Programmation, apply, et calcul parallèle R Avancé B.Thieurmel - benoit.thieurmel@datastorm.fr

Agrocampus Ouest

Un peu d'histoire...

R est un logiciel de Statistique distribué gratuitement par le \mathbf{CRAN} créé dans les années 90 dans l'esprit de \mathbf{S} :

- disponible sous de nombreux systèmes d'exploitation
- dédié à l'analyse statistique et à la visualisation
- environ 80% du temps de l'analyse est dédié à la préparation des données...
 - et donc aussi à la manipulation des données
- plus qu'un environnement statistique (SPSS, SAS, ...), un langage de programmation puissant, complet, et autonome
- composé d'un socle et de bibliothèques de fonctions thématiques regroupées sous le nom de package
- connectables avec (tous...) les autres langages : C, Fortran, Java, Python, Javacript, C++, ...
- et (toutes...) les bases de données : MySQL, Postgresql, Oracle, MS sql, mongodb, Hadoop, ...
- R est un langage interprété
 - == il requiert un autre programme, l'interprète, pour l'éxécution de ses commandes
 - != des langages **compilés**, comme le C ou le C++, qui sont d'abord convertis en code machine par le compilateur avant de pouvoir être éxécutés
- il est basé sur la notion de vecteur
 - simplifie les calculs
 - réduit l'utilisation des boucles
- pas de typage ni de déclaration obligatoire des variables
- avec une forte population grandissante d'utilisateurs et de dévelopeurs
 - à la pointe un termes de méthodologies / technologies
- pour un temps de développement relativement court...

Bonne pratique de codage

Librement inspiré du Style Guide, by Hadley Wickham

- C'est important d'adopter des bonnes pratiques de codages :
 - $-\,$ permettre une lecture et une compréhension simple et rapide du code
 - tant pour le(s) développeur(s), que pour les utilisateurs, et favoriser le travail collaboratif
- Il n'y a pas un style parfait, le principal est d'en adopter un et de s'y tenir

```
# c'est mieux quand même...?
data <- data.frame(value = rnorm(1000), group = LETTERS[1:2])
mean.group <- lapply(
    split(data$value, data$group),
    function(x){
        mean(x)
    })
mean.group</pre>
```

Fichiers

Les noms doivent être **explicites** et se terminer par .R. Si les scripts sont ordonnées, les pré-fixés par un numéro.

```
# Good # Bad O-download.R modelisation.R toto.r 1-parse.R
```

Variables et fonctions

- Noms courts et explicites, de préférence en minuscule, en évitant d'utiliser des noms de fonctions connues...
- Utilisation d'un underscore (_) pour séparer les noms. Eviter le point (.), il peut amener de mauvaises intéractions avec d'autres langages (java, javascript, ...)
- Variable == noms, fonctions == verbes, autant que possible....
- Pas d'accents!

Espacer son code

- Mettre des espaces **autour** de tous les opérateurs (=, +, -, <-, etc.), **surtout** à l'intérieur de l'appel d'une fonction.
- Mettre un espace après une virgule, pas avant
- Essayer de mettre un espace avant l'ouverture d'une parenthèse, sauf dans l'appel d'une fonction

```
# Good
average <- mean(feet / 12 + inches, na.rm = TRUE)
# Bad
average<-mean(feet/12+inches,na.rm=TRUE)</pre>
```

• Exception pour :, :: and :::

```
# Good # Bad
x <- 1:10 x <- 1: 10
base::get base:: get
```

```
if (debug) do(x)
plot(x, y)
if (debug)do(x)
plot (x, y)
```

Accolades et indentation

- L'ouverture d'une accolade doit toujours être suivi d'un passage à la ligne.
- La fermeture d'un accolade doit être suivi d'un passage à la ligne, sauf dans le cas d'un else
- Le code à l'interieur des acceolades doit être indenté

```
# Good
if (y == 0) {
  log(x)
} else {
  y ^ x
}
# Bad
if (y == 0) {
  log(x)
}
else{ y ^ x}
}
```

- Indenter son code, de préférence en utilisant deux espaces. Raccourci RStudio: Ctrl+A, Ctrl+I
- Cas particulier dans la définition d'une fonction

Assignement

• Utiliser <-, et banir =, lors de l'assignement

```
# Good
x <- 5
# Bad
x = 5
```

Commentaires

- Commenter son code, toujours dans un soucis de lecture et de collaboration. Raccourci RStudio : Ctrl+Shift+C

```
# Load data ------
# Plot data ------
```

Structures condionnelles

if / else/ else if

```
if(condition1){
  print("la condition1 est vrai")
}else if(condition2){
  print("la condition1 est fausse, mais la condition2 est vrai")
}else{
  print("les conditions sont fausses... :-(")
}
```

• la condition doit retourner une (et une seule) valeur logique (TRUE/FALSE)

ifelse, une variante

```
ifelse(vecteur.condition, vecteur.vrai, vecteur.faux)
```

• Pour chaque élément i, regarde condition[i], et retourne vrai[i] ou faux[i]

```
x \leftarrow 1:2
ifelse(x\%\%2 == 0, 0, x) #> [1] 1 0
```

switch

• Suivant les cas, une autre façon de faire un if / else if

Opérateurs logiques

```
• ==, !=, >, <, >=, <=

x <- 1

x == 1  # TRUE

x != 1  # FALSE
```

```
x < 1  # FALSE

vx <- c(1, 2)
vx != 1 # FALSE TRUE</pre>
```

• any : retourne vrai si au-moins un élément répond à la condition

```
x <- c(1:10)
any(x == 10) # TRUE
any(x > 10) # FALSE
```

• all : retourne vrai si tous les éléments répondent à la condition

```
x <- c(1:10)

all(x <= 10) # TRUE

all(x > 10) # FALSE
```

• %in% : vérifie l'appartenance de chaque élément d'un vecteur à un autre ensemble

```
x <- "rennes"
x %in% c("rennes", "brest") # TRUE

x <- c("rennes", "paris")
x %in% c("rennes", "brest") # TRUE FALSE</pre>
```

• is.vector, is.data.frame, is.list, ...

```
x <- c(1:10)
is.vector(x) # TRUE</pre>
```

• ! : retourne la négation

```
x <- 1
y <- 10
(x == 1 & y == 10) # TRUE
!(x == 1 & y == 10) # FALSE
```

• & : opérateur logique 'AND'. Vrai si les deux conditions sont vraies, faux sinon

```
(x == 1 & y == 10) # TRUE

(x == 1 & y == 9) # FALSE
```

• | : opérateur logique 'OR'. Vrai si au-moins une des deux conditions est vrai, faux sinon

```
(x == 1 | y == 10) # TRUE

(x == 1 | y == 9) # TRUE

(x == 2 | y == 9) # FALSE
```

• xor : opérateur logique 'OR' exclusif. Vrai si une et une seule condition est vrai, faux sinon

```
xor(TRUE, FALSE) # TRUE
xor(TRUE, TRUE) # FALSE
```

Les boucles

- Rarement efficaces...
- Donc à utliser avec précautions dans ${\bf R}$
- Utiliser de préférence les propriétés offertes par la vectorisation, et la "Apply Family"

For

On parcourt un ensemble d'éléments

```
for(variable in elements){
    ...
}

for(lettre in LETTERS[1:2]){
    print(lettre)
}

## [1] "A"
## [1] "B"
```

While

- Tant que la condition est vrai, on continue
 - Si elle est fausse au départ, rien ne s'éxécute
 - Si elle est toujours vrai, ou si il n'y a pas de sortie **explicite**, elle continue à tourner...!

```
while(condition){
    ...
}

x <- 1
while(x < 4){
    print(x)
    x <- x+1
}

## [1] 1
## [1] 2
## [1] 3</pre>
```

Repeat

- Tant qu'on ne sort pas, on continue
 - L'éxécution a donc lieu au-moins une fois
 - Utilisation de **break** pour sortir

```
repeat{
    ...
    if(condition) break
}

x <- 1
repeat{
    x <- x+1
    if(x == 3){
        print("x vaut 3, on s'arrête.")
        break
    }
}

## [1] "x vaut 3, on s'arrête."</pre>
```

Break et next

- break : Sortie immédiate d'une boucle for, while ou repeat
- next : Itération suivante d'une boucle for, while ou repeat

```
for(i in 1:3){
  if(i%2 != 0) {
    next
  }
  print(i)
}
```

[1] 2

Un petit mot sur la vectorisation

'La vectorisation est le processus de conversion d'un programme informatique à partir d'une implémentation scalaire, qui traite une seule paire d'opérandes à la fois, à une implémentation vectorielle qui traite une opération sur plusieurs paires d'opérandes à la fois. Le terme vient de la convention de mettre les opérandes dans des vecteurs ou des matrices.' (Wikipédia)

- R est un langage interprété
- Beaucoup de calculs pouvant être réalisés par une boucle peuvent se faire en utilisant la vectorisation, avec une performance accrue :
 - opérations sur des vecteurs
 - opérations sur des matrices (= un ensemble de vecteurs)
 - opérations sur des data.frame
- Une performance accrue, pourquoi?
 - R, et ses fonctions "de base" sont codés en C, Fortran, ...
 - avec l'utilisation efficace et optimisée dans "routines" d'algèbre linéaire (BLAS, LAPACK, ...)

Cas exemple : la somme de deux vecteurs

```
x <- rnorm(100000)
y <- rnorm(100000)
res < - rep(0, 100000)
# calcul de la somme via une boucle
system.time(for(i in 1:100000){
  res[i] \leftarrow x[i] + y[i]
})
##
      user system elapsed
##
      0.14
              0.00
# avec la vectorisation
system.time(res2 <- x + y)</pre>
##
      user system elapsed
##
                  0
identical(res, res2)
## [1] TRUE
Y penser donc pour notamment:
   • opérations entre vecteurs / matrices
x \leftarrow matrix(ncol = 2, nrow = 2, 1)
y <- matrix(ncol = 2, nrow = 2, 2)
z \leftarrow x + y
       [,1] [,2]
## [1,]
        3
## [2,]
           3
  • Création / modification de colonne
data <- data.frame(x = 1:10, y = 100:109)
data$z <- data$x + data$y
head(data, n = 2)
## x y z
## 1 1 100 101
```

Les fonctions

2 2 101 103

On définit une nouvelle fonction avec la syntaxe suivante :

fun <- function(arguments) expression</pre>

- fun le nom de la fonction
- arguments la liste des arguments, séparés par des virgules. formals(fun)
- expression le corps de la fonction. une seul expression, ou plusieurs entre des accolades. body(fun)

```
test <- function(x) x^2
test  # function(x) x^2

formals(test) # $x
body(test) # x^2
environment(test) # <environment: R_GlobalEnv>
```

• Une fonction appartient à un environnement. Le plus souvent un package, ou alors l'environnement global **GlobalEnv**. environment(fun)

Les arguments

• Valeur par défaut

```
- via une affetaction, avec '=', dans la définition de la fonction
```

- optionnel lors de l'appel

```
test <- function(x, y = 2){
    x + y
}
test(x = 2)  # 4
test(x = 2, y = 10)  # 12</pre>
```

• Quelques fonctions utiles de contrôle :

```
- missing(arg): retourne TRUE si l'argument est manquant lors de l'appel
- match.arg(): en cas d'input tronqué...
- typeof(arg), class(arg), is.vector(), is.data.frame(), ....

match.arg("mea", c("mean", "sum", "median")) # "mean"
class(10) # "numeric"
```

• Dépendances entre arguments

On peut définir un argument en fonction d'autres arguments

```
test(1:10) #55
test(LETTERS[1:10]) #10
```

• Evaluation des arguments

Point Important: les arguments ne sont évalués que lorsqu'ils sont appelés, sinon ils n'existent pas dans la fonction.... Pour forcer l'évaluation, on peut utiliser la fonction force(). Démonstration:

```
f <- function(x) {
    10
}
f(stop("This is an error!"))

# la fonction retourne 10 alors que l'argument est un stop...
# 10

# utilisation de force
f <- function(x) {
    force(x)
    10
}
f(stop("This is an error!"))

# Error: This is an error!</pre>
```

Comprendre les '...'

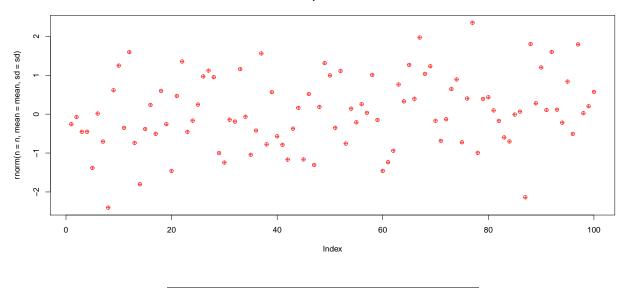
- Signifie que la fonction accepte d'autres arguments que ceux définis explicitement
- Sert généralement à passer ces arguments à une autre fonction
- Se récupère facilement avec : list(...)

```
viewdot <- function(arg, ...){
    list(...)
}
viewdot(arg = 1, x = 2, name = "name")

#$x
#[1] 2
#
#$name
#[1] "name"

rnormPlot <- function(n, mean = 0, sd = 1, ...){
    plot(rnorm(n = n, mean = mean, sd = sd), ...)
}
rnormPlot(n = 100, main = "Comprendre les ...", col = "red", pch = 10)</pre>
```

Comprendre les ...



Retourner un résultat

Une fonction retourne par défaut le résultat de la dernière expression

```
test <- function(x, y = 2){
    x + y
}
test(2)</pre>
```

```
## [1] 4
somme <- test(x = 2, y = 2)
somme</pre>
```

[1] 4

- Renvoi d'un résultat avant la fin de la fonction : fonction return()
- Utilisation de return() pour la dernière expression ? Inutile.
- Retour de plusieurs résultats : liste nommée.
- Aucun résultat ? Possible avec par example la fonction invisible()
- Utilisation de la fonction return()

```
test <- function(x, y = 2){
  if(y == 0){
    return(x)
  }
  x + y
}
test(2)</pre>
```

[1] 4

• Plusieurs résultats

```
test <- function(x, y = 2){
   list(x = x, y = y)
}
test(2)

## $x
## [1] 2
##
## $y
## [1] 2</pre>
```

• La fonction invisible()

"This function can be useful when it is desired to have functions return values which can be assigned, but which do not print when they are not assigned"

```
test <- function(x, y = 2){
    x + y
    invisible()
}
test(2) # no print on console
res <- test(2)
res # and NULL result

## NULL

test <- function(x, y = 2){
    invisible(x + y)
}
test(2) # no print on console
res <- test(2)
res # but a result !

## [1] 4</pre>
```

Variables locales et globales

- Une variable définie dans une fonction est locale :
 - elle ne sera pas présente ensuite dans l'espace de travail
 - elle n'écrasera pas une variable du même nom existante

```
x <- 100
test <- function(x, y){
    x <- x + y
    x
}
# la fonction retourne bien 10
test(5, 5)
## [1] 10
# et x vaut bien toujours 100
x</pre>
```

```
## [1] 100
```

- Via l'opérateur d'affectation <<-, on peut affecter au modifier une variable globale
- Autant que possible non-recommandé...!

```
x <- 100
test <- function(x, y){
    x <<- x + y
    y <<- y
    x
}

# la fonction retourne ... 5 ?
test(5, 5)

## [1] 5
# et x vaut maintenant 10, et y 5
x ; y

## [1] 10
## [1] 5</pre>
```

• Et si la fonction utilise une variable non-définie ?

```
test <- function(x){
    x + z
}

# Erreur, z n'existe pas
test(5)

#> Error in test(5) : object 'z' not found

# Si, à tout hasard, une variable 'z' existe dans un autre environnement
# au moment de l'appel, la fonction l'utilise...
z <- 5
test(5)

#> 10
```

- R va chercher une variable d'une même nom dans les environnements parents.
- Pratique également à éviter. Il faut mieux passer tous les arguments en paramètres

Fonctions anonymes

Comme son nom l'indique, une fonction qui n'a pas de nom...

- fonction courte, utilisée dans une autre fonction
- qui n'a pas pour but d'être ré-utilisée par la suite

```
f <- function(x){
  x + 1</pre>
```

```
res1 <- sapply(1:10, f)

res2 <- sapply(1:10, function(x) x + 1)

res1

## [1] 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11

res2

## [1] 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11
</pre>
```

Communication

Quand on développe, il est important d'anticiper les problèmes potentiels du code :

- mauvais type d'argument
- fichier non-existant
- données manquantes, valeurs infinies, ...

Et communiquer avec l'utilisateur. Trois niveaux sont disponibles :

- fonction stop(): erreur "fatale", l'éxécution se termine. A utiliser quand la suite du code ne peut pas être éxécutée
- fonction warning(): problème "potentielle", l'éxécution continue, mais il y aura peut-être un soucis...
- fonction message(): message "informatif", l'éxécution continue.

```
test <- function(x){</pre>
  # pour une erreur plus compréhensible
  if(missing(x)){
    stop("x is missing. Please enter a valid argument")
  }
  if(!class(x) %in% c("numeric", "integer")){
    x <- as.numeric(as.character(x))</pre>
    warning("x is coerced to numeric")
  }
  message("compute x*2")
  x*2
try(test())
#> Error: x is missing. Please enter a valid argument
test("5")
## Warning in test("5"): x is coerced to numeric
## compute x*2
## [1] 10
```

Gestion des erreurs et des messages

Quand \mathbf{R} rencontre une erreur, il s'arrête net. Dans certains cas, on voudrait pouvoir continuer notre calcul. Trois fonctions sont diponibles dans \mathbf{R} :

- try(): la plus simple, pour continuer l'éxécution malgré une erreur
- tryCatch(): permet de décider de ce qui se passe quand le code rencontre une erreur, un warning, ou un message
- with Calling Handlers(): une variante de tryCatch()

```
test <- sapply(list(1:5,"a", 6:10), log)
#>Error in FUN(X[[2L]], ...) :
# non-numeric argument to mathematical function
```

```
test <- sapply(list(1:5, "a", 6:10), function(x) try(log(x), silent = TRUE))</pre>
test
## [[1]]
## [1] 0.0000000 0.6931472 1.0986123 1.3862944 1.6094379
## [[2]]
## [1] "Error in log(x) : argument non numérique pour une fonction mathématique\n"
## attr(,"class")
## [1] "try-error"
## attr(,"condition")
## <simpleError in log(x): argument non numérique pour une fonction mathématique>
##
## [[3]]
## [1] 1.791759 1.945910 2.079442 2.197225 2.302585
# on récupére un object de class "try-error", avec le message d'erreur
class(test[[2]])
## [1] "try-error"
test[[2]][1]
## [1] "Error in log(x) : argument non numérique pour une fonction mathématique\n"
```

Et la documentation dans tout ça?

La documentation est très importante :

- pour que l'utilisateur sache comment utiliser la fonction
- pour vous et d'autres développeurs, lors d'améliorations

Adopter la convention doxygen

- simple d'utilisation
- utiliser dans de nombreux langages de programmation
- via le package roxygen2, vous simplifiera ensuite la vie si vous créer des packages!

Utilisation dans R

• en commençant la ligne par #'

Les balises indispensables

- @param : pour les arguments
- @return : pour le résultat
- @examples : pour les exemples

```
#' le titre de ma fonction
#'
#' Une description succinte de ma fonction
#' sur plusieurs lignes si on veut
#'
#' @param nom : Character. Nom de la personne
#' @param prenom : Character. Prénom de la personne
#'
#' @return : Character. Identification de la personne
#'
#' @examples
#' # les examples sont éxécutables dans RStudio avec Ctrl+Entrée
#' identifier("Thieurmel", "Benoit")
identifier <- function(nom, prenom){
    paste0("Nom :", nom, ", prénom : ", prenom)
}</pre>
```

Un petit mot sur le déboggage

- Pour voir les informations : utilisation de print() dans la fonction
- Quand une erreur se produit, utilisation du traceback
 - Disponible par défaut dans la console RStudio
 - via la fonction traceback() dans R

La "Apply family"

 ${\bf R}$ donc pas au top pour interpréter et éxécuter efficacement des boucles for

"Et donc?"

• Une solution radicale : NE PAS LES UTILISER!

"Et alors, comment je fais?"

- Penser à la vectorisation
- Utiliser la "Apply family"
 - apply: appliquer une fonction sur un data.frame, une matrice, ou un tableau multi-dimentionnel
 - lapply: appliquer une fonction sur une liste, ou un vecteur, et retourne une liste
 - sapply : identique à lapply, mais essaye de structurer un peu mieux les résultats si cela est possible
 - vapply: identique à sapply, en permettant de définir (un peu) le format des résultats

- mapply : prend en entrée plusieurs vecteurs/listes, et applique la fonction sur les premiers éléments de chaque entrées, puis sur les seconds,
- rapply : éxécution récursive de apply, avec contrôle préalable des éléments

Apply

```
apply(X, MARGIN, FUN, ...)
```

- ullet X : une matrice ou un tableau
- MARGIN: un vecteur d'entiers contenant la ou les dimensions sur lesquelles on souhaite appliquer la fonction (1 : lignes, 2 : colonnes)
- FUN: la fonction à appliquer
- ... : ensemble d'arguments supplémentaires, à passer à la fonction

```
x <- cbind(x1 = 3, x2 = c(NA, 4:1, 2:6))
apply(x, 2, mean)  # moyenne par colonnes

## x1 x2
## 3 NA
apply(x, 2, mean, na.rm = TRUE)  # en passant un argument

## x1 x2
## 3.000000 3.3333333</pre>
```

lapply, sapply, vapply

```
lapply(X, FUN, ...)
sapply(X, FUN, ..., simplify = TRUE, USE.NAMES = TRUE)
vapply(X, FUN, FUN.VALUE, ..., USE.NAMES = TRUE)
```

- X : un vecteur ou une liste
- FUN: la fonction à appliquer à tous les éléments de X
- ... : ensemble d'arguments supplémentaires, à passer à la fonction
- simplify : booléan ou caractère, pour simplifier les résultats
- USE.NAMES : booléan. Si X est nommé, les utiliser dans les résultats ?
- FUN.VALUE : un "template" pour les résultats

Essayons de comprendre ces petites différences...

1. Calcul de la moyenne, soit une valeur par élément

• les données de départ :

```
x <- list(a = 1:3, b = rnorm(5))

## $a

## [1] 1 2 3

##
```

```
## $b
• lapply retourne donc une liste
lapply(x, FUN = mean)
## $a
## [1] 2
##
## $b
## [1] -0.3124212
  • sapply simplifie les résultats dans un vecteur
sapply(x, FUN = mean)
##
## 2.0000000 -0.3124212
  • vapply attend une précision sur le résulat
# on s'attend à récupérer une valeur numérique
vapply(x, FUN = mean, FUN.VALUE = 0)
##
## 2.0000000 -0.3124212
# et si on s'attend à récupérer une valeur logique ?
vapply(x, FUN = mean, FUN.VALUE = TRUE)
# Error in vapply(x, FUN = mean, FUN.VALUE = TRUE):
  values must be type 'logical',
# but FUN(X[[1]]) result is type 'double'
2. Calcul des quantiles, soit 5 valeurs par éléments
  • lapply retourne donc une liste
lapply(x, FUN = quantile)
## $a
    0% 25% 50% 75% 100%
##
  1.0 1.5 2.0 2.5 3.0
##
## $b
##
           0%
                                  50%
                                             75%
                                                        100%
                      25%
## -1.14740696 -0.99914537 0.02443907 0.20090881 0.35909838
  • sapply simplifie les résultats dans une matrix
sapply(x, FUN = quantile)
         a
```

```
18
```

1.0 -1.14740696

25% 1.5 -0.99914537 ## 50% 2.0 0.02443907 ## 75% 2.5 0.20090881

0%

```
## 100% 3.0 0.35909838
  • Formattage avec vapply
vapply(x, FUN = quantile, FUN.VALUE = c(Min. = 0, "1st Qu." = 0,
 Median = 0, "3rd Qu." = 0, Max. = 0))
##
             а
## Min.
           1.0 -1.14740696
## 1st Qu. 1.5 -0.99914537
## Median 2.0 0.02443907
## 3rd Qu. 2.5 0.20090881
## Max.
           3.0 0.35909838
3. Et si on retourne un nombre variable d'éléments ?
la <- lapply(x, FUN = function(elm) elm)</pre>
sa <- sapply(x, FUN = function(elm) elm)</pre>
# vapply pas pertinent
identical(la, sa)
```

[1] TRUE

mapply

```
mapply(FUN, ..., MoreArgs = NULL, SIMPLIFY = TRUE,
    USE.NAMES = TRUE)
```

- FUN: la fonction à appliquer
- ... : ensemble d'arguments, vecteurs ou listes
- MoreArgs : liste d'arguments supplémentaires pour la fonction
- SIMPLIFY : booléan ou charactère, pour simplifier les résultats

```
• USE.NAMES: booléan. Si noms il y a dans X, les utiliser dans les résultats?

mapply(rep, 1:2, 2:1)

## [[1]]

## [[2]]

## en nommant les arguments

mapply(rep, times = 1:2, x = 2:1)

## [[1]]

## [[1]]

## [[1]]

## [1] 1
```

```
# en passant des arguments supplémentaires
mapply(rep, times = 1:2, MoreArgs = list(x = 100))

## [[1]]
## [1] 100
##
## [[2]]
## [1] 100 100

# Avec simplification des résultats
mapply(function(n, moy) mean(rnorm(n, moy)), n = c(100, 1000), moy = c(10, 0))

## [1] 9.96767039 0.01118749
```

Le calcul parallèle

Concept

• Calcul séquentiel

- un problème est divisé en une série d'instructions
- les instructions sont éxécutées les une après les autres
- sur un unique processeur
- Seulement une instruction s'éxécute à la fois

• Calcul parallèle

- un problème est divisé en plusieurs séries d'instructions qui peuvent être éxécutées en même temps
- les instructions de chaque série s'éxécute simultanément sur différents processeurs
- cela nécessite un méchanisme de contrôle et de synchronisation

'l'ensemble des techniques logicielles et matérielles permettant l'exécution simultanée de séquences d'instructions indépendantes sur des processeurs et/ou coeurs différents'

Le problème algorithmique est donc :

- pouvoir diviser tout ou une partie en sous-calculs indépendants
- pouvoir éxécuter plusieurs instructions à un moment donné
- résoudre le problème en moins de temps qu'avec un calcul séquentiel

Les ressources matérielles à disposition :

- un unique ordinateur, avec plusieurs processeurs / coeurs
- un cluster d'ordinateurs inter-connectés

Quand paralléliser?

- quand chaque calcul commence à prendre un peu de temps...
- calculer plusieurs tâches rapides en parallèle prend en général plus de temps qu'avec un calcul séquentiel. . .
- faire attention au partage des données, et regarder l'évolution de la performance en fonction du nombre de coeurs

• le mieux : tester et comparer !

les outils dans R

- ullet A la base, ${f R}$ est mono-coeur
- De nombreux packages permettant le calcul parallèle existent

Nous nous focaliserons sur deux packages :

- le package **parallel**
 - inclu dans R depuis R.2.14.0
 - basé sur deux "anciens" packages : snow et multicore
 - propose une interface très proche de la 'Apply family'
- le package foreach

```
require(parallel)
vignette("parallel")
require(foreach)
vignette("foreach")
```

le package parallel

Le processus général :

- ouverture d'un "cluster"
 - makeCluster()
 - ouverture de sessions ${f R}$ temporaires
 - fonction utile : detectCores(), nombre de CPU coeurs sur la machine
- utilisation du "cluster"
 - clusterCall, clusterApply, clusterExport, clusterEvalQ, ...
 - $\ \mathbf{parLapply}, \ \mathbf{parSapply}, \ \mathbf{parApply}, \ \dots$
- fermeture du "cluster"
 - sinon les sessions R temporaires restent ouvertes...
 - stopCluster()

exemple d'introduction

```
require(parallel)
nb.cores <- detectCores() # 8
nb.cores

## [1] 4

# mieux vaut éviter d'utiliser toutes les ressources
cl <- makeCluster(nb.cores - 1)
res <- clusterApply(cl, 1:7, function(x){ rnorm(x)})
str(res)</pre>
```

```
## List of 7
## $ : num 0.597
## $ : num [1:2] 0.0689 2.4663
## $ : num [1:3] 1.4831 0.6143 0.0989
## $ : num [1:4] 0.0104 -0.6324 -0.1609 0.7505
## $ : num [1:5] 1.5067 -0.2966 2.074 0.0164 0.0945
## $ : num [1:6] 0.848 1.485 -0.223 0.669 0.195 ...
## $ : num [1:7] -0.483 -0.575 -0.237 0.731 -0.339 ...
stopCluster(cl)
```

Points importants

chargements des données / packages

- $\bullet \ \ \text{les sessions } \mathbf{R} \ \text{temporaires sont "vides" (sauf en Linux/Mac, avec l'option } \ \textit{makeCluster}(, \ \textit{type} = \textit{``FORK")})$
 - aucunes variables / aucuns packages de la session principale sont présents
- clusterExport : exporte les variables / fonctions souhaitées
- clusterEvalQ : éxécute un code dans toutes les sessions. Utile pour charger un package notamment

load-balancing

- Généralement, les p premiers calculs sont envoyés aux p sessions ouvertes
- les calculs suivants débutent lorque ${f tous}$ les p calculs ont été effectués
- Dans le cas de calculs de temps différents, on perd de la performance
- des versions LB, load-balancing, existent pour enchaîner sur un nouveau calcul dès que le précédent se termine

Chargement des données : illustration

```
cl<-makeCluster(2)
add <- 10
mult <- function(x) x * 2

parLapply(cl, 1:10, function(x) mult(x) + add)

# les noeuds ne connaissent pas la variable et la fonction
# Error in checkForRemoteErrors(val) :
# 2 nodes produced errors; first error: objet 'mult' introuvable

# on les exporte avant de lancer le calcul

clusterExport(cl, varlist = c("add", "mult"))

res <- parLapply(cl, 1:10, function(x) mult(x) + add)

res[[1]] # 12</pre>
```

```
stopCluster(cl)
```

Chargement d'un package : illustration

```
cl<-makeCluster(2)</pre>
data(iris)
parLapply(cl, split(iris[, -c(5)], iris$Species), function(subdata){
 rpart(Sepal.Length~., subdata)
})
# les noeuds ne connaissent pas la variable et la fonction
# Error in checkForRemoteErrors(val) :
# 2 nodes produced errors; first error: impossible de trouver la fonction "rpart"
# on charge le package
clusterEvalQ(cl, {
  require(rpart)
})
res <- parLapply(cl, split(iris[, -c(5)], iris$Species), function(subdata){</pre>
  rpart(Sepal.Length~., subdata)
})
stopCluster(cl)
```

le package et la fonction foreach

- ressemble à une boucle for
- mais avec l'utilisation de l'opérateur $\%\mathbf{do}\%$ ou $\%\mathbf{dopar}\%$ pour du parallèle
- et retourne un résultat, une liste par défaut

```
require(foreach)

x <- foreach(i = 1:3) %do% sqrt(i)
# equivalent à lapply(1:3, sqrt)
x

## [[1]]
## [1] 1
##
## [[2]]
## [1] 1.414214
##
## [[3]]
## [1] 1.732051</pre>
```

structure du résultat : .combine

```
# un vecteur
x <- foreach(i = 1:3, .combine = "c") %do% sqrt(i)
x

## [1] 1.000000 1.414214 1.732051
# une matrice
x <- foreach(i=1:4, .combine = 'cbind') %do% rnorm(2)
x

## result.1 result.2 result.3 result.4
## [1,] -0.07084177 0.4419003 -0.09463863 -1.2470596
## [2,] 1.41495557 -0.7501550 0.34497246 0.7372635
# une somme
x <- foreach(i = 1:3, .combine = "+") %do% i
x

## [1] 6</pre>
```

ajouter un filtre avant l'éxécution

• Similaire à if, mais avec l'utilisation de when

```
## Warning: package 'numbers' was built under R version 3.3.3
require(numbers)
foreach(n = 1:50, .combine = c) %:% when (isPrime(n)) %do% n
## [1] 2 3 5 7 11 13 17 19 23 29 31 37 41 43 47
```

gérer les erreurs : .errorhandling

- par défaut, si une erreur se produit, l'éxécution s'arrête
- on peut continuer le calcul et récupérer les erreurs potentielles en mettant l'option .errorhandling à pass

```
foreach(n = 1:2, .errorhandling = "pass") %do% ifelse(n == 2, stop("erreur"), n)

## [[1]]
## [1] 1
##
## [[2]]
## <simpleError in ifelse(n == 2, stop("erreur"), n): erreur>
```

Calcul parallèle

- même principe qu'avec parallel, sauf qu'il faut explicitement enregister le cluster
- avec doParallel, ou doMC, doMPI,doRedis, doRNG, doSNOW

```
require(foreach)
require(doParallel)

cl <- makeCluster(6)
# avec foreach, il faut enregistrer le cluster
registerDoParallel(cl)

res <- foreach(n = 1:6) %dopar% rnorm(x)
str(res)

## List of 6
## $ : num [1:6] 0.266 0.398 -0.933 -0.705 -1.167 ...
## $ : num [1:6] -1.473 0.84 0.793 -0.791 0.665 ...
## $ : num [1:6] 0.908 -0.169 1.65 -0.118 0.231 ...
## $ : num [1:6] 0.4969 1.3788 0.3578 0.521 -0.0179 ...
## $ : num [1:6] 0.696 0.187 -0.355 -1.428 -0.499 ...
## $ : num [1:6] -1.7255 -0.3527 1.5414 0.5954 -0.0349 ...

stopCluster(cl)</pre>
```

Points importants

chargements des données / packages

- contrairement à l'utilisation du package **parallel**, toutes les variables de l'environnement courant sont exportées par défaut
- .noexport : ne pas exporter certaines variables
- .export : exporter des variables qui ne sont pas dans l'environnement courant
- .packages : chargement de package(s)

autres options utiles

- .inorder : résultats dans l'ordre d'entrée ? Défaut à TRUE. FALSE peux amener de meilleures performances
- .verbose : utile pour débogguer

Exemples

Retour sur la notion d'environnement

```
y <- 10
f <- function(x, .export = NULL){
  cl<-makeCluster(2)
  registerDoParallel(cl)
  res <- foreach(i = x, .export = .export) %dopar% (i + y)
  stopCluster(cl)
  res
}

res <- f(2:10)
# Error in (x + y) : task 1 failed - "objet 'y' introuvable"

res <- f(2:10, .export = "y")
res[[1]] # 12</pre>
```

- The R Manuals: https://cran.r-project.org/manuals.html
- $\bullet \ \ R \ Contributed \ Documentation: https://cran.r-project.org/other-docs.html\\$
- Advanced R by Hadley Wickham : http://adv-r.had.co.nz/
- R packages by Hadley Wickham : http://r-pkgs.had.co.nz/
- How-to go parallel in R basics + tips : http://gforge.se/2015/02/how-to-go-parallel-in-r-basics-tips/
- State of the Art in Parallel Computing with R: http://www.jstatsoft.org/v31/i01/paper
- R tutorial on the Apply family of functions: http://www.r-bloggers.com/r-tutorial-on-the-apply-family-of-functions/
- A Tutorial on Loops in R Usage and Alternatives: http://blog.datacamp.com/tutorial-on-loops-in-r/