10. R中的并行计算II

罗翔宇
中国人民大学统计与大数据研究院

此课件内容基于Norman Matloff编著的《数据科学中的并行计算》（CRC Press，汪磊、寇强译）

上周复习

- 用于R中并行的snow包
- library(parallel)
- makeCluster(4) 用于产生snow集群
- clusterExport(cls, “x”) 将数据或者函数发送给worker
- clusterApply(cls, ichunks, doichunk) 采用轮询的方式指导worker对分配的块任务进行计算
- clusterApplyLB()将块任务进行动态调度，尽可能实现负载均匀
- stopCluster(cl2)计算任务完成后，停止对应snow集群

例子：所有可能回归，改进版本

- 如果我们熟悉线性回归的话，我们知道估计量 $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$，其中X的第一列均为1，表示回归中的截距项
- 由于我们对不同的预测变量集合均用了lm()函数，其中就需要重复利用矩阵相乘，这些计算量其实可以通过提前计算好$(X'X)^{-1}$和$X'Y$再取子矩阵避免
- 比如$\tilde{X}$由X的第(1,3,4)列构成，那么$\tilde{X}'\tilde{X}$就是$X'X$ 的第(1,3,4)列和第(1,3,4)行构成，因此不用重新计算，只需提取子矩阵即可

例子：所有可能回归，改进版本

- 改进代码

```
#########################################################################
###improved version

#here the first column of x corresponds to the intercept term
#find the adjusted R square
linregadjr2 <- function(x, y, xpx, xpy){
  bhat <- solve(xpx, xpy)
  resids <- y - x %*% bhat
  r2 <- 1 - sum(resids^2) / sum((y-mean(y))^2)
  n <- nrow(x)
  p <- ncol(x) - 1
  1 - (1-r2)*(n-1)/(n-p-1) #adjusted R2
}


#improved version of do1pset
do1pset_v2 <- function(onepset, x, y, xpx, xpy){
  ps <- c(1, onepset + 1)
  x1 <- x[ ,ps]
  xpx1 <- xpx[ps, ps]
  xpy1 <- xpy[ps]
  ar2 <- linregadjr2(x1, y, xpx1, xpy1)
  n0s <- ncol(x) - length(ps)
  c(ar2, onepset, rep(0, n0s))
}
```

例子：所有可能回归，改进版本

- 改进代码

```
dochunk_v2 <- function(psetsstart, x, y, xpx, xpy, allcombs, chunksize){
  ncombs <- length(allcombs)
  lasttask <- min(psetsstart+chunksize-1, ncombs)
  t(sapply(allcombs[psetsstart:lasttask], do1pset_v2, x, y, xpx, xpy))
}
```

例子：所有可能回归，改进版本

- 改进代码

```
snowapr_v2 <- function(cls, x, y, k, reverse=F, dyn=F, chunksize=1){
  # cls: snow cluster
  # x: predictor matrix, one column corresponds to a predictor
  # y: response vector
  # k: maximum size of predictor variable sets
  # reverse: TRUE if we reverse the iteration order
  # dyn: TRUE if we use dynamic assignment
  # chunksize: size of a chunk

  require(parallel)
  p <- ncol(x)
  x <- cbind(1, x)
  xpx <- crossprod(x, x) #equivalent to and slightly faster than t(x) %*% x
  xpy <- crossprod(x, y)

  allcombs <- genallcombs(p, k)
  ncombs <- length(allcombs)

  clusterExport(cls, "do1pset_v2")
  clusterExport(cls, "linregadjr2")

  #set the starting indices
  tasks <- if(!reverse) seq(1, ncombs, chunksize)
           else seq(ncombs, 1, -chunksize)

  if(!dyn){
    out <- clusterApply(cls, tasks, dochunk_v2, x, y, xpx, xpy,
                        allcombs, chunksize)
  }else{
    out <- clusterApplyLB(cls, tasks, dochunk_v2, x, y, xpx, xpy,
                          allcombs, chunksize)
  }
  Reduce(rbind, out)
}
```

例子：所有可能回归，改进版本

- 改进代码

```
snowtest_v2 <- function(cls, n, p, k, chunksize=1, dyn=F, rvrs=F){
  gendata(n, p)
  snowapr_v2(cls, x, y, k, rvrs, dyn, chunksize)
}
```

- 运行结果

```
> c2 <- makecluster(2)
> system.time(snowtest(c2, 10000, 20, 3, dyn = TRUE, rvrs = FALSE))
 用户   系统   流逝
 5.81 29.53 35.74
```

```
> system.time(snowtest_v2(c2, 10000, 20, 3, dyn = TRUE, rvrs = FALSE))
 用户   系统   流逝
 5.78 29.39 35.31
```

例子：所有可能回归，改进版本

- 运行结果，尝试不同的chunksize

```
> system.time(snowtest(c2, 10000, 20, 3, dyn = TRUE, rvrs = FALSE, chunksize = 20))
用户 系统 流逝
0.25 1.44 8.58
> system.time(snowtest_v2(c2, 10000, 20, 3, dyn = TRUE, rvrs = FALSE, chunksize = 20))
用户 系统 流逝
0.25 1.66 1.95
> system.time(snowtest(c2, 10000, 20, 3, dyn = TRUE, rvrs = FALSE, chunksize = 50))
用户 系统 流逝
0.27 0.62 7.85
> system.time(snowtest_v2(c2, 10000, 20, 3, dyn = TRUE, rvrs = FALSE, chunksize = 50))
用户 系统 流逝
0.14 0.67 0.91
```

例子：所有可能回归，改进版本

- 运行结果，尝试不同的chunksize

```
> system.time(snowtest(c2, 10000, 20, 3, dyn = TRUE, rvrs = FALSE, chunksize = 20))
用户 系统 流逝
0.25 1.44 8.58
> system.time(snowtest_v2(c2, 10000, 20, 3, dyn = TRUE, rvrs = FALSE, chunksize = 20))
用户 系统 流逝
0.25 1.66 1.95
> system.time(snowtest(c2, 10000, 20, 3, dyn = TRUE, rvrs = FALSE, chunksize = 50))
用户 系统 流逝
0.27 0.62 7.85
> system.time(snowtest_v2(c2, 10000, 20, 3, dyn = TRUE, rvrs = FALSE, chunksize = 50))
用户 系统 流逝
0.14 0.67 0.91
```

- 关于分块大小：如果分块太小，就需要处理更多的块，因而会产生更多的开销；如果块太大，运行快要结束时会遇到负载均衡问题
  - 可以通过在一两个问题上做实验，决定一个较好的块大小
  - 使用随时间变化的块大小

multicore包

- parallel包是由R的两个包，snow和multicore构成的
- multicore包必须在一个多核机器上运行，且被限制在Unix家族的操作系统，比如Linux和Mac OS X，在这样的平台上multicore包比snow包性能更好
- 性能提升的源头：multicore包中的并行函数mcapply()会利用Unix族的系统中叫做fork()的系统调用
- fork()可以将一个进程分叉为多个子进程，而且这些子进程含有原进程中所有变量一模一样的拷贝。因此在所有可能回归的例子中，分出的子进程自带xpx,xpy，而不用传输所需的时间，其性能会高于snow()
- mcapply()中的参数mc.cores来选择内核个数

例子：并行计算距离

- 假设有两个数据集，分别有m和n个观测，我们需要计算mn个组合之间的距离
- 在很多机器学习的实例中都需要进行这样的计算。比如，我们想用身高、年龄来预测体重
- 有一个训练集含有信息(身高、年龄、体重)，一个预测集(身高、年龄)
- 对于预测集中的一个人，我可以在训练集中找到身高、年龄和他“相近”的个体，通过计算训练集中这些个体的平均年龄，来作为预测值
- 如何定义“相近”，就需要计算两个集合间样本的距离了

例子：并行计算距离

- 代码

```
#install.packages("pdist")
library(pdist)
library(parallel)

#divide 1:m into chunks with approximate size "chunksize"
npart <- function(m, chunksize){
  splitIndices(m, ceiling(m/chunksize))
}

#calculate samples in "ichunk"
dochunk <- function(ichunk, x, y){
  as.matrix(pdist(x[ichunk, ], y))
}
```

- 需要安装pdist包，用于利用C语言高效计算两个集合样本间的距离。as.matrix将其转化为矩阵
- splitIndices将数组1:m尽量均匀地分为若干块，每块的大小约为chunksize

例子：并行计算距离

- 代码（展现了pdist和splitIndices的功能）

```
> a <- matrix(rnorm(20), 5, 4)
> b <- matrix(rnorm(16), 4, 4)
> pdist(a, b)@dist
 [1] 3.373154 2.776329 3.552311 1.248351 1.871680 3.524712 1.235919 2.812059 2.039737 3.988303 1.720160
[12] 2.779948 2.751270 2.614185 3.917880 3.615190 3.325737 2.384787 3.421149 2.181060
attr(,"Csingle")
[1] TRUE
> splitIndices(10, 3)
[[1]]
[1] 1 2 3

[[2]]
[1] 4 5 6 7

[[3]]
[1]  8  9 10
```

例子：并行计算距离

- 代码

```
#calculate samples in "ichunk"
dochunk <- function(ichunk, x, y){
  as.matrix(pdist(x[ichunk, ], y)@dist)
}

snowpdist <- function(cls, x, y, dyn = F, chunksize = 1){
  nx <- nrow(x)
  ny <- nrow(y)

  ichunks <- npart(nx, chunksize)
  clusterExport(cls, "pdist")
  if(!dyn){
    dists <- clusterApply(cls, ichunks, dochunk, x, y)
  }else{
    dists <- clusterApplyLB(cls, ichunks, dochunk, x, y)
  }

  tmp <- Reduce(rbind, dists)

  tmp
}

genxy <- function(m, n, p){
  x <<- matrix(runif(m*p), ncol = p)
  y <<- matrix(runif(n*p), ncol = p)
}
```

例子：并行计算距离

- 结果

```
> system.time(pdist(x,y))
   用户    系统    流逝
12.77   1.00 13.78
>
> c2 <- makeCluster(2)
> system.time(snowpdist(c2, x, y, dyn = TRUE, chunksize = 500))
   用户    系统    流逝
121.50   22.57 151.78
> stopcluster(c2)
```

- 可能的原因，pdist通过底层C代码实现，已经非常的高效；若利用并行计算，有通信上的开销（传输一个较大的矩阵），反而时间变慢了。若能增加核的个数（比如8个），并增加数据的维度，则速度会有较大的提升

foreach包

- R中另一个流行的并行化工具是foreach包，其通过CRAN下载，主要用于提高for循环的速度
- 并行化方式简单，比如将for更换为foreach，并添加一个运算符 %dopar%
- 用户还需要指明要运行的平台，即foreach包中的用于后端，它可以是snow包、multicore包、doParallel包等

```
> #install.packages("doParallel")
> library(doParallel)
> registerDoParallel()
> getDoParWorkers()
[1] 3
> registerDoSEQ()
> getDoParWorkers()
[1] 1
```

- getDoParWorkers()在默认情况下在Windows上创建3个workers，在Linux, Mac系统上创建一半核数的workers

foreach包

- 使用foreach要小心，并不能够认为用了foreach一定具有速度上的提升
- R中的for其实经过了优化，大多情况下，它的速度可能远远快于foreach

```
> system.time(for(i in 1:n){s = s+i})
用户  系统  流逝
   0     0     0
> n <- 10^5
> s <- 0
> system.time(for(i in 1:n){s = s+i})
用户  系统  流逝
   0     0     0
> s <- 0
> registerDoParallel(cores = 2)
> system.time(foreach(i = 1:n) %dopar% {s = s+i})
 用户   系统   流逝
26.26  7.47 34.89
```

- 想说明的是，我们应该对foreach()格外注意，避免认为只要使用了这个包，就可以轻易地平行；或者只要让代码并行化就可以获得最大的速度提升。

共享内存范式：基于R的简单介绍

- 两种并行范式：共享内存范式(共享内存)、消息传递范式(分布式内存、通过网络进行通信)
- 共享内存指所有的处理器都共享同一块内存地址空间
- 共享内存范式：多个并行的进程通过存取机器中它们所共同使用的内存(RAM)单元来互相通信
- 例子：多核机器、图像处理单元(Graphics processing unit, GPU)等
- Rdsm包可以从R语言的级别来完成共享内存并行化
- 针对某些应用，共享内存编程比其他的R并行包运行地快得多

共享内存代码的简洁

- 消息传递范式：变量x在进程1中，变量y在进程2中，将变量x复制给变量y（利用Rmpi包）
  - mpi.send.Robj(x, tag=0, dest=2) #进程1
  - y <- mpi.recv.Robj(tag=0, source=2) #进程2
- 共享内存范式：变量x和y都被共享,程序员仅需要编写
  - y <- x
- 使用共享内存可以极大简化代码、减少混乱，因此与消息传递环境相比，可以更快地编写和调试我们的程序

Rdsm包

- Rdsm包的好处：运行在共享内存中，且使用R来编程。R不能在R编程级别提供多线程，然而Rdsm包给R带来了多线程。缺点为只能在Linux或者Mac上进行安装。
- 矩阵乘法的例子（需要安装bigmemory包）

```
mmulthread <- function(u, v, w){
  require(parallel)
  myidxs <- splitIndices(nrow(u), myinfo$nwrkrs)[[myinfo$id]]
  w[myidxs, ] <- u[myidxs, ] %*% v[ , ]
  0 #do not return w for its heavy cost on time
}
```

- myinfo$nwrkrs表示线程个数，myinfo$id表示当前线程的id
- 不返回所计算的值。返回计算结果会消耗较多的时间，而且由于W是共享变量，也没必要返回

Rdsm包

- 矩阵相乘代码

```
test <- function(cls){
  #initialize Rdsm
  mgrinit(cls)

  #set shared variables
  mgrmakevar(cls, "a", 6, 2)
  mgrmakevar(cls, "b", 2, 6)
  mgrmakevar(cls, "c", 6, 6)

  #assign values
  a[ , ] <- 1:12
  b[ , ] <- rep(1, 12)

  #export function to threads
  clusterExport(cls, "mmulthread")

  #run
  clusterEvalQ(cls, mmulthread(a, b, c))
  print(c[ , ])
}

library(parallel)
c2 <- makeCluster(2)
test(c2)
```

所得结果

```
> test(c2)
     [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6]
[1,]    8    8    8    8    8    8
[2,]   10   10   10   10   10   10
[3,]   12   12   12   12   12   12
[4,]   14   14   14   14   14   14
[5,]   16   16   16   16   16   16
[6,]   18   18   18   18   18   18
```

mgrinit()用来初始化Rdsm包系统

mgrmakevar()用来在共享内存中创建三个矩阵

使用snow包的clusterEvalQ()来开始线程

Rdsm包与普通运算的计时对比

- 普通代码

```
> library(Rdsm)
> library(bigmemory)
> n <- 2000
> m <- matrix(runif(n^2), n, n)
> system.time(m%*%m)
   user  system elapsed
  5.270   0.004   5.275
```

Rdsm包与普通运算的计时对比

- 使用Rdsm代码（调用四个线程）

```
> cls <- makeCluster(4)
> mgrinit(cls)
[[1]]
[1] 0

[[2]]
[1] 0

[[3]]
[1] 0

[[4]]
[1] 0

> mgrmakevar(cls, "msh", n, n)
> mgrmakevar(cls, "msh2", n, n)
```

```
> mgrmakevar(cls, "msh", n, n)
> mgrmakevar(cls, "msh2", n, n)
> msh[ , ] <- m
> clusterExport(cls, "mmulthread")
> system.time(clusterEvalQ(cls, mmulthread(msh, msh, msh2)))
   user  system elapsed
  0.001   0.000   1.516
```

共享内存能够带来性能优势

- 共享内存与消息传递的比较
- 从消息传递上，就能看出它做了很多数据复制的工作，有时候是很大量的数据，这在很多情况下都是不必要的
- 下面我们将Rdsm包和利用消息传递范式的snow包进行速度对比

```
> snowmmul <- function(cls, u, v){
+     require(parallel)
+     idxs <- splitIndices(nrow(u), length(cls))
+     mmulchunk <- function(idxchunk) u[idxchunk, ] %*% v
+     res <- clusterApply(cls, idxs, mmulchunk)
+     Reduce(rbind, res)
+ }
```

共享内存能够带来性能优势

- 比较函数

```
> testcmp <- function(cls, n){
+     require(Rdsm)
+     require(parallel)
+     mgrinit(cls)
+     mgrmakevar(cls, "a", n, n)
+     mgrmakevar(cls, "c", n, n)
+     amat <- matrix(runif(n^2), n, n)
+     a[ , ] <- amat
+     clusterExport(cls, "mmulthread")
+     print(system.time(clusterEvalQ(cls, mmulthread(a, a, c))))
+     print(system.time(cmat <- snowmmul(cls, amat, amat)))
+ }
```

共享内存能够带来性能优势

- 不同核数、不同矩阵大小下的速度对比

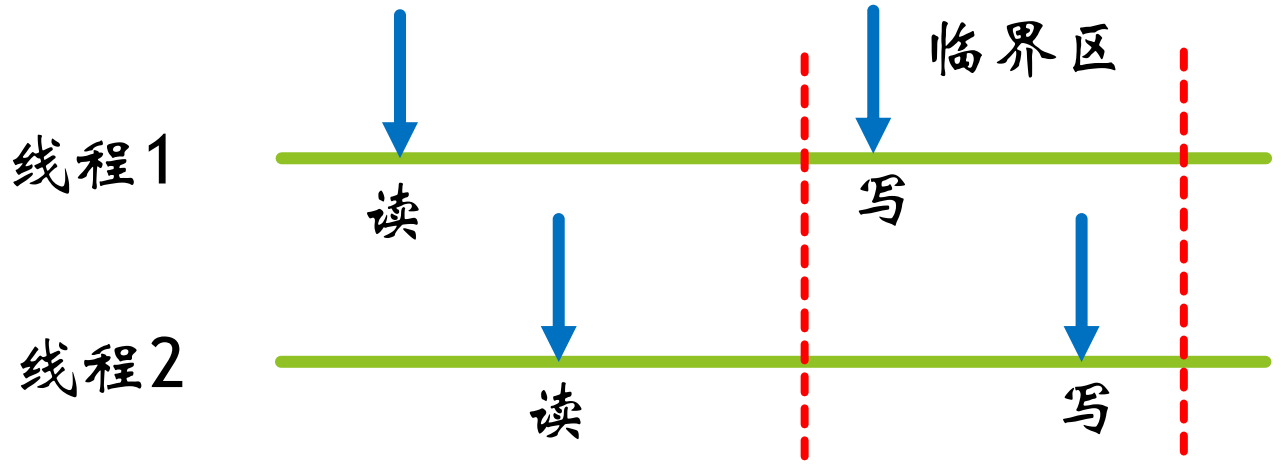
```
> cls <- makeCluster(4)
> testcmp(cls, 2000)
   user  system elapsed
  0.001   0.000   1.522
   user  system elapsed
  0.705   0.080   2.532
> stopCluster(cls)
> cls <- makeCluster(8)
> testcmp(cls, 3000)
   user  system elapsed
  0.002   0.000   3.535
   user  system elapsed
  3.026   1.385   8.325
> stopCluster(cls)
```

锁和屏障

- 竞争条件和临界区
- 一个场景：两个顾客都想预定指定日期的指定航班，他们几乎同时登陆了预订系统。每个顾客运行一个线程。假设这个航班只剩下一个座位。每个线程都会发现这个航班还剩下一个座位，因此每个线程都进入临界区（顾客的数据录入到指定日期的指定航班的代码区）。从而每个线程都会为顾客预定这个航班。
- 但是，一个线程会比另一个稍微先执行，第二个线程信息会覆盖前一个线程所写的信息。也就是，第一个顾客认为她成功预定好了，但其实是没有的。
- 这个临界区充满了被称为竞争条件的情形

锁和屏障

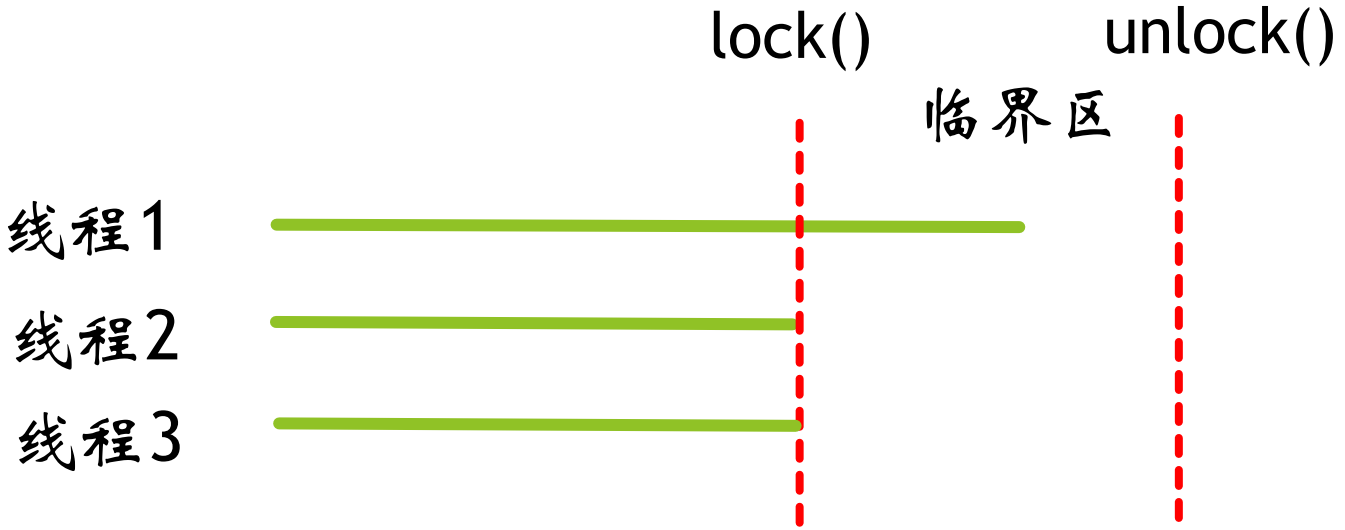
- 造成这种情况的原因是：每个线程的“读”（是否有位置）和“写”（录入顾客数据）是分开的。因此需要将读和写看成一个不可分割的组合，即原子化(atom)

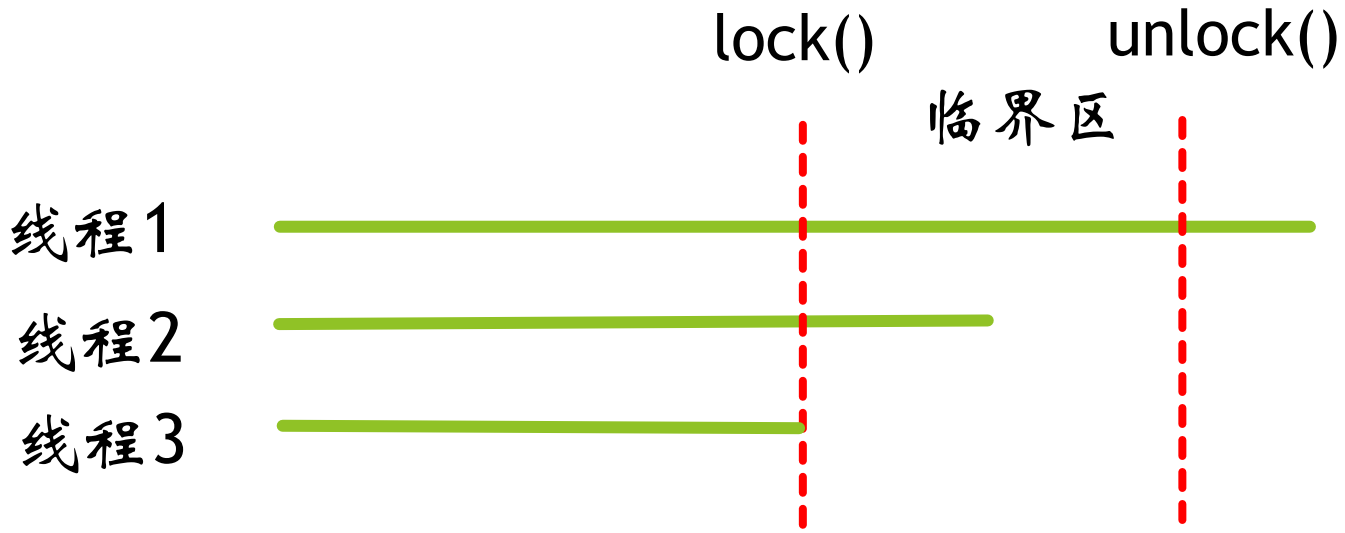


- 为了避免竞争条件，需要一个机制，同一个时刻只有一个线程可以存取临界区，这被称为互斥。
- 通过利用锁变量以及调用函数lock()和unlock()可以实现

锁和屏障

- 在临界区的前后分别调用函数lock()、unlock()





锁和屏障

- 一个例子，如下函数不可靠，2个线程同时都试着让总数加1，它们会互相干扰。最终结果不为2000，而是比2000小很多。

```
> s <- function(n){
+     for(i in 1:n){
+         tot[1,1] <- tot[1,1] + 1
+     }
+ }
> library(parallel)
> c2 <- makeCluster(2)
```

```
> clusterExport(c2, "s")
> library(Rdsm)
> library(bigmemory)
> mgrinit(c2)
[[1]]
[1] 0

[[2]]
[1] 0

> mgrmakevar(c2, "tot", 1, 1)
> tot[1,1] <- 0
> clusterEvalQ(c2, s(1000))
[[1]]
NULL

[[2]]
NULL

> tot[1,1]
[1] 1033
```

锁和屏障

- 原因可能为
  - thread 1 reads tot[1,1], finds it to be 227
  - thread 2 reads tot[1,1], finds it to be 227
  - thread 1 writes 228 to tot[1,1]
  - thread 2 writes 228 to tot[1,1]

锁和屏障

- 若我们加上lock()和unlock()函数

```
> s1 <- function(n){
+     for(i in 1:n){
+         rdsmlock("totlock")
+         tot[1,1] <- tot[1,1] + 1
+         rdsmunlock("totlock")
+     }
+ }
> mgrmakelock(c2, "totlock")
> tot[1,1] <- 0
> clusterExport(c2, "s1")
> clusterEvalQ(c2, s1(1000))
[[1]]
NULL

[[2]]
NULL

> tot[1,1]
[1] 2000
```

锁和屏障

- 屏障用来同步所有线程的，和MPI_Barrier有相似的作用，只不过后者是用来同步进程的
- 在Rdsm包中，这个函数为barr()，当一个线程调用它的时候，这个线程会被阻塞，直到所有的线程都调用了这个函数

例子：时间序列中的最大脉冲

- 考虑一个长度为n的时间序列，我们可能对脉冲感兴趣，也就是一段时间内保持较高的平均值。我们希望找到长度为k的拥有最大平均值的周期
- 时间序列zoo包中有一个函数rollmean(w,m),它返回所有长度为k的块的各个平均值

例子：时间序列中的最大脉冲

```
maxburst <- function(x, k, max, rslts){
        require(Rdsm)
        require(zoo)

        n <- length(x)
        myidxs <- getidxs(n-k+1)
        myfirst <- myidxs[1]
        mylast <- myidxs[length(myidxs)]
        mas[1, myfirst:mylast] <- rollmean(x[myfirst:(mylast+k-1)], k)

        barr()

        if(myinfo$id == 1){
                rslts[1,1] <- which.max(mas[1, ])
                rslts[1,2] <- mas[1, rslts[1,1]]
        }
}
```

- getidxs(n-k+1)将1到n-k+1根据线程个数分为若干段
- 通过rollmean(x[myfirst:(mylast+k-1)], k)将此段中的周期k的脉冲的平均值计算出来
- barr()确保所有线程都执行完了，指派一个线程合并各个进程的结果

例子：时间序列中的最大脉冲

- 运行所得结果

```
test <- function(cls){
        require(Rdsm)
        mgrinit(cls)
        mgrmakevar(cls, "mas", 1, 9)
        mgrmakevar(cls, "rslts", 1, 2)
        x <<- c(5, 7, 6, 20, 4, 14, 11, 12, 15, 17)
        clusterExport(cls, "maxburst")
        clusterExport(cls, "x")
        clusterEvalQ(cls, maxburst(x, 2, mas, rslts))
        print(rslts[,])
}

c2 <- makeCluster(2)
test(c2)
```

```
> c2 <- makeCluster(2)
> test(c2)
[1]   9 16
```