

Writing Python Extension

C++ code

```
class Field {
 public:
  Field(int size) { ... }
  double norm() const { ... }
};
```

Python binding by pybind11

```
#include <pybind11/pybind11.h>

namespace py = pybind11;

PYBIND11_MODULE(pybridge, m) {
  py::class_<Field>(m, "Field")
    .def(py::init<int>())
    .def("norm", Field::norm);
}
```

using from Python

```
import pybridge as pyb

f = pyb.Field(size)
v = f.norm()
```

“pybridge”モジュールを import

Fieldクラスのインスタンスを作り、メソッドを呼び出す

Writing Python Extension

- Buildのしかた
  - (1) pybind11 をインストール
    - pip などのパッケージ管理ツール、または
    - github からソースを取得. (make は不要)
      - https://github.com/pybind/pybind11
  - (2) コンパイル

```
g++ -O3 -shared -fPIC -std=c++11  \
   `python3 -m pybind11 --include` \
   -o pybridge`python3-config --extension-suffix` \
   pybridge.cpp [...]
```

pybridge.cpython-35m-x86_64-linux-gnu.so が生成される。(下線部は環境依存)

Writing Python Extension

- pybind11 とは
  - C++の関数やクラスをPythonから呼び出せるようにする header-only な template library。
  - pybind11の機能
    - 関数　任意の引数型・戻り値型の関数を bind.
    - クラス　Pythonのクラスとして bind.
      - インスタンスメソッド・クラスメソッドを expose.
      - 継承・仮想関数・オペレータオーバーロードに対応
    - 列挙型など
    - STLコンテナ
      - Python の Array, Dictionary, Tuple に map される
    - 例外処理

Writing Python Extension

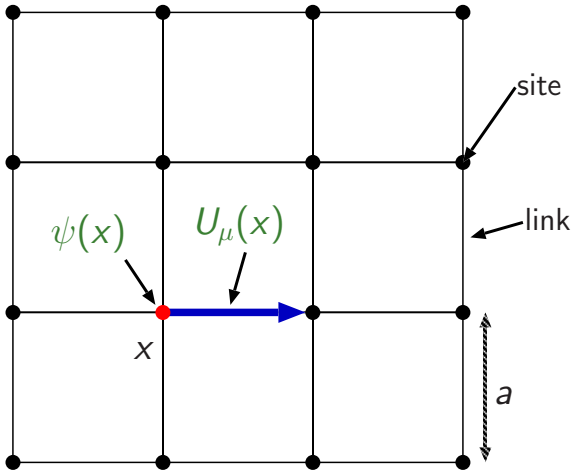
- pybind11 とは
  - pybind11の機能 (con't)
    - Python のデータ型
      - 配列や辞書型は py::array, py::dict として import される。STLコンテナのように扱える
    - docstring
      - docstring を記述できる。help で参照可

        py::class_<Field>(m, "Field", R"pydoc(*description...*)");

    - numpyのサポート
      - numpyの多次元配列と相互利用可

Lattice QCD

- QCD (Quantum ChromoDynamics)
  - クォーク・グルーオン間に働く「強い相互作用」の理論
  - 低エネルギー(長距離)で結合定数が増大, 解析的に解けない
  - 数値的手法による研究



- 格子QCD
  - 離散化された時空上の場の理論
    - クォーク場:　格子点上の自由度 [ψ(x)]
    - グルーオン場: リンク上のSU(Nc) [$U_\mu(x)$]
  - 経路積分量子化
    - モンテカルロ法による数値シミュレーション

Python and Lattice QCD

- 格子QCDシミュレーションの Python ライブラリ:
  - “pyQCD: A Native Lattice Simulation Package for Python”, M. Spraggs, PoS LATTICE 2014 (2014) 050.
    - Pythonライブラリと拡張可能なAPIの定義。1ノードで格子QCDシミュレーションを実行。
    - Boost.Pythonを使って内部のC++コードをwrapする。GPU対応、Dirac演算子のinversionを高速化。
  - GPT (Grid Python Toolkit) by C. Lehner
    - Grid Lattice QCDライブラリ (P. Boyle) をベースにした Python toolkit。
    - Grid は MPI, OpenMP, SIMD, SIMT によるデータ並列環境を提供。
    - データ並列処理は CPython で書かれ、QCDのアルゴリズム部分は Python module として実装。.
  - **PyBridge++** by Bridge++ project team
    - Bridge++格子QCDコードセットの Python binding。pybind11で実装。

Bridge++

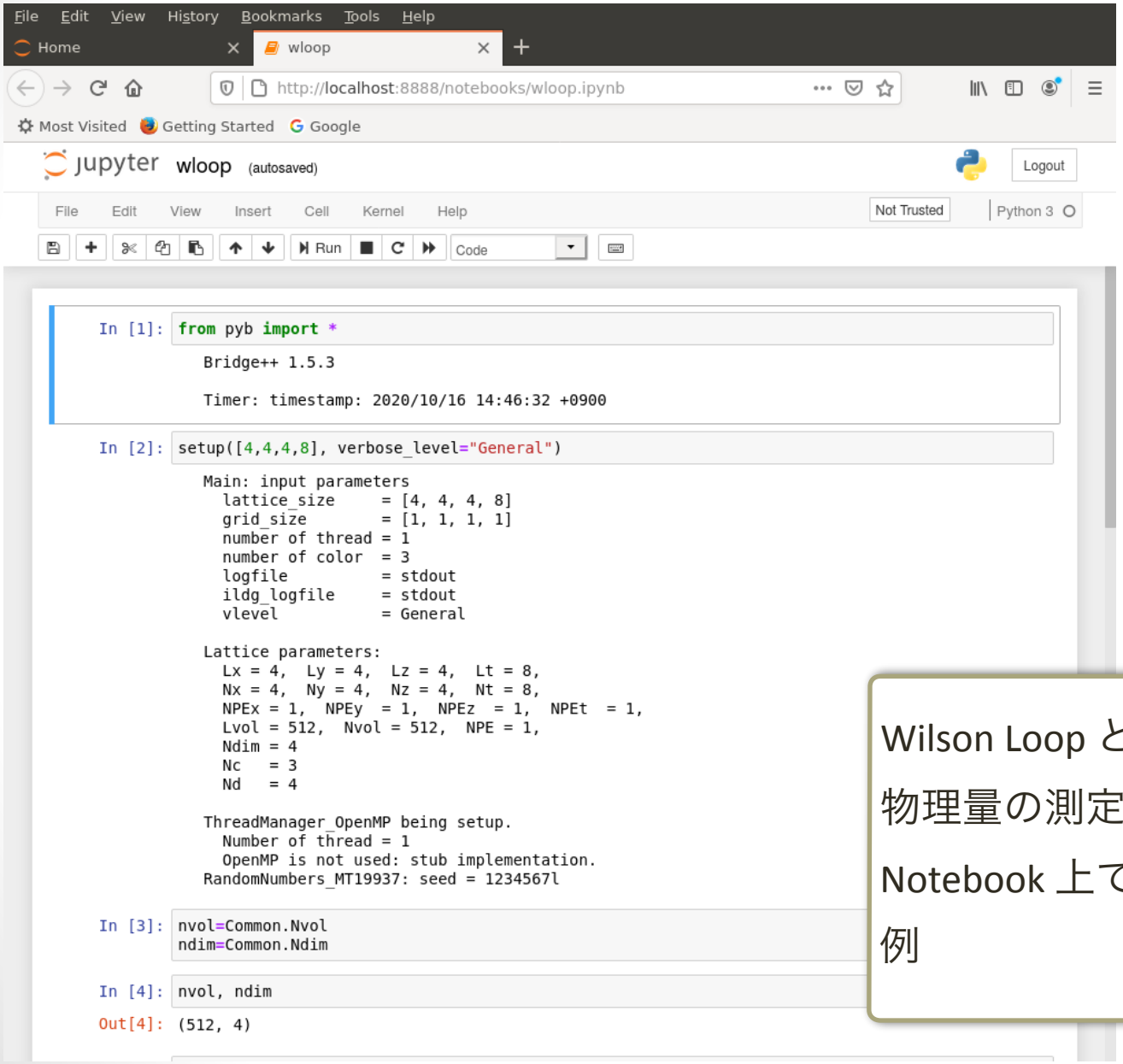
- Overview
  - 格子ゲージ理論シミュレーションのための汎用コードセット
  - オブジェクト指向デザイン、C++ で記述
  - 開発ポリシー
    - 可読性・拡張性・可搬性のある高速なコードセット
- History
  - 2009年スタート、2012年に version 1.0 を正式リリース
  - 最新版は version 1.6.1 (2021年6月).
  - 国内外の研究グループでの利用実績. 引用件数 55件.
- Members
  - Y. Akahoshi, S. Aoki, H. Nemura (YITP), T. Aoyama, H. Matsufuru (KEK), I. Kanamori (RIKEN), K. Kanaya, Y. Taniguchi (Tsukuba), Y. Namekawa (Kyoto), and contributors.

Bridge++ and Python

- Bridge++ の機能: C++ class として構成されている
  - Fields (時空上の自由度), 線形代数演算,
  - Dirac演算子の様々な定式化, 線形方程式ソルバ,
  - Monte Carlo アルゴリズム, ゲージおよびフェルミオン作用,
  - Plaquette, Wilson Loop, quark相関関数など,
  - ファイル入出力, 乱数生成, その他ツール,
  - MPIおよびOpenMP で並列化.

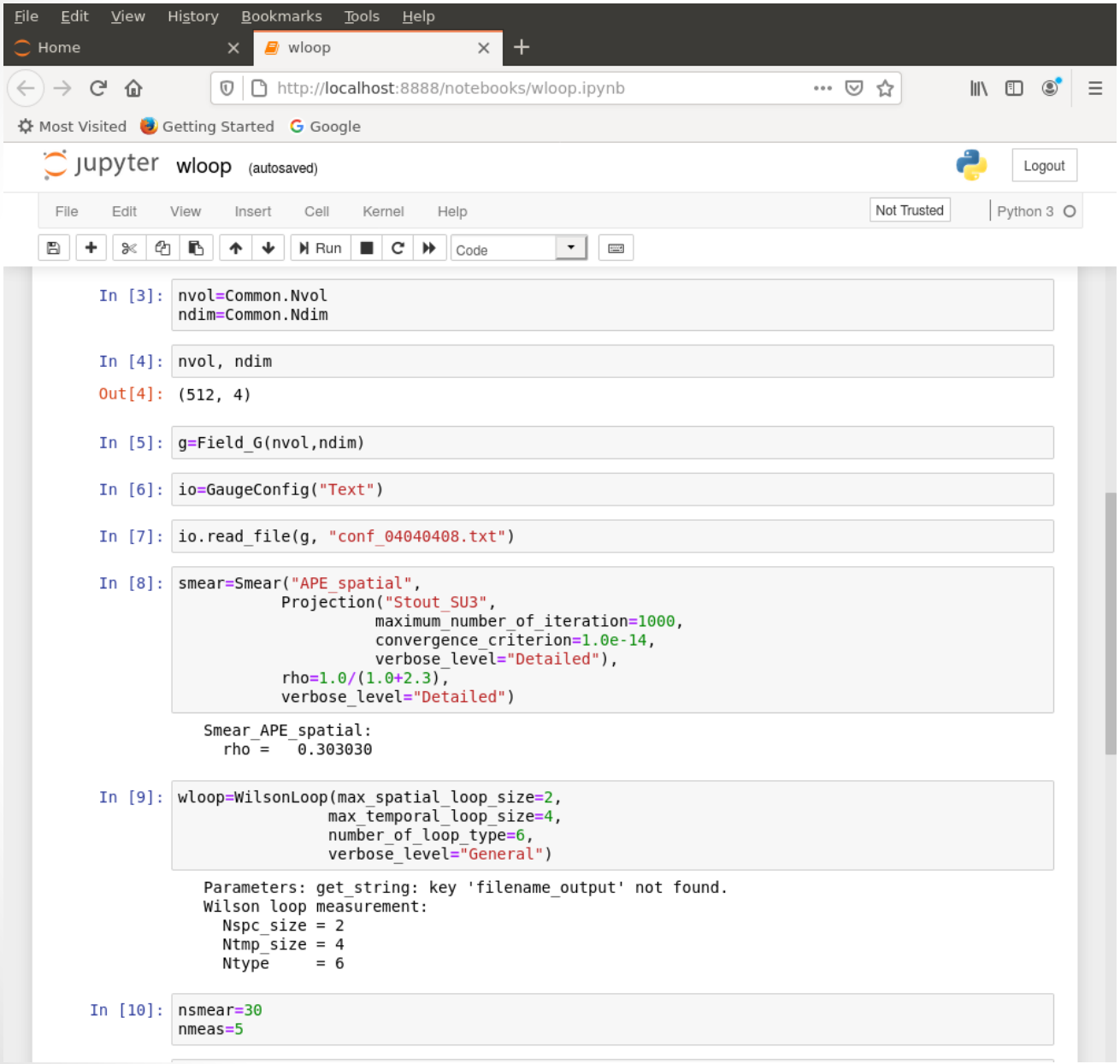
- Bridge++ のPython binding:
  - クラス・関数の “Wrapper” を pybind11 で作成。
  - 一般的なユースケースに対するサンプルプログラムをPythonに移植
  - Python向け拡張
    - Field クラスを numpy array として扱えるようにする。
  - Version 1.6.0 (2021年3月) リリースに導入

PyBridge++ on Jupyter notebook

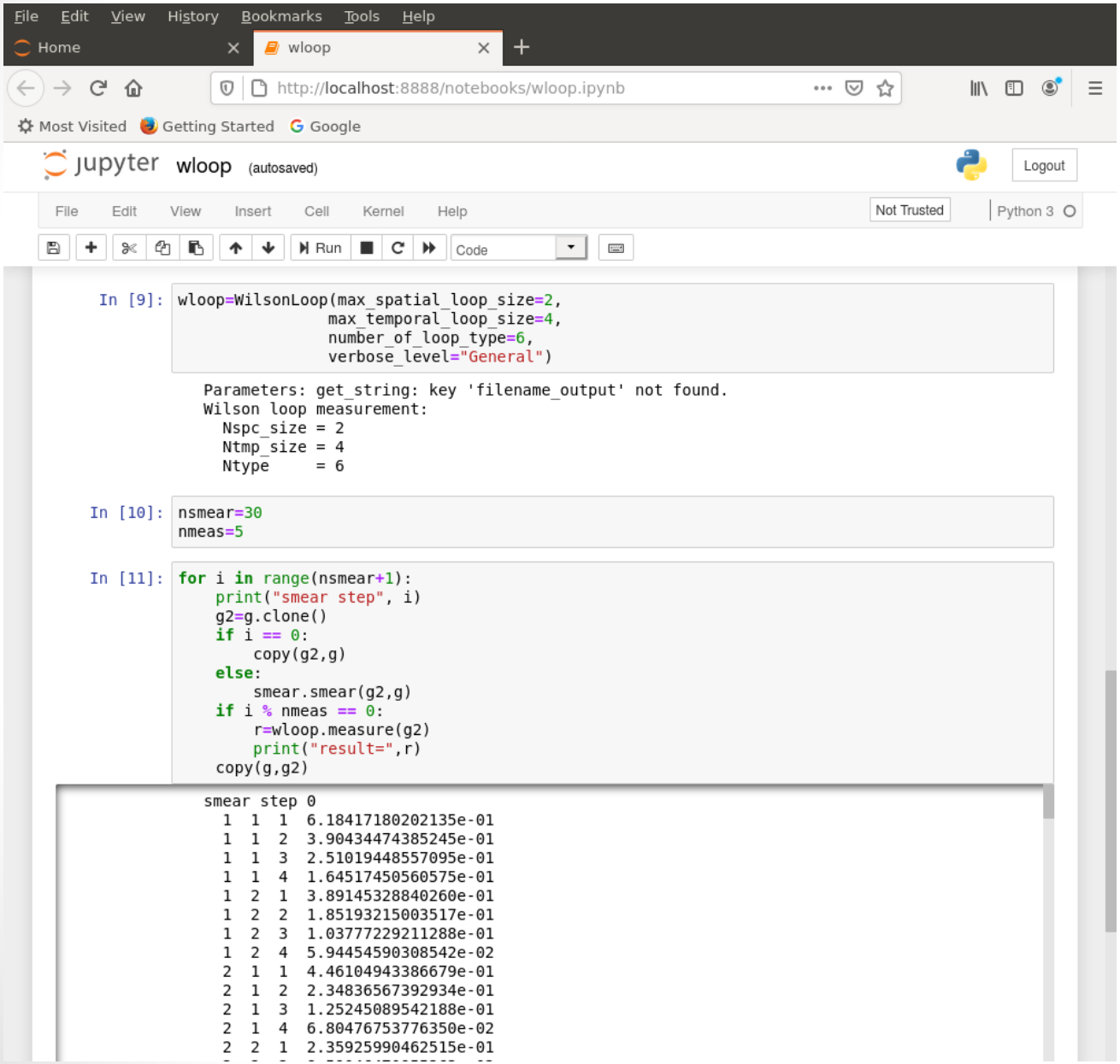


Wilson Loop と呼ばれる物理量の測定を Jupyter Notebook 上で実行する例

PyBridge++ on Jupyter notebook



PyBridge++ on Jupyter notebook



PyBridge++

- Pythonは遅い?
  - PyBridge++ は Bridge++ のクラスを wrap し、実際の計算は nativeな C++ コードが動く。

    実行例: Clover Dirac演算子の線形方程式を解く

    （格子サイズ 8^3x16）

native Bridge++	PyBridge++
78.85 sec	79.62 sec

  - Performance への影響はわずか。

Tips

- ObjectのLifetime
  - C++: Objectの new ～ delete はユーザが管理
  - Python: 参照カウントと garbage collection
  - 他のobjectを参照する場合に Lifetime に注意する必要がある

C++

```
Fopr *fop = new Fopr_Wilson;            //演算子 D
Solver *solver = new Solver_CG(fop);    // 線形方程式ソルバ
solver->solve(x, b);                    // x = D^-1 b
```

Python

```
fop = pyb.Fopr_Wilson()
solver = pyb.Solver_CG(fop)
solver.solve(x, b)                      # fopの存在を保証する必要
```

→Solver が fop の参照カウントをインクリメントする

Tips

- 並列化
  - OpenMP スレッド並列
    - C/C++ライブラリがスレッド並列化されていればそのまま multithread で実行される。
    - (Pythonと並行処理する方法は?)
  - MPIノード並列
    - C/C++ライブラリがMPI化されていれば、mpiexec python で MPI並列で動作する。
    - PythonのMPI環境 mpi4py と相互利用できる。MPIの初期化はどちらかで行う。

Summary

- Python から C/C++ のライブラリを呼び出す extension を template library の pybind11 を用いて作成。
- 格子QCDコードセット Bridge++ の Python binding である PyBridge++ を紹介。
- Jupyter notebook の利用など、Python のエコシステムを活用した数値シミュレーション環境の構築。