Efektivní R

Statistický workshop Mariánská (podzim 2019)

Lubomír Štěpánek^{1, 2}



 Oddělení biomedicínské statistiky Ústav biofyziky a informatiky
 lékařská fakulta
 Univerzita Karlova v Praze



²Katedra biomedicínské informatiky Fakulta biomedicínského inženýrství České vysoké učení technické v Praze

9. listopadu 2019

(2019) Lubomír Štěpánek, CC BY-NC-ND 3.0 (CZ)



Dílo lze dále svobodně šířit, ovšem s uvedením původního autora a s uvedením původní licence. Dílo není možné šířit komerčně ani s ním jakkoliv jinak nakládat pro účely komerčního zisku. Dílo nesmí být jakkoliv upravováno. Autor neručí za správnost informací uvedených kdekoliv v předložené práci, přesto vynaložil nezanedbatelné úsilí, aby byla uvedená fakta správná a aktuální, a práci sepsal podle svého nejlepšího vědomí a svých "nejlepších" znalostí problematiky.

Obsah

- Úvod
- Efektivní kód
- 3 Input/Output (I/O)
- Paralelizace
- C++ v R
- 6 Dynamizace
- Tvorba balíčku
- Reference

Online repozitář k přednášce

githubí repozitář k přednášce ▶ GitHub

https://github.com/LStepanek/marianska podzim 2019

Motivace

- R je high-level, interpretovaný programovací jazyk
 - proto je R relativně "pomalé"
- přesto lze pomocí různých přístupů zrychlit exekuci kódu mnohdy až na rychlost low-level jazyků
 - kam patří např. jazyk C++

Intermezzo – hexbiny

- pravidelné šestiúhelníkové samolepky fixních definovaných rozměrů
- typické (nejen) pro R komunitu
- více na

http://hexb.in/



Některá evangelia efektivní syntaxe a sémantiky

- Miluj syntax svou!
- ② Budeš vektorizovat!
- Vektory Tobě svěřené nenecháš iterativně růst!
- Budeš ctít funkce rodiny apply() Tobě představené!
- Ne-for()-smilníš!
- Paralelizuj, jsi-li hoden.
- Mocné umění C++ v R dobře skrývej před nepřítelem!

Efektivní syntaxe

- smart code má svá pravidla, i když se tím rychlost jeho provedení nezvýší
 - na jeden řádek patří maximálně 80 znaků
 - indentace kódu je vhodná, alespoň dvě mezery (lépe čtyři) na každou úroveň
 - názvy proměnných a funkcí je vhodné sjednotit, např. proměnné pomocí snake_notace a funkce pomocí camelCaps notace

Efektivní syntaxe

- je vhodné dodržovat mezery
- např.

může znamenat

ale i

$$1 \mid \mathbf{x} < -5 \quad \text{\# je x menší než } -5$$
?

pak záleží na kontextu (zda je někdy předtím definováno x)

Efektivní syntaxe

- je výhodné se vyhnout adresaci dolarem typu \$var a nahradit ji adresací typu [, var]
- důvodem je umožnění dynamického iterování v případě adresace typu
 [, var]

```
for(my_variable in colnames(mtcars)){
             cat(
 3
                 mean(mtcars$my_variable)
 4
 5
             cat("\n")
 6
        }
             # nebude fungovat
 8
        for(my_variable in colnames(mtcars)){
 9
             cat(
10
                 mean(mtcars[, my_variable])
11
             cat("\n")
13
             # funguje
```

Prealokace

 objekty je vhodné v kódu "prealokovat", tj. přiřadit jim iniciálně jejich datovou strukturu, byť jsou hodnotami populovány až později

```
bezAlokace <- function(n){</pre>
 1
2
3
              my_output <- NULL
              for(i in 1:n){my_output <- c(my_output, i)}</pre>
 5
 6
              return (my_output)
 78
         }
 9
         sAlokaci <- function(n){
10
              my_output <- rep(0, n)</pre>
11
12
              for(i in 1:n){my_output[i] <- i}</pre>
13
              return(my_output)
15
         }
```

Prealokace

porovnání rychlosti exekuce obou funkcí

```
library (microbenchmark)
 3
         n < -5000
 5
         microbenchmark (
 6
              times = 100,
              unit = "ns",
 8
              bezAlokace(n),
              sAlokaci(n)
10
11
           Unit: nanoseconds
12
           bezAlokace(n) mean 36479684.57 median 35515340
13
             sAlokaci(n) mean 401711.53 median
                                                  387873
```

prealokované objekty jsou exekuovány obecně rychleji

Vektorizace

- čím méně používá R-ková funkce nebo procedura R-kových funkcionalit, než se "dostane" k původním C++ procedurám, tím bude obecně rychleji provedena
- proto je výhodnější pracovat s vektorem než se skalárem, nad kterým je třeba provést ještě další operace

Vektorizace

porovnání rychlosti exekuce obou funkcí

```
library (microbenchmark)
 3
         n < -5000
 5
         microbenchmark (
 6
             times = 100,
             unit = "ns",
 8
             bezVektorizace(n),
 9
              sVektorizaci(n)
10
11
           Unit: nanoseconds
12
           bezVektorizace(n) mean 50419159.4 median 48017275
13
             sVektorizaci(n) mean 197811.4 median
                                                     167637
```

přístup s vektorizací je exekuován obecně rychleji

• Najděme pomocí Monte-Carlo integrace velikost určitého integrálu

$$\int\limits_{0}^{1}x^{2}\mathrm{d}x.$$

• Najděme pomocí Monte-Carlo integrace velikost určitého integrálu

$$\int_{0}^{1} x^{2} dx.$$

zřejmě je

$$\int_{0}^{1} x^{2} dx = \left[\frac{x^{3}}{3} \right]_{0}^{1} = \frac{1}{3} - 0 = \frac{1}{3}.$$

Najděme pomocí Monte-Carlo integrace velikost určitého integrálu

$$\int_{0}^{1} x^{2} dx.$$

Najděme pomocí Monte-Carlo integrace velikost určitého integrálu

$$\int_{0}^{1} x^{2} dx.$$

• Přepište následující kód pomocí vektorizace.

$$\frac{\max\{x^2, y^2\}}{\min\{x, y\}} \ge 2.$$

Prodlužování vektorů

- prodlužování vektoru během iterace pomocí klauzule
 x <- c(x, ...) je obecně pomalé a je lepší se mu vyhnout
- vytvořme vektor třetích mocnin čísel 1 až 1000

Prodlužování vektorů

- prodlužování vektoru během iterace pomocí klauzule
 x <- c(x, ...) je obecně pomalé a je lepší se mu vyhnout
- vytvořme vektor třetích mocnin čísel 1 až 1000

```
# prodlužování vektoru

x <- NULL

for(i in 1:1000) {x <- c(x, i ^ 3)}

# prealokace
    x <- rep(0, 1000)

for(i in 1:1000) {x[i] <- i ^ 3}

# vektorizace
    x <- c(1:1000) ^ 3</pre>
```

Prodlužování vektorů

- prodlužování vektoru během iterace pomocí klauzule
 x <- c(x, ...) je obecně pomalé a je lepší se mu vyhnout
- vytvořme vektor třetích mocnin čísel 1 až 1000

```
my_start <- Sys.time()</pre>
         x <- NULL
                               # prodlužování vektoru
         for (i in 1:1000) \{x < -c(x, i^3)\}
 4
         my_stop <- Sys.time(); my_stop - my_start # 0.050s</pre>
 5
 6
         my_start <- Sys.time()</pre>
 78
         x <- rep(0, 1000) # prealokace
         for (i in 1:1000) \{x[i] < - i ^ 3\}
         my_stop <- Sys.time(); my_stop - my_start # 0.037s</pre>
10
11
         my_start <- Sys.time()</pre>
         x < -c(1:1000) ^ 3 # vektorizace
13
         my_stop <- Sys.time(); my_stop - my_start # 0.015s</pre>
```

- Určeme pomocí vektorizace počet všech čísel menších než 1000, která po dělení 7 vracejí zbytek 2.
- Najděme pomocí vektorizace všechny kladné celočíselné dělitele čísla 7278548.
- Najděme pomocí vektorizace všechna čísla menší než 1000, která jsou dělitelná 5, 7 a 8.
- Najděme pomocí vektorizace největší společný dělitel a nejmenší společný násobek čísel 22375 a 63366.
- O Určeme pomocí vektorizace, zda je číslo 4732363 prvočíslem.

Caching proměnných

- jev caching známe z webového prohlížeče statické struktury typu obrázky se tzv. cachují, tj. dočasně se stahují desktopově, aby se při opětovném nahrání stránky ihned znovu nahrály
- např. chceme každý člen matice vydělit součtem celé matice

```
# méně vhodně
set.seet(1)
my_matrix <- matrix(runif(10000), nrow = 100)

apply(
my_matrix,
2,
function(i){i / sum(my_matrix)}
)</pre>
```

Caching proměnných

• např. chceme každý člen matice vydělit součtem celé matice

```
# lepší řešení

set.seet(1)

my_matrix <- matrix(runif(10000), nrow = 100)

sum_of_my_matrix <- sum(my_matrix)

apply(
my_matrix,
2,
function(i){i / sum_of_my_matrix}
)</pre>
```

Rodina funkcí *apply()

- jde o funkce dobře optimalizované tak, že v rámci svého vnitřního kódu "co nejdříve" volají C++ ekvivalenty R-kové funkce
- díky tomu jsou exekučně rychlé
- nejužitečnější je apply() a lapply()

Funkce apply()

- vrací vektor výsledků funkce FUN nad maticí či datovou tabulkou X, kterou čte po řádcích (MARGIN = 1), nebo sloupcích (MARGIN = 2)
- syntaxe je apply(X, MARGIN, FUN, ...)

```
apply(mtcars, 2, mean)
 2
    my_start <- Sys.time()</pre>
    x <- apply(mtcars, 2, mean)
 5
6
7
8
    my_stop <- Sys.time(); my_stop - my_start # 0.019s</pre>
    my_start <- Sys.time()</pre>
    x <- NULL
    for(i in 1:dim(mtcars)[2]){
10
      x <- c(x, mean(mtcars[, i]))
11
      names(x)[length(x)] <- colnames(mtcars)[i]</pre>
12
    my_stop <- Sys.time(); my_stop - my_start # 0.039s</pre>
```

Funkce lapply()

- vrací list výsledků funkce FUN nad vektore či listem X
- syntaxe je lapply(X, FUN, ...)
- vhodná i pro adresaci v listu

Náhrada for cyklu funkcí lapply()

- lapply se hodí pro přepis for() cyklu do vektorizované podoby
- obě procedury jsou ekvivalentní stran výstupu, lapply() je významně rychlejší

```
# for cyklus
            x <- NULL
            for(i in 1:N){
              x < -c(x, FUN)
 5
            }
 6
            # lapply
8
            x <- unlist(
              lapply(
10
                 1:N,
11
                 FUN
12
13
```

Náhrada for cyklu funkcí lapply()

příklad s odhadem času exekuce kódu

```
# for cyklus
    my_start <- Sys.time()</pre>
 4
    for_x <- NULL
 5
    for(i in 1:100000) \{for_x < c(for_x, i^5)\}
 6
7
8
9
    my_stop <- Sys.time(); my_stop - my_start # 18.45s</pre>
     # lapply
10
    my_start <- Sys.time()</pre>
11
12
    lapply_x <- unlist(lapply(</pre>
13
       1:100000,
14
     function(i) i ~ 5 # koncept anonymní funkce
15
    ))
16
    my_stop <- Sys.time(); my_stop - my_start # 0.10s</pre>
```

Real-time výpis do konzole při iterování

- při iterativních procesech typu for cyklus trvajících delší uživatelský čas je vhodné mít představu, v jaké fázi se proces kdy nachází¹
- klíčem je použití příkazu flush.console() před iterací

```
x < - NUI.I.
         flush.console()
 4
         for(i in 1:100000){
 5
            x < -c(x, i^5)
 6
            cat(
                paste(
 8
                     "Proces hotov z ".
 9
                     i / 100000 * 100,
10
                     " %.\n", sep =
11
13
```



¹zvlášť je-li lineární

Progress bar pro funkce *apply()

- balíček pbapply nabízí progress bar i pro funkce apply() a další
- syntaxe je pouze o přidání prefixu pb před původní funkci

```
x <- lapply(
           1:1000000,
           function(i) i ^ 5
 4
 5
6
         # s progress barem
78
         library(pbapply)
9
          <- pblapply(
10
           1:1000000,
11
           function(i) i ^ 5
```

Dynamické iterování

- dynamické iterování umožňuje aplikovat jednu proceduru nebo funkci opakovaně na mnoho podobných objektů pomocí krátkého kódu
- chtějme například vytvořit 26 vektorů $a,\,b,\,\ldots,\,z$ tak, že j-tý vektor je tvořen právě j jedničkami, kde j odpovídá indexu názvu vektoru v rámci anglické abecedy, tedy např. pro a je j=1, pro c je j=3 apod.

Dynamické iterování

• chtějme například vytvořit 26 vektorů $a,\,b,\,\ldots,\,z$ tak, že j-tý vektor je tvořen právě j jedničkami, kde j odpovídá indexu názvu vektoru v rámci anglické abecedy, tedy např. pro a je j=1, pro c je j=3 apod.

```
# o něco lepší řešení

a <- rep(1, which(letters == "a"))
b <- rep(1, which(letters == "b"))
c <- rep(1, which(letters == "c"))
# ...</pre>
```

Dynamické iterování

• chtějme například vytvořit 26 vektorů $a,\,b,\,\ldots,\,z$ tak, že j-tý vektor je tvořen právě j jedničkami, kde j odpovídá indexu názvu vektoru v rámci anglické abecedy, tedy např. pro a je j=1, pro c je j=3 apod.

Dynamické iterování

• nyní chceme všechny vektory $a,\,b,\,\ldots,\,z$ vynásobit číslem 2 a přičíst ke každé jeho složce vždy náhodnou hodnotu bílého šumu $\mathcal{N}(0,1^2)$

```
1  # naivní řešení

2  | a <- 2 * a + rnorm(1)

4  | b <- 2 * b + rnorm(1)

5  | c <- 2 * c + rnorm(1)

6  | # ...
```

Dynamické iterování

• nyní chceme všechny vektory $a,\,b,\,\ldots,\,z$ vynásobit číslem 2 a přičíst ke každé jeho složce vždy náhodnou hodnotu bílého šumu $\mathcal{N}(0,1^2)$

```
# řešení s dynamickým iterováním

for(my_letter in letters){

my_vector <- get(my_letter)

assign(
my_letter,
2 * my_vector + rnorm(1)

)

11
```

Funkce do.call()

 máme-li list argumentů, pro který chceme volat danou funkci, lze využít příkaz do.call()

Funkce do.call()

- funkce do.call() umožňuje iterovat nad funkcemi
- předpokládejme, že chceme pro vektory hodnot \boldsymbol{x} a (y) zjistit postupně průměr, minimum, maximum, medián, směrodatnou odchylku, rozptyl a vždy poslední cifru čísla

```
set.seed(1)
         x <- floor(runif(100) * 100)
         set.seed(2)
         v <- floor(runif(100) * 100)</pre>
 5
 6
         # možné řešení
         mean(x)
 8
         min(x)
         # . . .
10
         lapply(x, function(i) i %% 10)
11
         mean(y)
         # ...
13
         lapply(y, function(i) i %% 10)
```

Funkce do.call()

lépe však

```
set.seed(1)
    x <- floor(runif(100) * 100)
    set.seed(2)
 4
    y <- floor(runif(100) * 100)</pre>
 5
 6
    for(my_vector_name in c("x", "y")){
 7
8
9
         my_vector <- get(my_vector_name)</pre>
         for (my_function in c(
             "mean". "min".
10
             "max". "median".
11
             "sd", "var",
12
             function(i) i %% 10
13
         )){
14
             cat(do.call(my_function, list(my_vector)))
15
             cat("\n")
16
         }
17
```

Pokročilejší caching proměnných

 lze též využít balíček memoise, který umožňuje sofistikovanější caching proměnných a funkcí, které jsou volány opakovaně

```
# původní funkce
         getFibonacci <- function(n){</pre>
              if(n == 1) \{return(1)\}
 4
              if(n == 2) \{return(1)\}
 5
              if(n >= 3){
 6
                   return(
                        getFibonacci(n - 1) +
 8
                        getFibonacci(n - 2)
 9
10
11
12
13
         # cachovaná funkce
14
         memoisedFibonacci <- memoise::memoise(getFibonacci)</pre>
```

Pokročilejší caching proměnných

porovnejme obě funkce mezi sebou

• cachovaná verze funkce je více než stokrát rychlejší (!)

Prekompilace

- pro (pre)kompilaci funkcí lze využít balíček compiler, je součástí jádra R od verze 2.13.0
- vestavěné funkce přicházející v etablovaných balíčcích jsou výhradně prekompilovány

```
1 library(compiler)
2
3     getFunction("mean")
4     # function (x, ...)
5     # UseMethod("mean")
6     # <bytecode: 0x033be6b8>
7     # <environment: namespace:base>
```

• třetí řádek naznačuje, že funkce má kompilovanou podobu, kterou není nutné překládat R-kovým interpreterem

Prekompilace

 porovnejme rychlost vestavěné funkce mean(), vlastní funkce pro průměr my_mean() a její kompilované verze

```
my_mean <- function(x){
    my_output <- 0
    for(i in 1:length(x)){
        my_output <- my_output + x[i] / length(x)
    }
    return(my_output)
}

# kompilace pomoci funkce cmpfun() baličku compiler
compiled_my_mean <- compiler::cmpfun(my_mean)</pre>
```

Prekompilace

 porovnejme rychlost vestavěné funkce mean(), vlastní funkce pro průměr my_mean() a její kompilované verze

Rektangulární okem čitelné formáty vs. binární formáty

- okem čitelné rektangulární formáty lze kromě snadného nahlédnutí uživatelem především apendovat, tj. lze přidat nový záznam dat
 - přípony .csv, .xlsx, .txt, ...
- binární rektangulární formáty nelze prohlédnout pouhým okem, nelze k nim bez dalších úprav ani apendovat, ale rychleji se nahrávají/ukládají a mají vysokou míru komprese
 - přípony .Rdata, .Rds

Formát feather

- vznikl jako výslednice potřeby sdílet struktury typu data.frame mezi R a Pythonem
- soubory mají příponu .feather
- sympatickou vlastností je zejména velká míra komprese (a malá velikost na disku)
- základní práce s formátem feather v R

```
1 library(feather)
2 |
3 | feather::write_feather(...)
4 | feather::read_feather(...)
```

a v Pythonu

```
import feather as ft

my_data = ft.read_dataframe(...)
```

Načítání velkých souborů

obecně lze použít balíček data.table či nový balíček vroom

```
my_data <- data.frame(matrix(1:5e7, nrow = 1e6))

library(data.table)
fwrite(x = my_data, file = "moje_data.txt")

fread("moje_data.txt")

library(vroom)
vroom_write(x = my_data, path = "moje_data.txt")

vroom("moje_data.txt")</pre>
```

Úvod do paralelních výpočtů

- paralelní výpočty jsou vhodné u iterativních serializovaných procesů, jejichž výsledky jsou na sobě nezávislé
- výpočty pak lze provádět paralelně v jeden čas na jádrech procesoru
- stěžejní je balíček parallel
- rozlišujeme forking a socketing
 - forking je adopce běžící seance R-ka do všech jader (nebo jejich množin, tzv. clusterů)
 - socketing je nová seance R-ka v jádru nebo clusteru
- forking v podstatě vůbec nefunguje na Windows[®] (!)
- u socketingu je třeba nové seance v jádrech/clusterech (slave) vybavit proměnnými z hlavního prostředí (master)

Sériový výpočet s použitím lapply()

• na jednom jádru pomocí lapply() zkusme

```
library(lme4)
 3
         my_function <- function(i){</pre>
              lmer(
 5
                  Petal.Width ~ . - Species + (1 | Species),
 6
                  data = iris
 8
         }
10
         system.time(
11
              my_first_save <- lapply(1:100, my_function)</pre>
12
13
           user
14
         # 2.73
```

"Paralelní" výpočet s použitím mclapply()

na jednom jádru pomocí mclapply() zkusme

```
library(lme4)
         my_function <- function(i){lmer(</pre>
                  Petal.Width ~ . - Species + (1 | Species),
 5
                  data = iris
 6
7
         ) }
 8
         system.time(my_first_save <- mclapply(</pre>
                  1:100,
10
                  my_function,
11
                  mc.cores = detectCores() # ne na Windows !
12
         ))
13
         # user 2.73
```

 funkce mclapply() je vhodná pro forking, ten ale na Windows[®] obecně nefunguje

Paralelní výpočet

• na všech jádrech pomocí parLapply() zkusme

```
library(lme4)
 2
        my_function <- function(i){</pre>
 4
             lmer(Petal.Width ~ . - Species + (1 | Species),
 5
                   data = iris)
 6
7
         }
 8
         my_cluster <- makeCluster(detectCores())</pre>
 9
         clusterEvalQ(my_cluster, library(lme4))
10
11
         system.time(
12
             my_third_save <- parLapply(my_cluster, 1:100,
                 my_function)
13
14
         # user 0.11
15
         stopCluster(my_cluster)
```

Uplatnění C++ v R

- některé části kódu, zejména ty bottleneckové je možné zrychlit jejich napsáním v C++
- k tomu lze použít balíček Rcpp

Funkce napsaná v C++ a její volání v R

funkci pro signum bychom ve stylu C++ napsali nejspíš v R následovně

Funkce napsaná v C++ a její volání v R

 v C++ ji napíšeme stejnou sémantikou a zavoláme pomocí cppFunction(

```
library(Rcpp)
 2 3 4
    cppFunction(
         'int signCpp(double x) {
 5
                       if (x > 0) {
 6
                                return 1:
 78
                       } else if (x == 0) {
                                return 0:
 9
                       } else {
10
                                return -1;
11
        7,
13
```

pro zavolání již stačí jen

```
1 || signCpp(-4) # -1
```

Úvod Efektivní kód

Literatura

- Hadley Wickham. *Advanced R*. Boca Raton, FL: CRC Press, 2015. ISBN: 978-1466586963.
- Colin Gillespie. Efficient R programming: a practical guide to smarter programming. Sebastopol, CA: O'Reilly Media, 2016. ISBN: 978-1491950784.

Děkuji za pozornost!

lubomir.stepanek@vse.cz lubomir.stepanek@lf1.cuni.cz lubomir.stepanek@fbmi.cvut.cz



https://github.com/LStepanek/marianska podzim 2019