

ЕЖЕГОДНЫЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СЕМИНАР GraphHPC

Воеводин Владимир Валентинович, заместитель директора по научной работе, чл.-корр. РАН, НИВЦ МГУ

Симонов Алексей Сергеевич, начальник отделения, к.т.н., ОАО «НИЦЭВТ»

Фролов Александр Сергеевич, начальник отдела, ОАО «НИЦЭВТ»

Семенов Александр Сергеевич, начальник сектора, к.т.н., ОАО «НИЦЭВТ»

Аннотация: 5 марта в МГУ прошёл второй ежегодный научно-технический семинар GraphHPC-2015 (<http://www.dislab.org/GraphHPC-2015>), посвящённый проблемам параллельной обработки больших графов с использованием суперкомпьютеров. Организаторами семинара выступили НИВЦ МГУ и компания НИЦЭВТ (лаборатория DISLab) при поддержке ведущих IT-компаний NVIDIA, IBM, T-Платформы, Intel, Sapphire и AMD. Почему возникла необходимость в проведении подобного мероприятия, и чем оно отличается от других российских научных конференций в области HPC, описано в данной статье.

Ключевые слова: графы, суперкомпьютеры, параллельная обработка, семинар

THE GraphHPC WORKSHOP

Voevodin Vladimir V., Deputy Director for Research, Corresponding member of the Russian Academy of Sciences, Research Computing Center, Lomonosov Moscow State University

Simonov Alexey S., head of a division, PhD, JSC NICEVT

Frolov Alexander S., head of a department, JSC NICEVT

Semenov Alexander S., head of a sector, PhD, JSC NICEVT

Abstract: The 2nd GraphHPC workshop on large-scale graph processing using HPC systems was held at Moscow State University on March 5th, 2015. The GraphHPC-2015 workshop (www.dislab.org/GraphHPC-2015/en) was organized by DISLab Laboratory of JSC NICEVT and Research Computing Center of Moscow State University with support of leading IT companies such as NVIDIA, IBM, T-Platforms, Intel, Sapphire and AMD. What motivated organization of the GraphHPC workshop and how it differs from other HPC events held in Russia is described in this paper.

Index terms: graphs, supercomputers, high performance computing, workshop

Введение

За последние несколько лет анализ больших графов с применением высокопроизводительных вычислительных систем (или суперкомпьютеров) превратился из нового направления в области HPC в одну из наиболее популярных тем, по которой ежегодно публикуются десятки научных работ, проводится множество узконаправленных научно-технических семинаров (или «воркшопов») и секций, включенных в программу основных научных конференций по проблемам HPC и Big Data. Такой повышенный научный интерес к теме обработки больших графов с использованием высокопроизводительных и распределенных систем связан в первую очередь с растущей ролью данных, которые могут быть представлены в виде графов, и ценностью информации, которую можно из-

влечь с помощью анализа графов, как в экономике и науке, так и в обеспечении безопасности государства.

Реальные графы представляют собой достаточно сложный объект компьютерного анализа, так как имеют нерегулярную структуру, большие размеры, могут динамически меняться. Примерами таких графов являются: сеть Интернет, веб-граф (WWW), социальные сети, телефонные сети, графы, возникающие в биоинформатике и многие другие. Необходимость применения суперкомпьютеров или кластерных систем возникает вследствие больших объемов обрабатываемых графов и необходимости достижения высокой скорости обработки.

Вычисления над графами зависят от структуры анализируемого графа, а доля опера-

ций доступа к данным значительно превышает долю вычислений в задачах. Такие свойства графов приводят к ряду проблем при их обработке с помощью высокопроизводительных вычислительных систем.

Современные высокопроизводительные вычислительные узлы создаются на базе многопроцессорных многоядерных серверных процессоров, зачастую дополненные ускорителями NVIDIA/AMD, Intel Xeon Phi или ПЛИС. Параллелизм одного вычислительного узла может достигать несколько тысяч параллельных процессов. Проблемы анализа графов на таком узле – низкая эффективность использования подсистемы памяти из-за интенсивного нерегулярного доступа к ней, большие накладные расходы на обеспечение синхронизации большого числа параллельных процессов, трудности использования векторных команд, необходимых для эффективной загрузки ресурсов.

Современные суперкомпьютеры состоят из тысяч и десятков тысяч вычислительных узлов. Даже лучшие высокоскоростные коммуникационные сети, объединяющие узлы, препятствуют эффективному распараллеливанию:

- частые обмены «все-всем», часто присутствующие в графовых задачах, требуют высокой бисекционной пропускной способности сети;
- большому числу процессов необходимы эффективные средства синхронизации;
- для графовых задач свойственны интенсивные обмены короткими сообщениями, которые требуется агрегировать для снижения накладных расходов;
- нужна балансировка нагрузки.

Интенсивно развиваются программные модели, ориентированные на анализ больших графов с использованием суперкомпьютеров. Современные (традиционные) средства параллельного программирования, такие как OpenMP, MPI, CUDA, OpenCL и другие модели параллельного программирования общего назначения, делают процесс разработки графовых приложений достаточно

трудоемким, и поэтому большое внимание уделяется повышению продуктивности за счет специализированных программных моделей, основанных на введении абстракции графов, общем повышении уровня абстракции и использовании средств интеллектуального анализа программ компилятором для выявления и эксплуатации параллелизма, а также средств автоматического тюнинга программ (подбор оптимального представления данных, способов распределения графа по вычислительным узлам, подбор алгоритмов балансировки). В связи с этим, актуальным является разработка проблемно-ориентированных языков программирования (DSL) и их реализаций для различных архитектур.

Описанные выше актуальные проблемы предоставляют широкие возможности для научных исследований и получения результатов, обладающих научной новизной. Для представления таких результатов можно отметить несколько конференций и научно-технических семинаров, проводящихся за рубежом. Рассмотрим некоторые из них.

Во-первых, это серия семинаров, проводящихся в США с 2008 года и организованных ведущим ученым в этой области Д. Бейдером. Названия этих семинаров менялись от года к году, но с 2014 года семинар стал называться: Graph Algorithms Building Blocks (GABB) и проводится в рамках престижной международной конференции International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS).

Также соответствующая секция, посвященная высокопроизводительному анализу графов, включена в относительно новую конференцию High Performance Extreme Computing Conference (HPEC), на которой рассматриваются экстремальные с точки зрения требований по масштабируемости приложения и технологии, что в очередной раз подчеркивает особое место графовых задач в грядущей «эксафлопсной» эпохе.

Во-вторых, это конференция GraphLab Workshop, которая организуется компанией GraphLab Inc. (теперь переименованной в

Dato Inc.), разработавшей фреймворк GraphLab для обработки больших графов, ориентированный на задачи машинного обучения. На этой конференции преимущественно рассматриваются технологии параллельной обработки графов, полученных из социальных сетей, сети Интернет и др.

В третьих, значимой конференцией по анализу графов является Graph Data-management Experiences & Systems (GRADES), которая проводится с 2013 года. Конференция GRADES имеет уклон в параллельные базы данных (RDF и др.), визуализацию графов и языки запросов к графовым базам данных.

Еще одним из важных мероприятий является семинар по обработке больших графов, проходящий в рамках конференции IEEE Big Data.

Научно-технический семинар GraphHPC

В 2014 году состоялся первый научно-технический семинар «Технологии параллельной обработки больших графов» (GraphHPC-2014), второй семинар состоялся через год, 5 марта 2015 года. Основные цели научно-технического семинара GraphHPC <http://www.dislab.org/GraphHPC-2015> — привлечение внимания к этой области применения суперкомпьютеров в России, обмен информацией между людьми, работающими в этой области, инициирование новых работ, обсуждение перспектив развития как приложений, так и технологий анализа больших графов.

Тематика семинара GraphHPC посвящена описанным выше проблемам параллельной обработки больших графов и в настоящий момент включает четыре направления:

- Приложения. Направление включает графовые приложения из самых разнообразных прикладных областей, требующие анализа больших графов и использующие высокопроизводительные вычислительные комплексы.

- Алгоритмы. Рассматриваются алгоритмы анализа графов и их реализация на вычислительных системах с различной архитектурой.

- Программные модели. Анализируются все вопросы, связанные с проблемно-ориентированными языками программирования, фреймворками (библиотеками, runtime-системами) и другими инструментальными комплексами, ориентированными на обработку графов.

- Архитектура. Рассматривается архитектура высокопроизводительных систем для решения задач обработки графов, специализированные вычислительные комплексы для обработки графов, перспективные архитектуры суперкомпьютеров, их имитационное моделирование, макетирование и применение для обработки больших графов.

Предполагается, что в будущем по мере возникновения необходимости тематика семинара GraphHPC может быть расширена.

Конкурс GraphHPC

Другим важным элементом GraphHPC является конкурс contest.dislab.org, главными задачами которого являются: во-первых, повышение интереса к семинару среди студентов, аспирантов и молодых ученых, и, как следствие, вовлечение их в эту область, во-вторых, сравнение алгоритмов, программных моделей и архитектур вычислительных систем для решения той или иной графовой задачи.

В конкурсе каждому участнику предоставляются одинаковые условия, в том числе и вычислительные системы. Конкурсной задачей может быть базовый алгоритм обработки графов, например, в 2014 году была поставлена задача поиска кратчайших путей от заданной вершины ко всем остальным в графе с весами, Single Source Shortest Paths (SSSP), в 2015 году – задача построения минимального остовного дерева в графе с весами, Minimum Spanning Tree (MST). В будущем задачей конкурса может быть небольшая прикладная проблема. Целью конкурса является получение наиболее высокой производительности на заданном типе (типах) графа. Размеры графа могут выбираться участником конкурса или могут быть заранее зафиксированы.

На данный момент в конкурсе использовались две категории вычислительных систем: ограниченные одним вычислительным узлом и многоузловой кластер. Получение максимального результата в каждой из этих категорий требует особых подходов к реализации и приемов оптимизации. Так как категория одного вычислительного узла предполагает обычный многопроцессорный серверный узел или гибридные узлы с ускорителями (такими как NVIDIA/AMD/Intel Xeon Phi/ПЛИС), то возникает естественная конкуренция архитектур при решении конкурсной задачи. Чтобы можно было увидеть, какой производительности можно достичь на других архитектурах, поощряются результаты на системах, доступом к которым имеется у того или иного участника. Такие результаты рассматриваются отдельно.

Участники, имеющие профессиональный опыт программирования высокопроизводительных систем, находятся в выигрышном положении относительно студентов, которые только начинают получать такой опыт. В связи с этим объявляется отдельная номинация для студентов. Также для поддержки студентов организаторы конкурса проводят в МГУ мастер-класс с подробным рассказом о задаче, алгоритмах ее решения и приемах оптимизации на суперкомпьютерах.

Участники могут использовать любые программные технологии для решения задачи, например, OpenMP, MPI, CUDA или OpenCL. Для проведения конкурса разработана система HPCjudge, которая может быть использована для проведения любых соревнований по программированию на суперкомпьютерах, позволяющая участникам оперативно получать удаленный доступ на предоставляемые организаторами вычислительные ресурсы и отправлять решения. Система, автоматически тестирует решения на корректность и производительность, отображает на сайте он-лайн таблицу с результатами, обеспечивает управление конкурсом.

Заключение

За два года существования семинара GraphHPC и конкурса можно отметить воз-

растающий интерес к тематике графовых задач и суперкомпьютеров. В семинарах приняли участие ученые из академических организаций, университетов, представители промышленности. География семинара включает Москву, Новосибирск, Екатеринбург, Нижний Новгород, Омск. Семинары подтолкнули исследования в области графовых задач, появились новые работы, в том числе по материалам участия в конкурсе. Стоит отметить, что в семинаре 2015 года появилась студенческая сессия.

В будущем планируется продолжать развивать семинар GraphHPC. Возможно участие иностранных докладчиков или приглашение известных ученых. Планируется выпуск тематических сборников статей по материалам докладов.