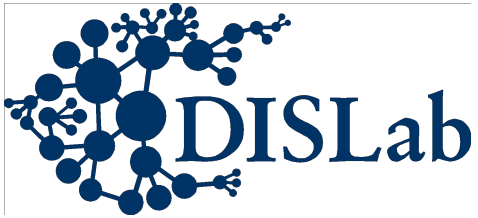
Параллельная обработка больших графов

Александр Сергеевич Семенов

www.dislab.org



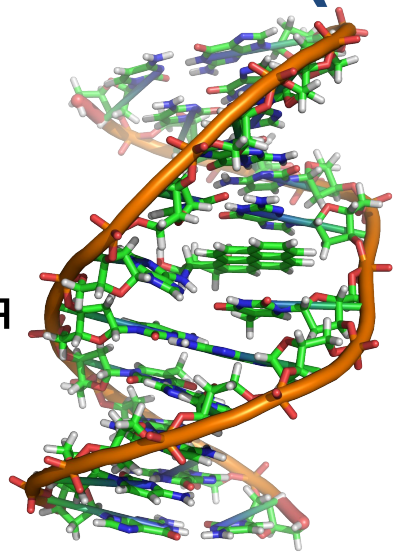
Откуда возникают большие графы?

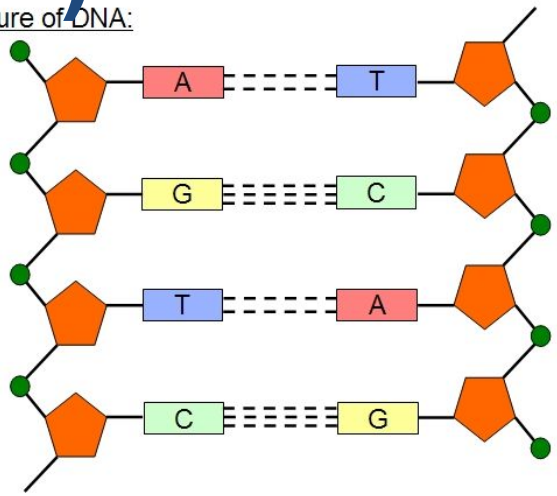
- **Интернет (WWW)**
  - На сентябрь 2016 – 47 миллиардов страниц
  - По оценке Google – более 1 триллиона
- **Социальные медиа**
  - Блогосфера: 2011 – 172 x 10^6 (+10^6/день)
  - Facebook: 2010 – 500 x 10^6, 2013 – 1:1 x 10^9 (650 x 10^6 акт. польз./день), 140 x 10^9 связей
  - LinkedIn: 2013 – 8 x 10^6, 60 x 10^6 связей
  - Twitter: 2011 – 140 x 10^6 сообщений/день
- **Транспортные сети**
- **Биоинформатика**
- **Бизнес-задачи**

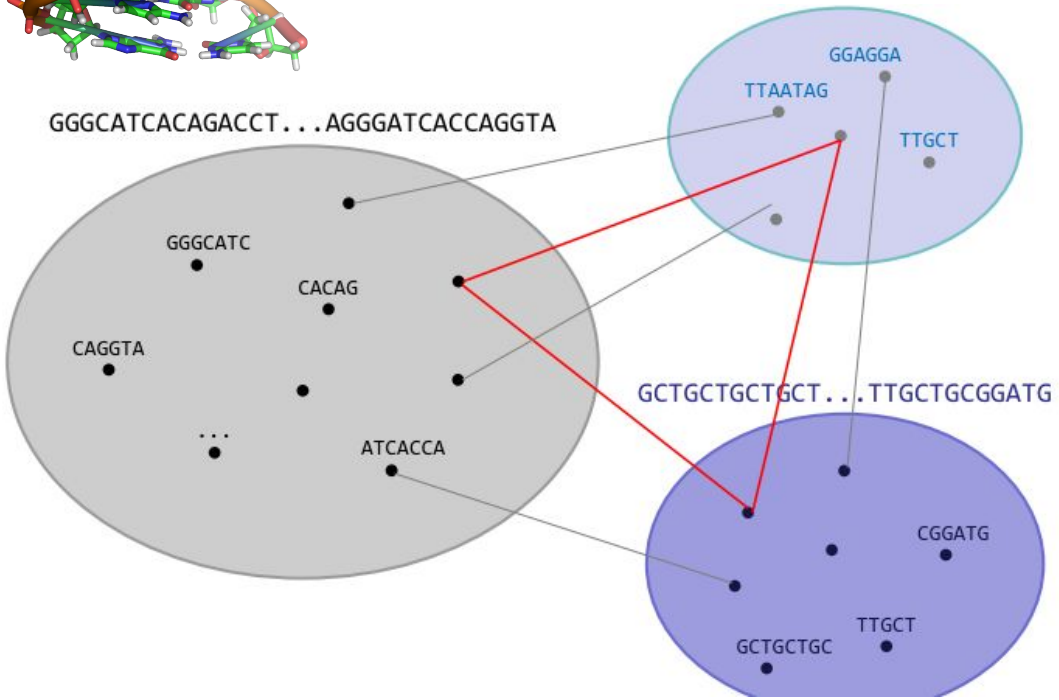
[1]http://www.worldwidewebsize.com

Биоинформатика: сходство организмов (HPC)

- Число долей 10^5
- Длина последовательности 10^9
- Вершин в доле 10^9 (берутся короткие слова)
- Всего вершин 10^{14}
- Найти слова, которые с заданной точностью встречаются во всех последовательностях, или
- Найти клику или плотный подграф (кластеризация), если ребро – характеристика сходства



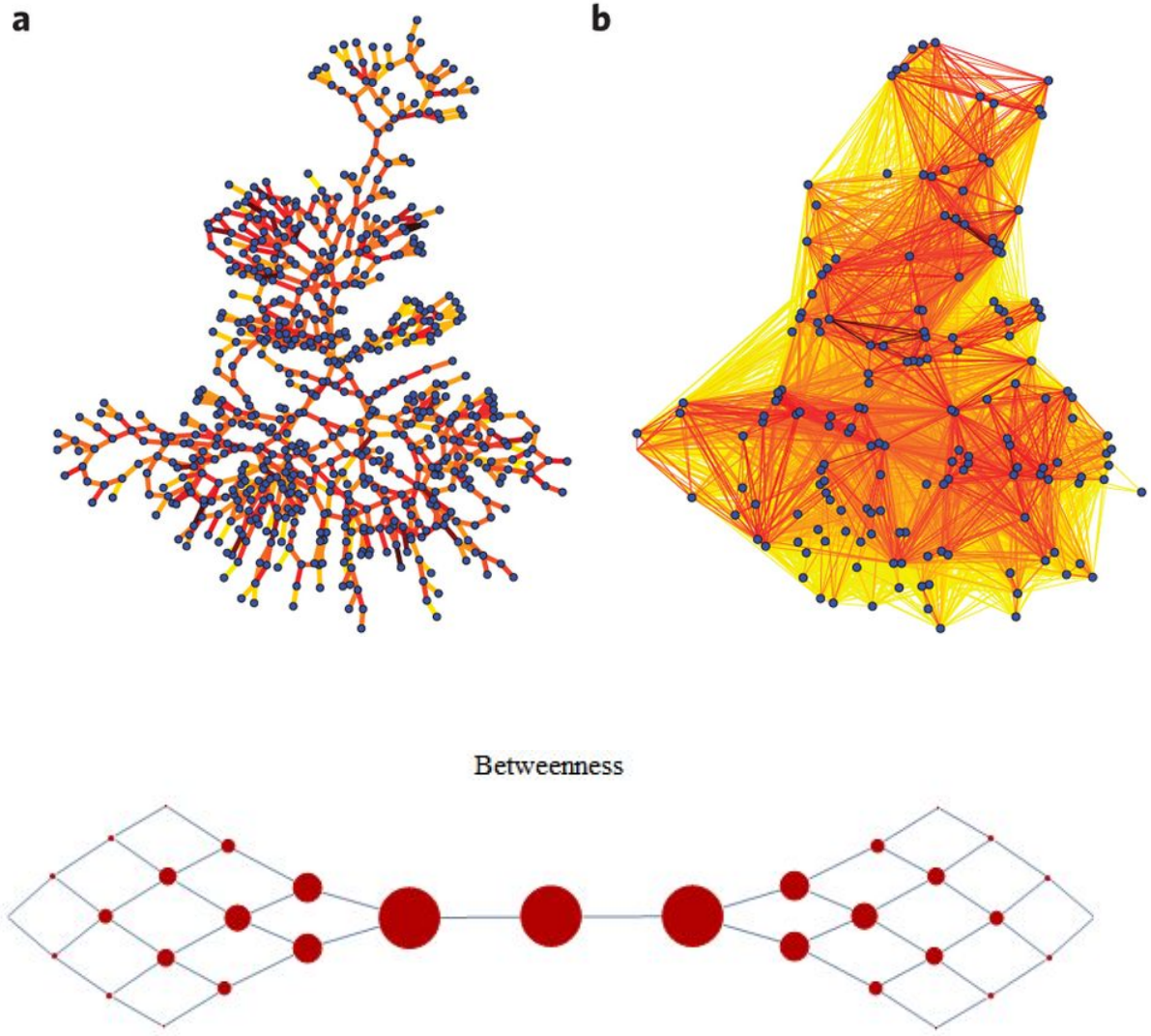




Электросети (HPC)

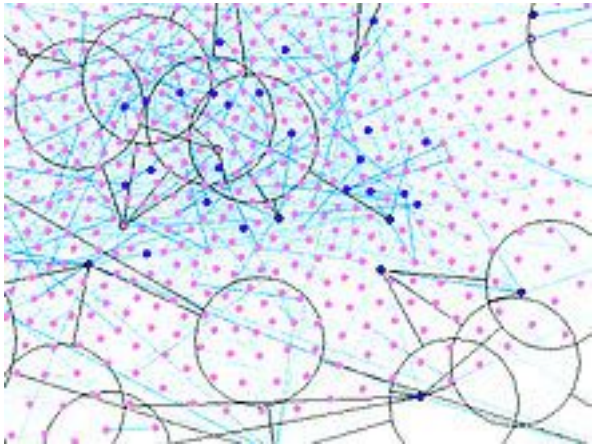
- Связанность
- Надежность

- Различные пути, betweenness centrality



Анализ социальных сетей (HPC)

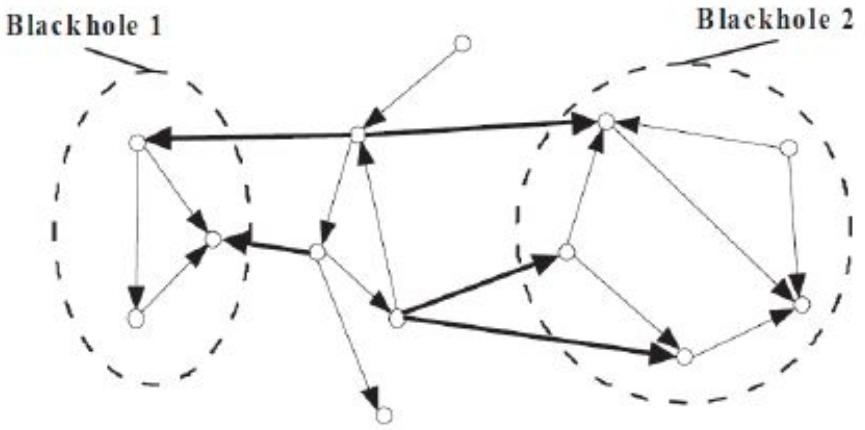
- Анализ сообществ
- Понимание намерений
- Динамика популяции
- Распространение эпидемий
- Кластеризация



Бизнес-аналитика и кибербезопасность (Big Data&HPC)

- Задачи понимания данных из огромных массивов
- Выявление аномалий в данных
- Анализ данных
- Выявление мошенничества

- Паттерн «черные дыры»
- Machine Learning!



Признаки в графах для машинного обучения

- Вершины (степень, полустепени, betweenness centrality, PageRank)
- Пары вершин (количество общих соседей, вес ребра)
- Egonet (количество треугольников, количество ребер)
- Группа вершин (плотность = кол-во ребер/кол-во вершин, общий вес ребер)

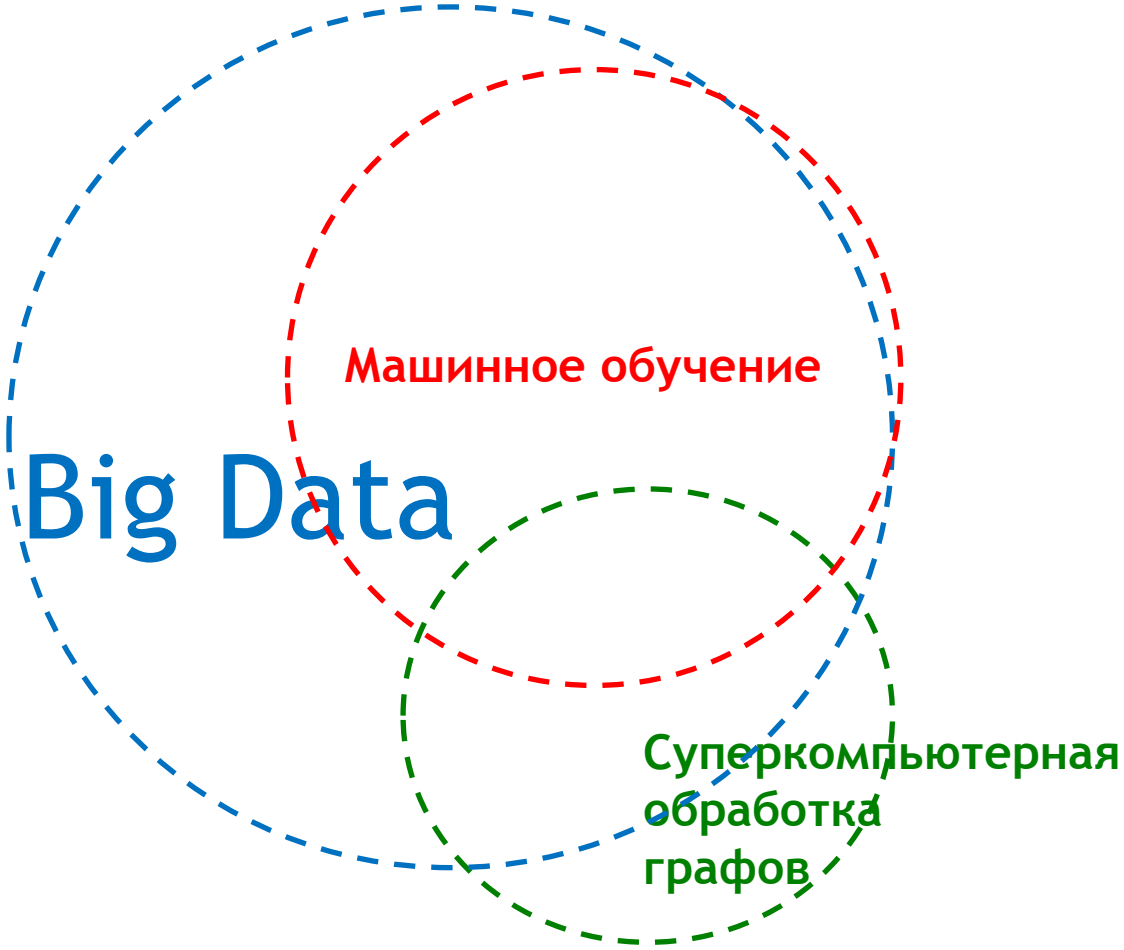
Классификация задач анализа графов

- По типу графов
  - статические графы (static graph analysis)
  - динамические графы (dynamic graph analysis)
  - обработка потоков вершин и ребер (streaming graph analysis)
- По типу обработки
  - в режиме реального времени (online)
  - в режиме выполнения заданий (offline, batch processing)

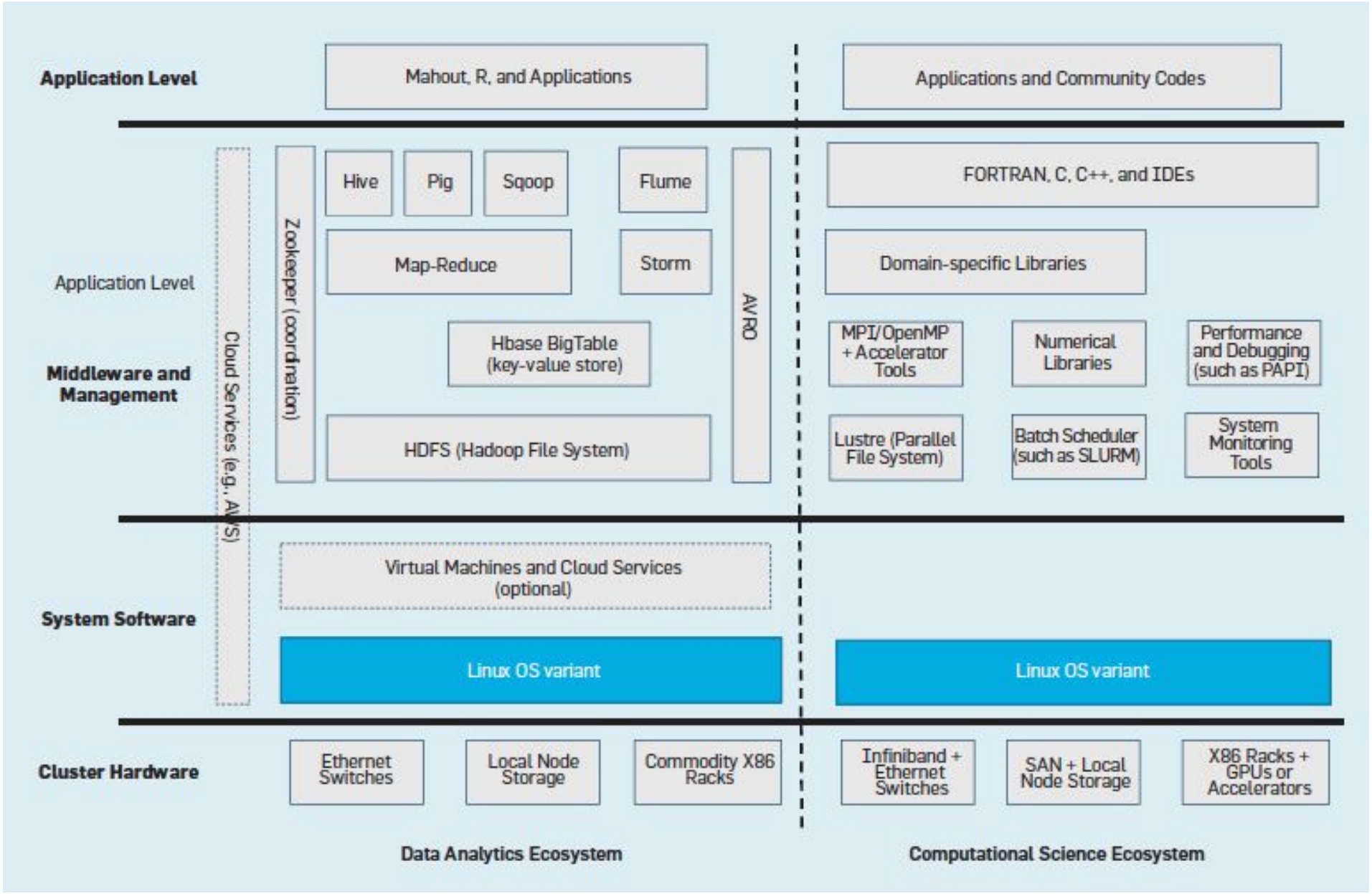
Программные модели и средства

- Реляционная модель
  - Cassandra, SAP HANA, …
- MapReduce
- Generic MR:
  - Hadoop, Yarn, Dryad, Stratosphere, Haloop
- Graph-optimized: Pegasus, Surfer, GBASE, GraphX
- Специализированные языки программирования
  - Проблемно-ориентированные языки программирования (DSL)
    - Green-Marl, Exedra
  - Языки запросов к графовым СУБД
    - SPARQL, G-SPARQL, Cypher (Neo4j), …
- BSP
  - Parallel BGL
- Vertex-centric/BSP
  - Pregel (Giraph, Hama, Mizan, …)
- Vertex-centric/Data, Message-driven
  - GraphLab, SWARM, Trinity, Charm++, …
- Fine-grained Threaded Shared Memory/PGAS
  - GraphCT, STINGER, Grappa
- Технологии параллельного программирования
  - OpenMP, MPI, CUDA, …

Big Data vs HPC



Big Data vs HPC



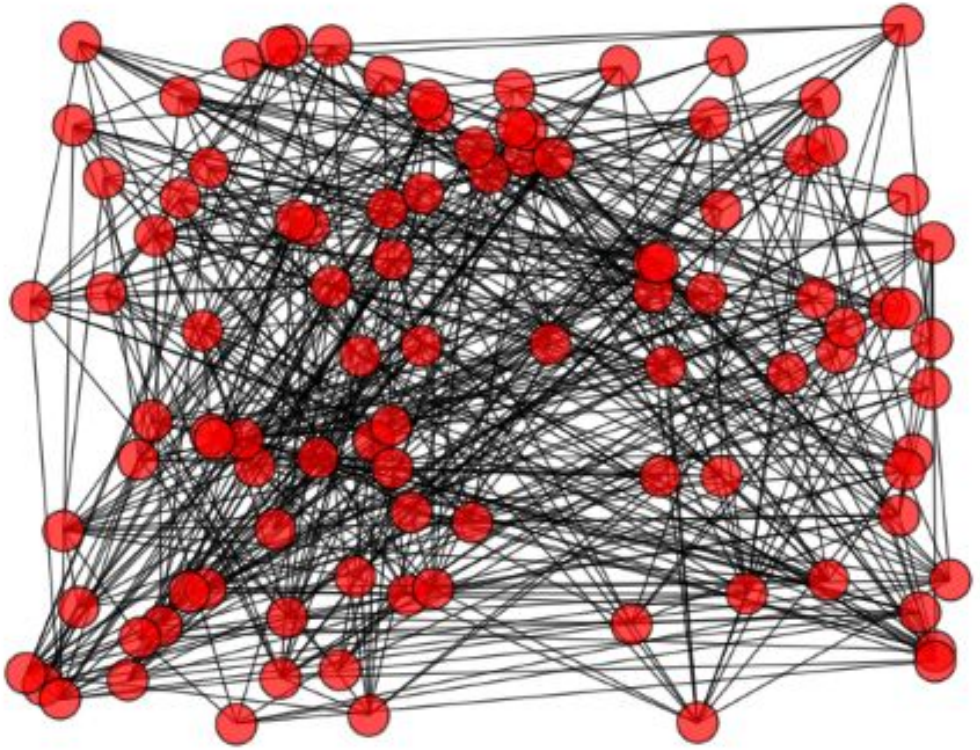
План

- Виды графов
- Основные проблемы, возникающие при решении задач обработки графов
- Подходы к решению задач в рамках одного вычислительного узла
- Подходы к решению задач в рамках распределенной вычислительной системы

Виды графов

Виды графов. Случайные графы

- Random, Random Uniform, Erdos Renyi
- N вершин, M ребер, k – средняя связность вершины



Виды графов. Степенной закон

- WWW, Социальные сети, Биоинформатика
- Графы small-world

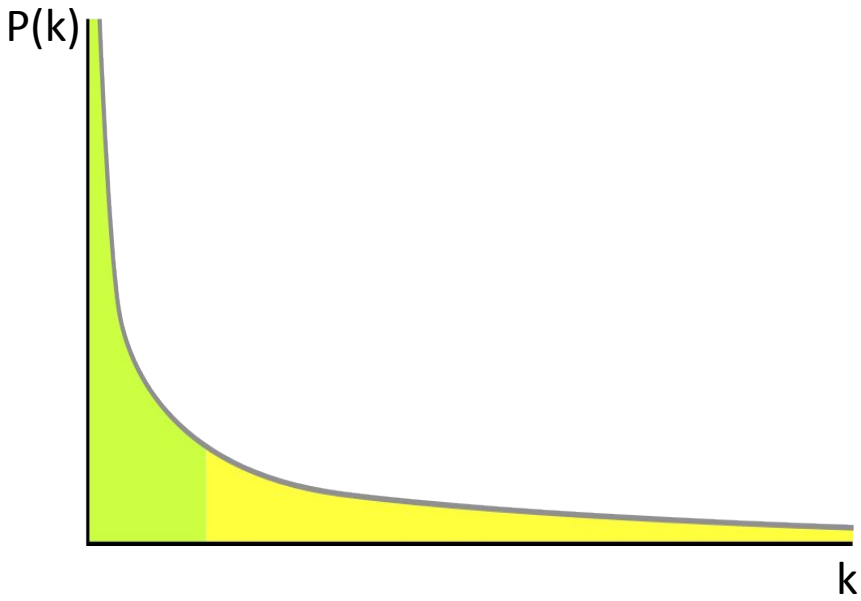
$L \sim \log N$

- scale-free – графы,

доля $P(k) \sim k^{-tau}$, $2 < tau < 3$

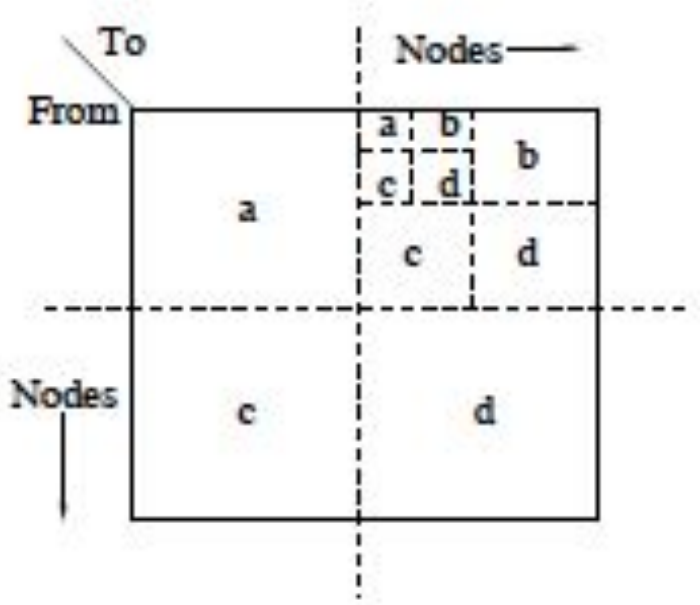
k – связность вершины

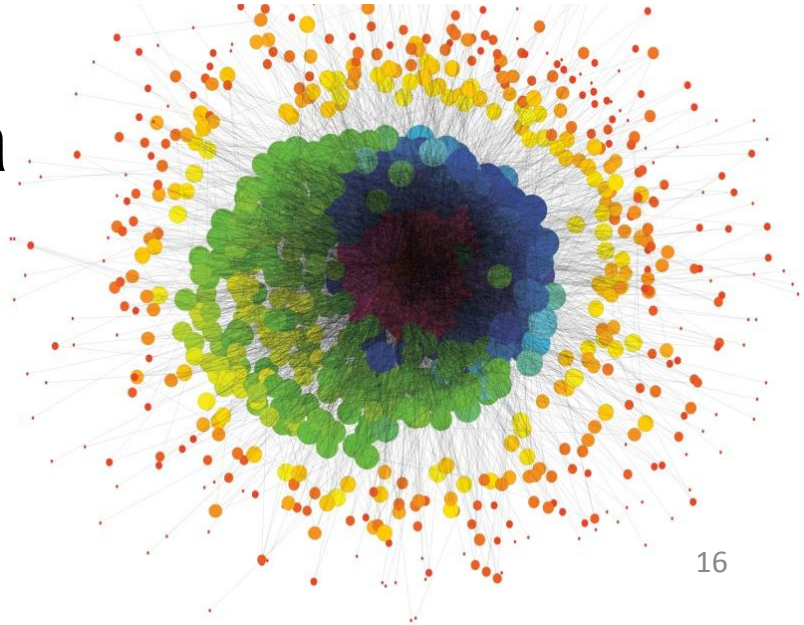
$L \sim \log \log N$



Виды графов. RMAT-граф

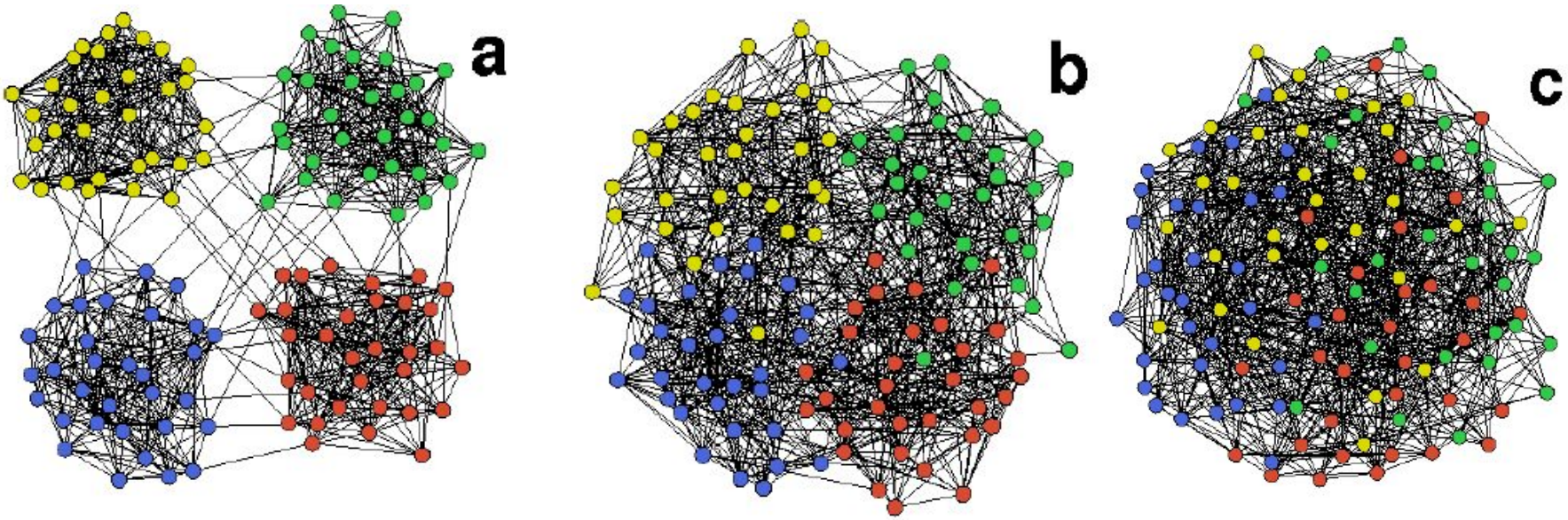
- a+b+c+d = 1
- Сообщества:
  - a и d – сообщества
  - b и c – связи между ними
  - наличие «подсообществ»
- может быть scale-free при a>=d
- случайная перестановка вершин





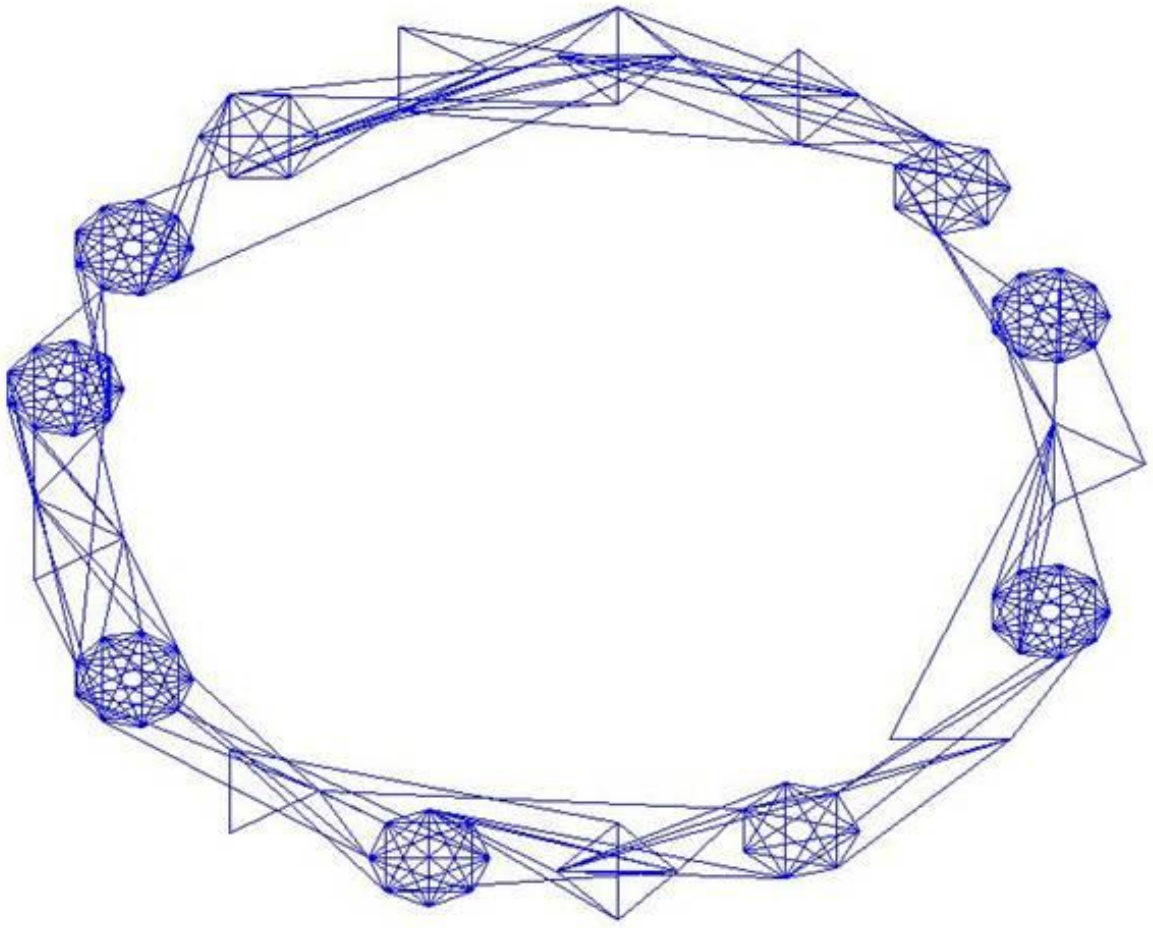
Виды графов. LFR*-граф

- **Параметры**:
  - mu ∈ [0;1], показывает количество связей вне сообщества
  - com_tau – показатель степени в законе распределения размеров сообществ
  - deg_tau – показатель степени в законе распределения степеней вершин



Виды графов. SSCA2-граф

- Равномерное распределение случайных параметров
- случайная перестановка вершин



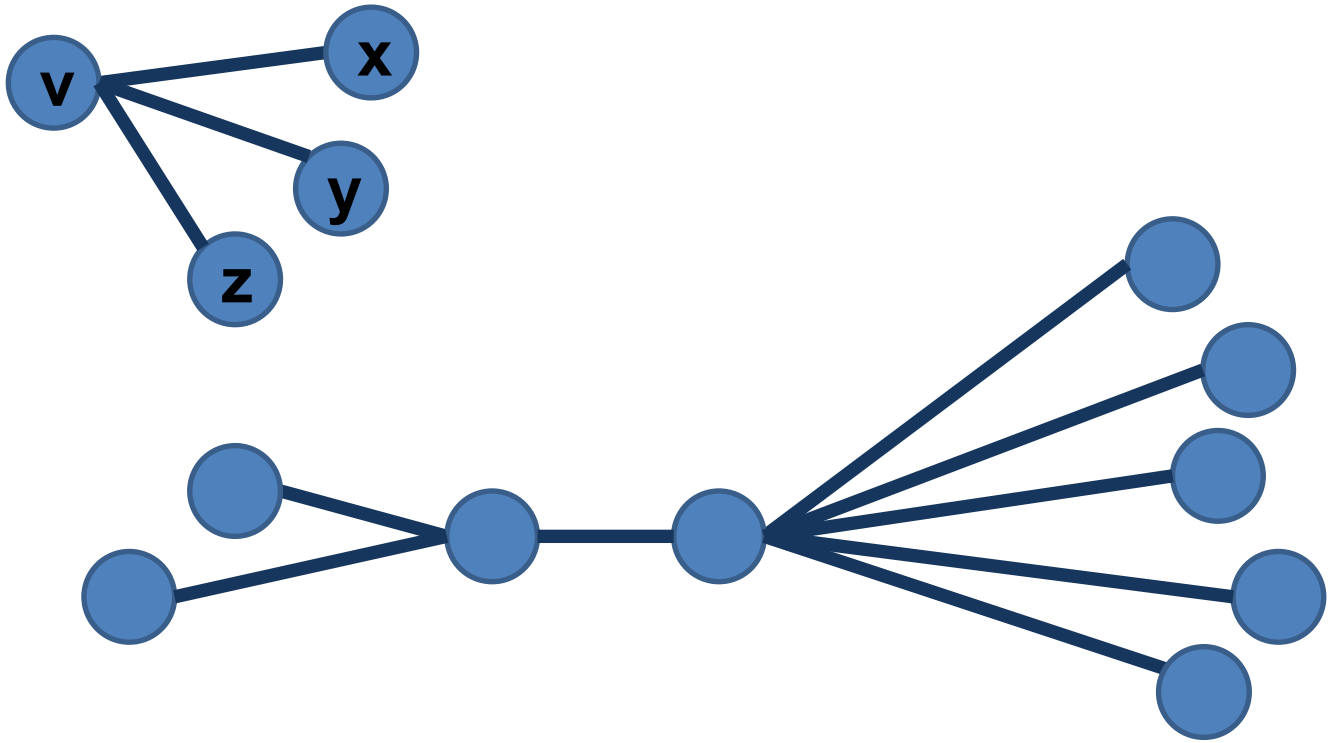
Основные проблемы, возникающие при решении задач обработки графов

Проблемы анализа больших графов

- **Data-driven computations.** Зависимость вычислений от данных (топологии графа). Невозможность применения методов статического распараллеливания вычислений.
- **Unstructured problems.** Работа с нерегулярными, неструктурированными данными, трудность распараллеливания.
- **Poor locality.** Низкая пространственно-временная локализация обращений к памяти.
- **High data access to computation ratio.** Преобладание команд доступа к памяти над командами выполнения арифметических операций.

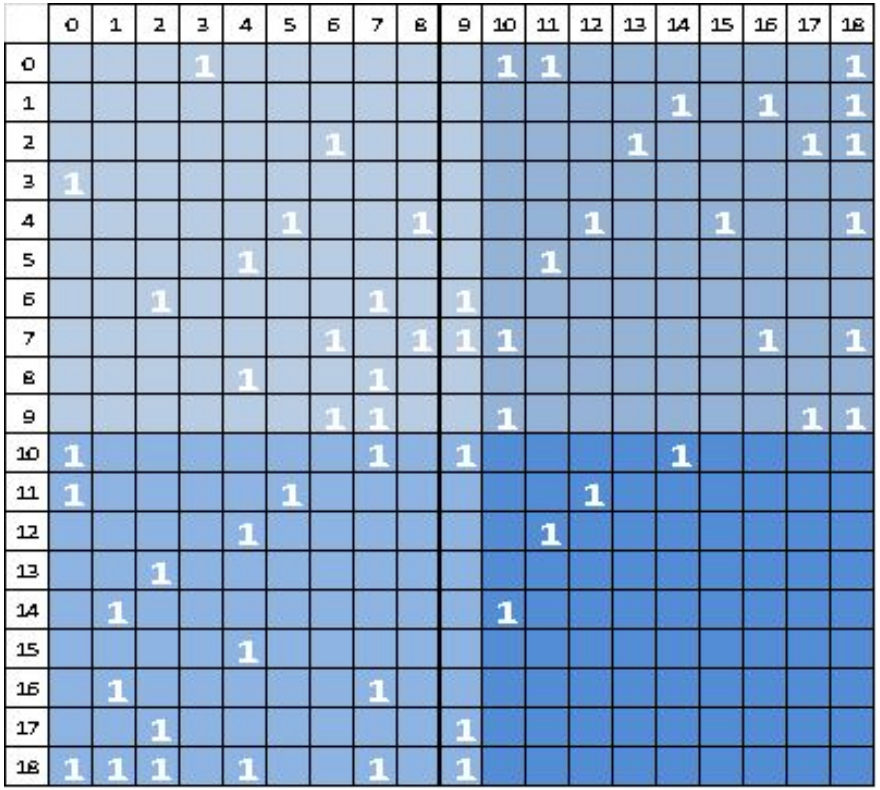
Проблемы анализа больших графов (1)

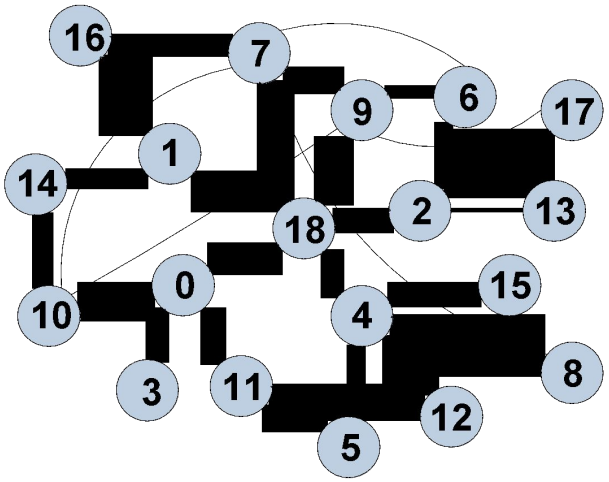
- **Data-driven computations.** Зависимость вычислений от данных (топологии графа). Невозможность применения методов статического распараллеливания вычислений.



Проблемы анализа больших графов (2)

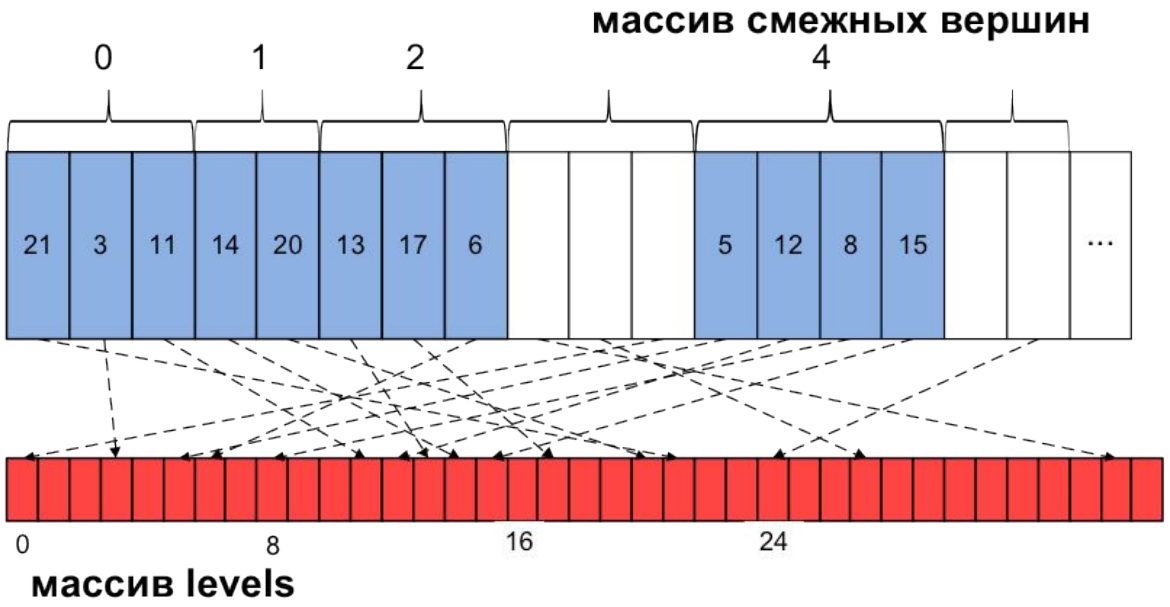
- **Unstructured problems.** Работа с нерегулярными, неструктурированными данными, трудность распараллеливания.

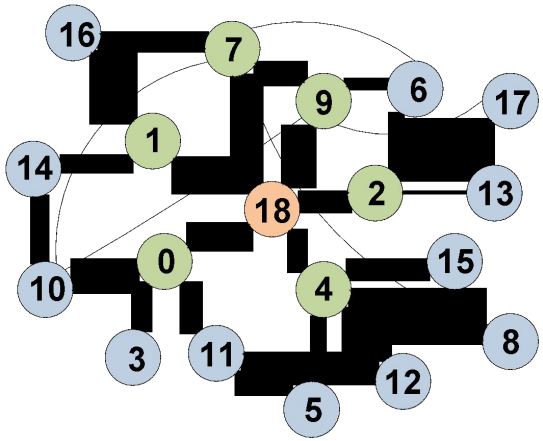




Проблемы анализа больших графов (3)

- **Poor locality.** Низкая пространственно-временная локализация обращений к памяти.





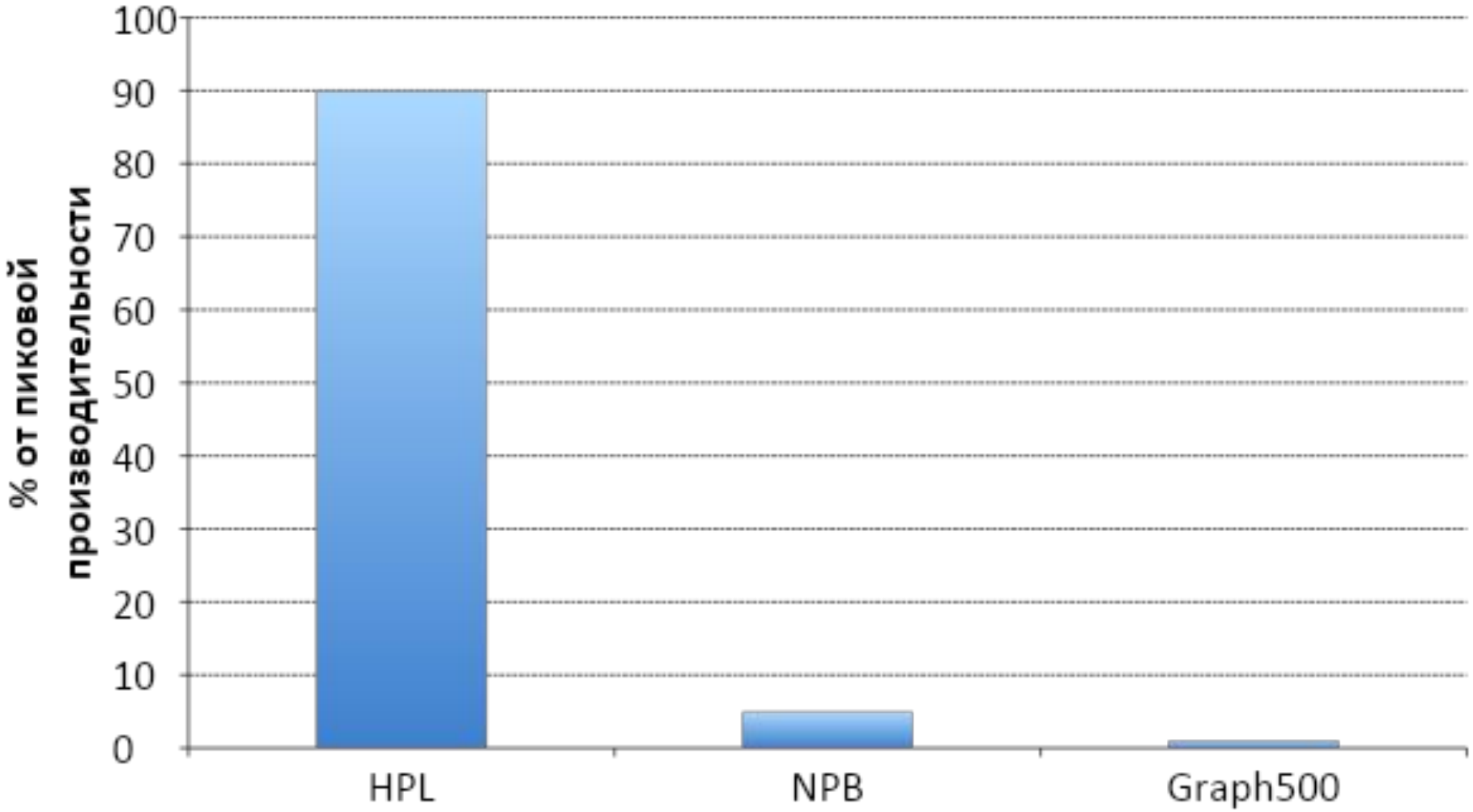
Проблемы анализа больших графов (4)

- **High data access to computation ratio.** Преобладание команд доступа к памяти над командами выполнения арифметических операций.

Intel E5-2680 v3, 2.5 ГГц

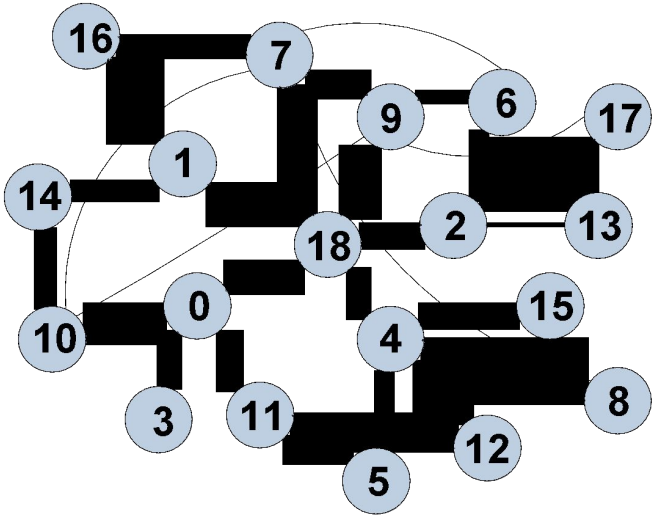
Параметр	Задержка, нс (такты)	ПС, ГБ/с
Регистр	(1)	–
Кэш L1	1.6 (4)	240
Кэш L2	4.4 (11)	160
Кэш L3	16 (40)	80
Память своего сокета	60	~55
Память чужого сокета	100	~30
Сеть Ангара	MPI – 1000 нс, SHMEM – 600 нс	

Проблема низкой реальной производительности



Проблемы и подходы к решению задач обработки графов в рамках одного вычислительного узла

Представление графа



	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
0				1							1	1							1
1															1		1		1
2							1							1				1	1
3	1																		
4						1			1				1			1			1
5					1							1							
6			1					1		1									
7							1		1	1	1						1		1
8					1			1											
9							1	1			1							1	1
10	1							1		1					1				
11	1					1							1						
12					1							1							
13			1																
14		1									1								
15					1														
16		1						1											
17			1							1									
18	1	1	1		1			1		1									

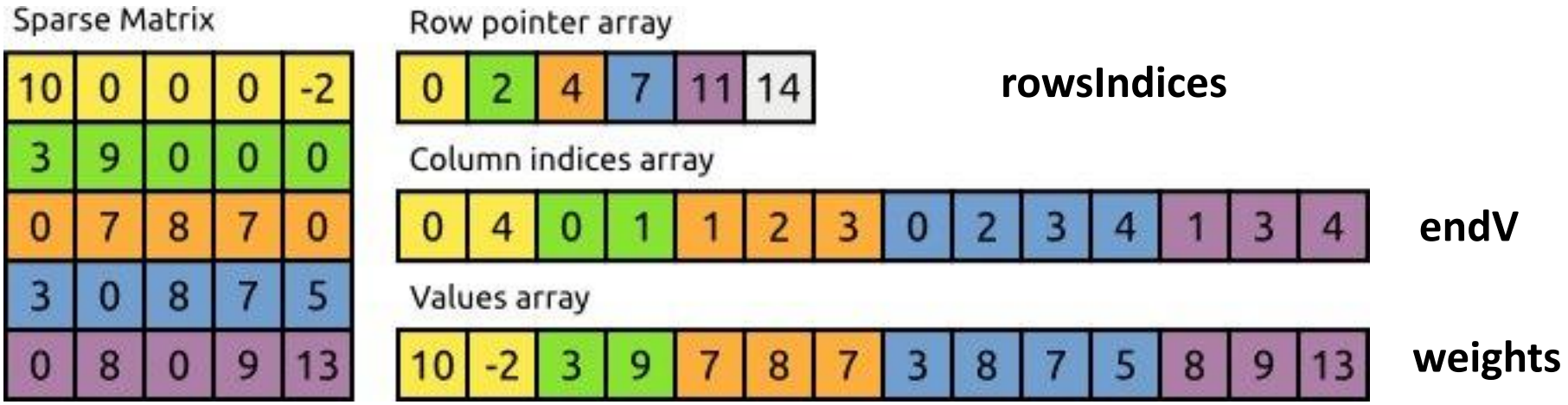
Форматы представления разреженных матриц

- **Доля ненулевых элементов мала**

Можно хранить только позиции и значения ненулевых элементов

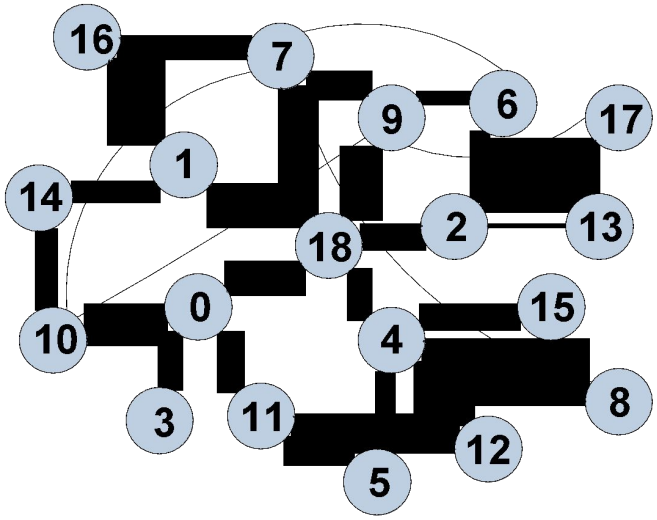
- **Compressed Row Storage (CRS)**
- **Coordinate list (COO)**
- **DIA**
- **ELLPACK**
- **SELLPACK**
- **Оптимизированный под задачу**

Внутреннее представление Compressed Row Storage (CRS)

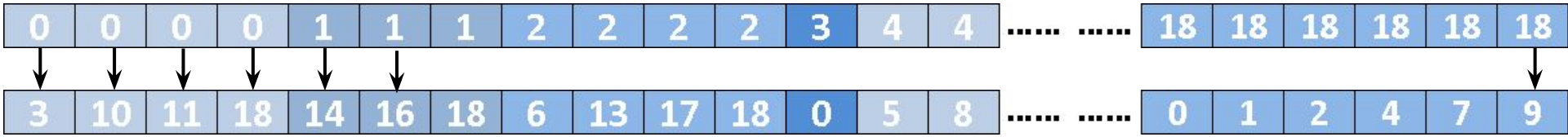



```
for (int u = 0; u < G->n; u++) {
   for (int j = G->rowsIndices[u]; j < rowsIndices[u+1];
   j++) {
    const int v = G->endV[j];
    const int w = G->weights[j];
    // обработка ребра u->v
   }
}
```

Coordinate list (COO)

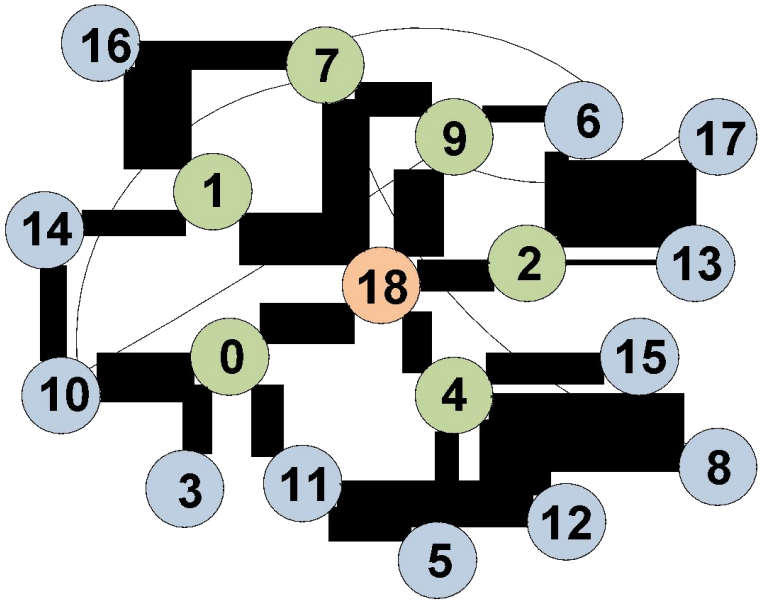


	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
0				1							1	1							1
1															1		1		1
2							1							1				1	1
3	1																		
4						1			1				1			1			1
5					1							1							
6			1					1		1									
7							1		1	1	1						1		1
8					1			1											
9							1	1			1							1	1
10	1							1		1					1				
11	1					1							1						
12					1							1							
13			1																
14		1									1								
15					1														
16		1						1											
17			1							1									
18	1	1	1		1			1		1									



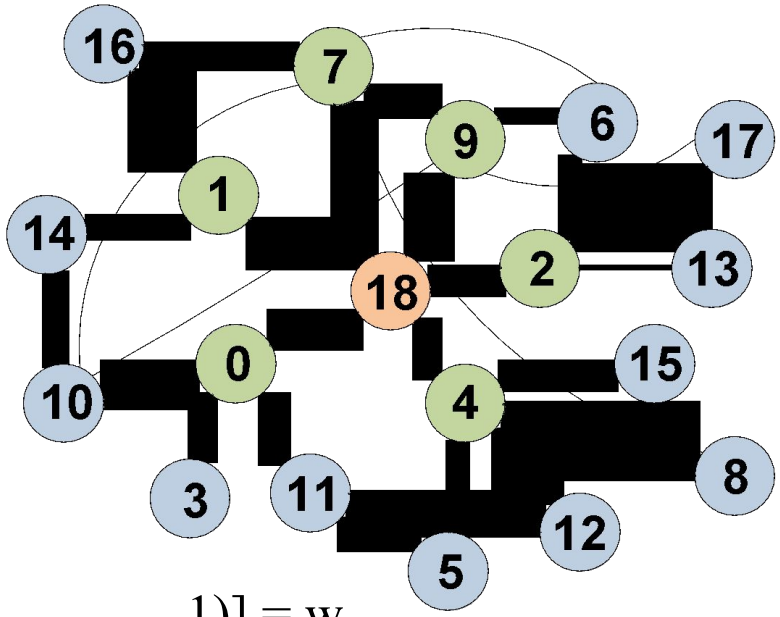
Поиск вширь в графе

```
Q = {v_start}
Visited = {v_start}
while Q ≠ {}
    Q_next = {}
    for all vertex ∈ Q do
        for all w: (vertex, w) ∈ E do
            if w ∉ Visited then
                Q_next = Q_next ∪ w
                Visited = Visited ∪ w
            endif
        end for
    end for
    Q = Q_next
end while
```

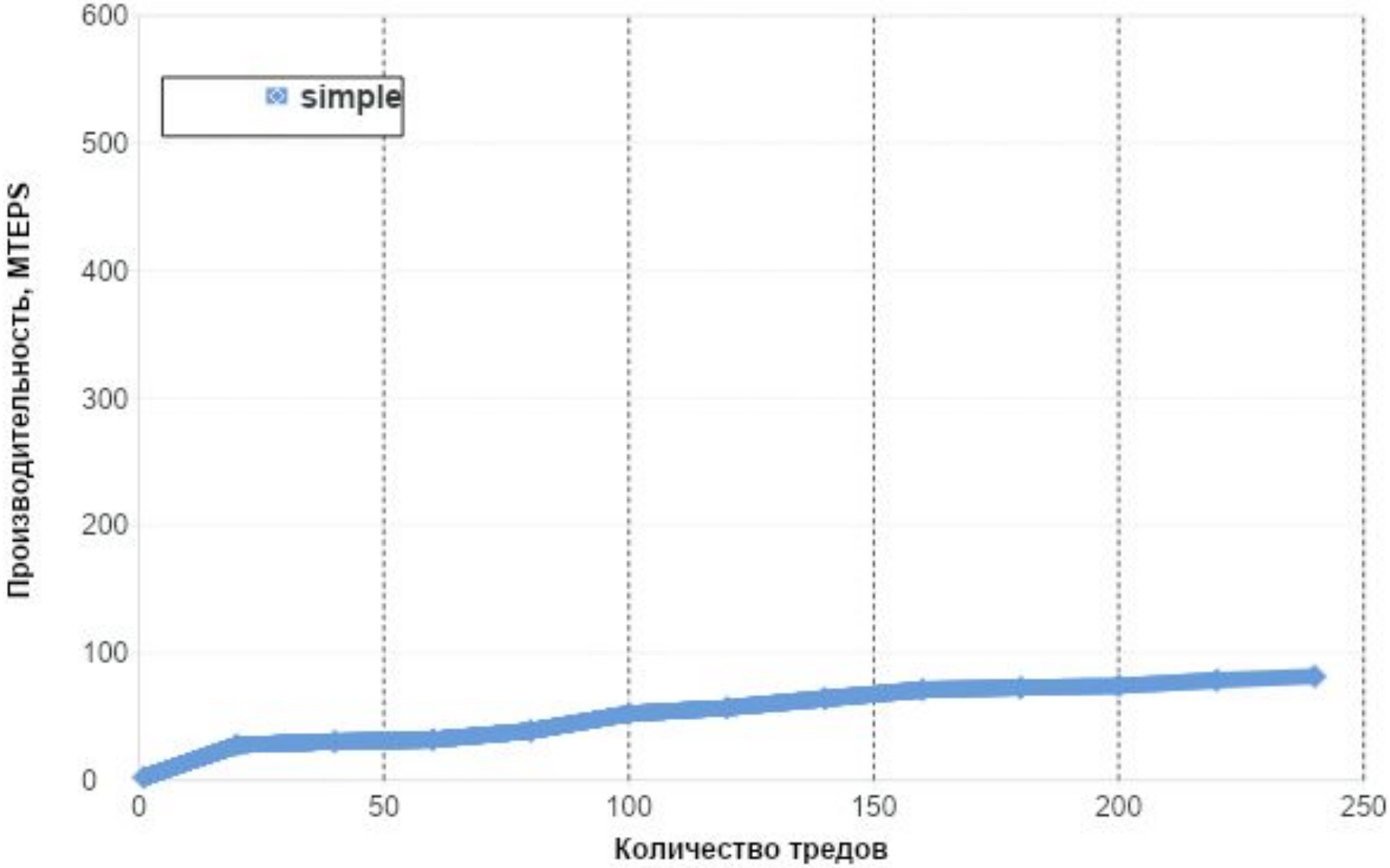


Поиск вширь в графе (BFS)
Подход Queue-based, алгоритм simple

```
Q_counter = 1
Q[0] = root
Visited[root] = 1
while Q_counter > 0
    Q_next_counter = 0
    #pragma omp parallel for
    for all vertex ∈ Q do
        for all w: (vertex, w) ∈ E do
            if Visited[w] == 0 then
                Q_next[__sync_fetch_and_add(Q_next_counter, 1)] = w
                Visited[w] = 1
            endif
        end for
    end for
    swap(Q, Q_next)  // обмен Q и Q_next
end while
```

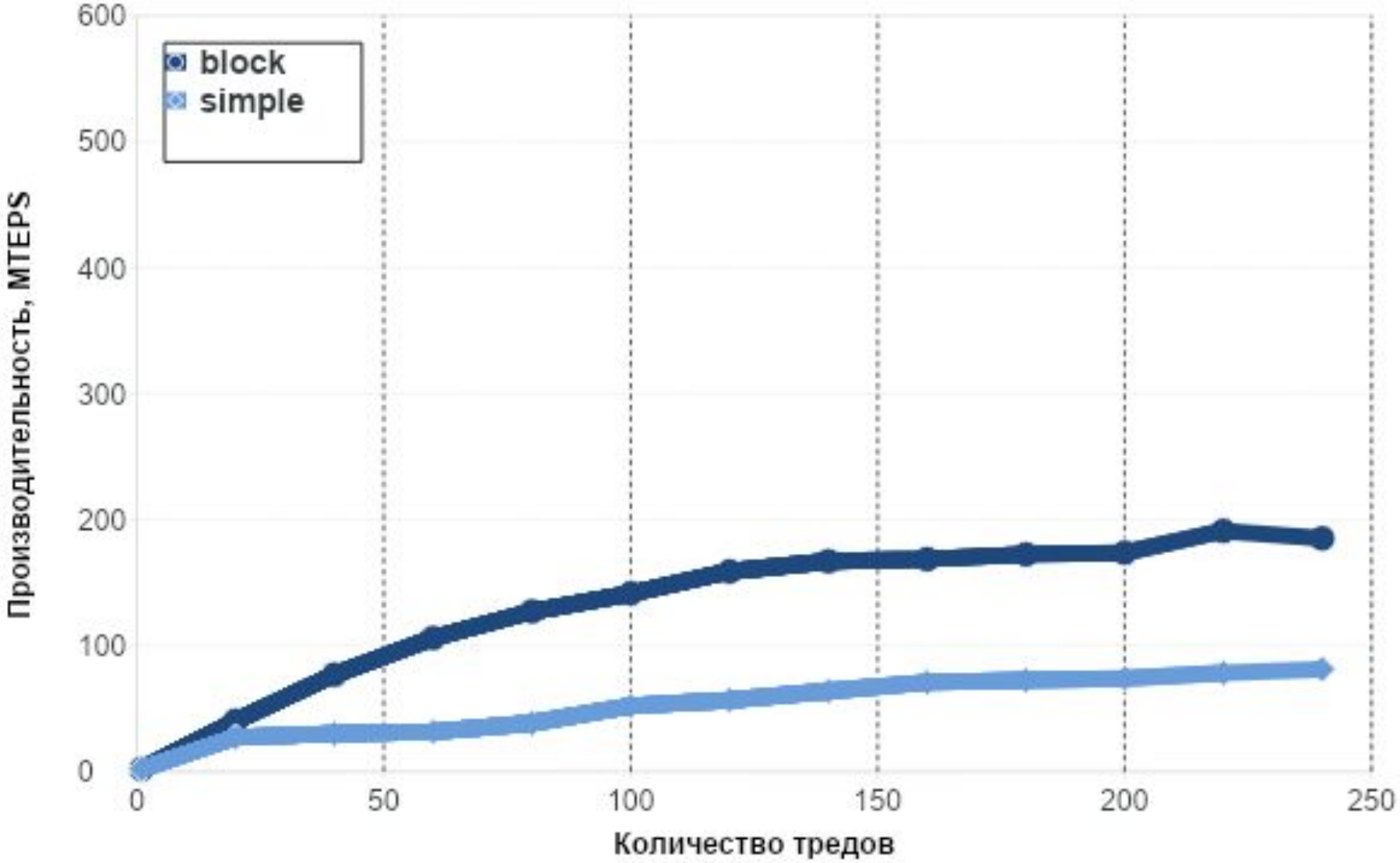


Производительность алгоритма simple в зависимости от числа используемых тредов на сопроцессоре Phi-5110P



Число вершин в графе: N = 2^{27} (134 млн), средняя связность вершины: k = 8

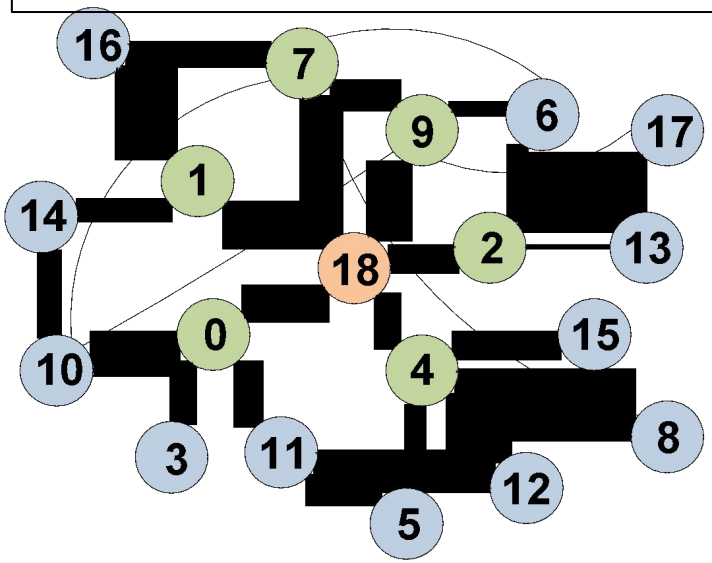
Производительность алгоритмов simple и block в зависимости от числа используемых тредов на сопроцессоре Phi-5110P

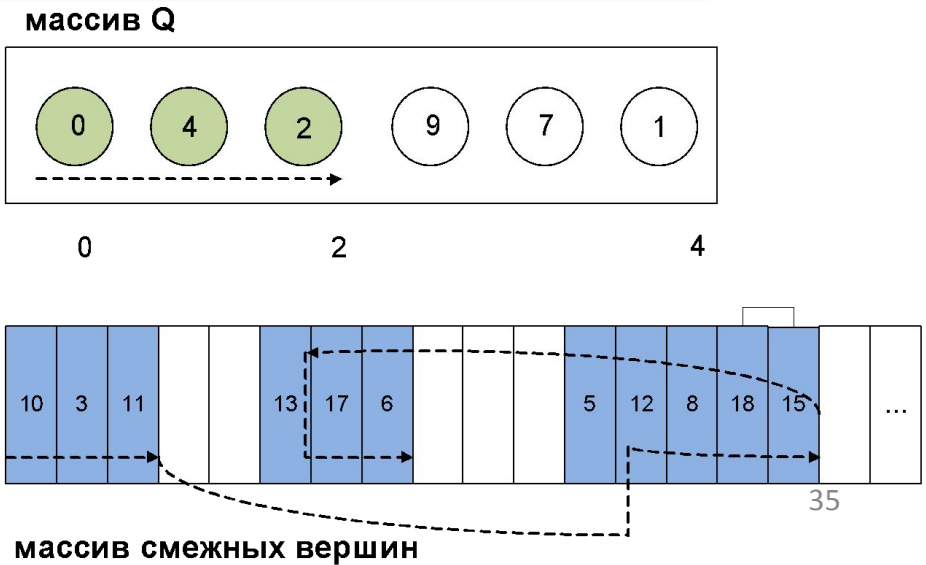


Число вершин в графе: N = 2^{27} (134 млн), средняя связность вершины: k = 8

Недостатки подхода Queue-based

```
#pragma omp parallel for
for all vertex ∈ Q do
    for all w: (vertex, w) ∈ E do
        if Visited[w] == 0 then
            Q_next[__sync_fetch_and_add(Q_next_counter, 1)] = w
            Visited[w] = 1
        endif
    end for
end for
```

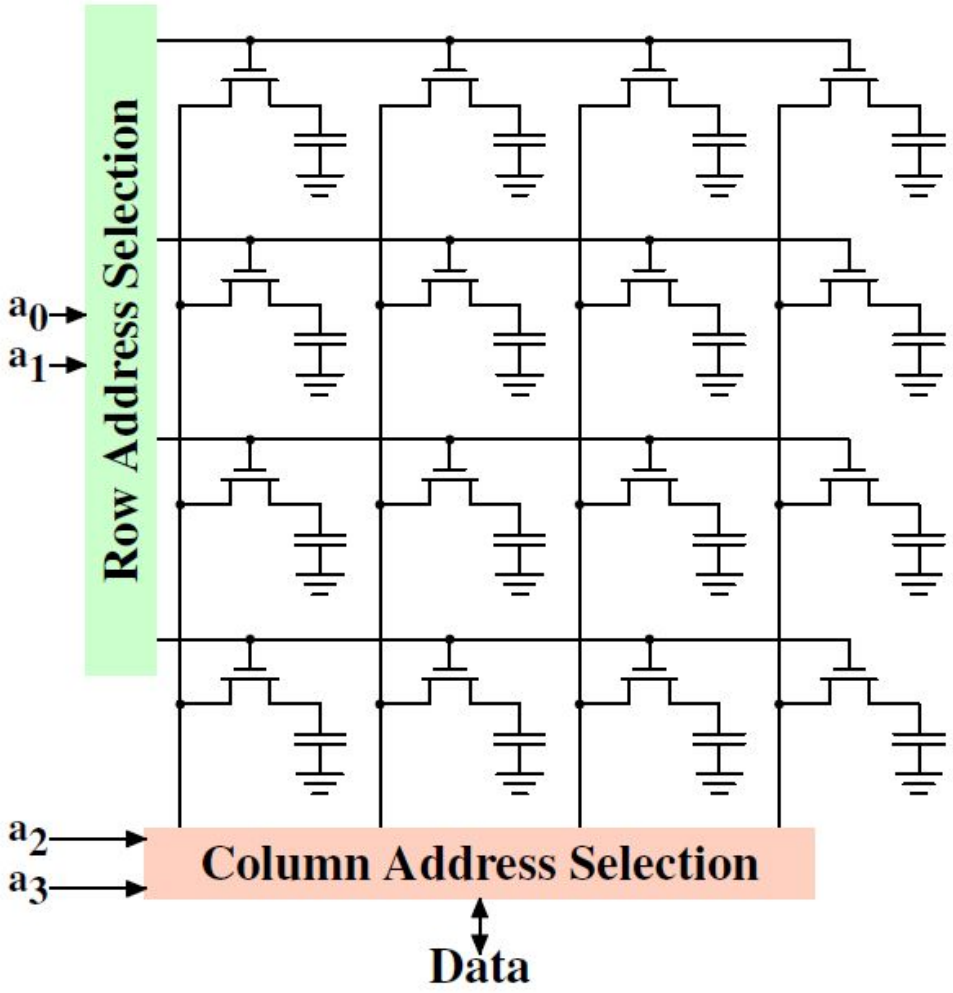




Память SDRAM

- Чтение памяти, необходимо подзаряжать конденсаторы
- Необходимость перезарядки конденсаторов (токи утечки)
- На все операции требуется время

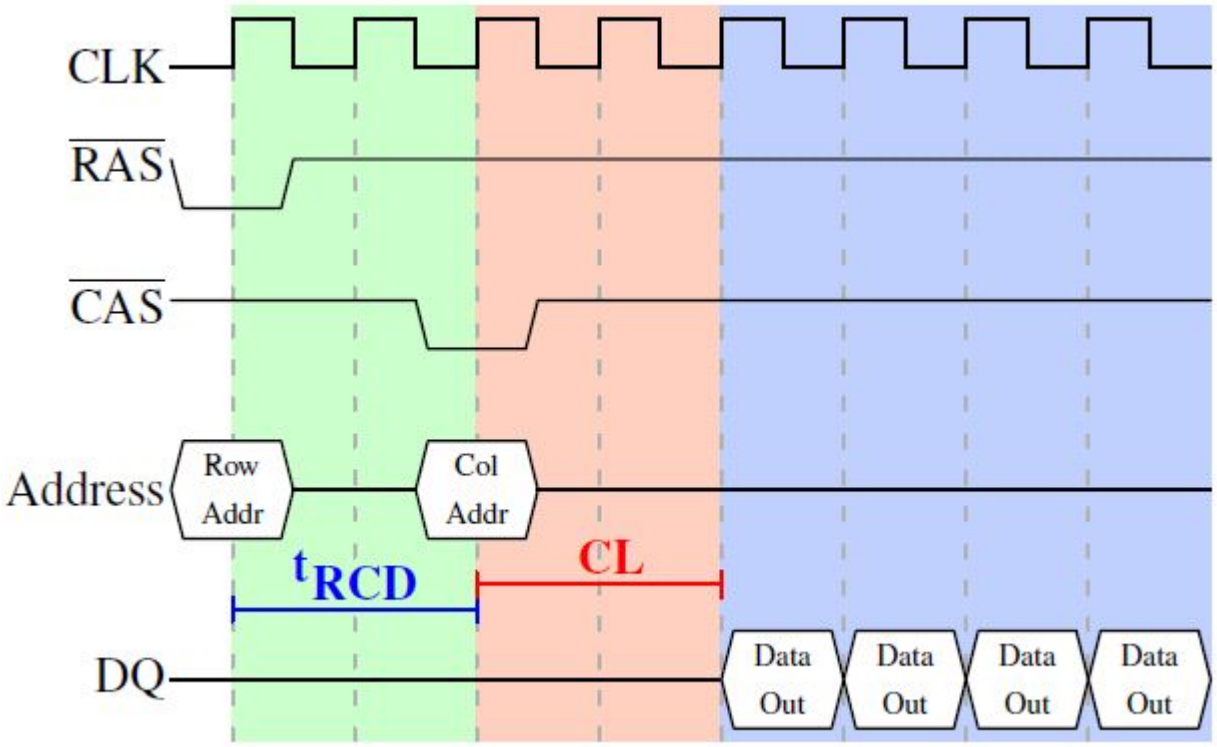
- Память организована как матрица



Drepper, U. (2007). What every programmer should know about memory. Red Hat, Inc, 11, 2007. http://rus-linux.net/lib.php?name=/MyLDP/hard/memory/memory.html

Память SDRAM

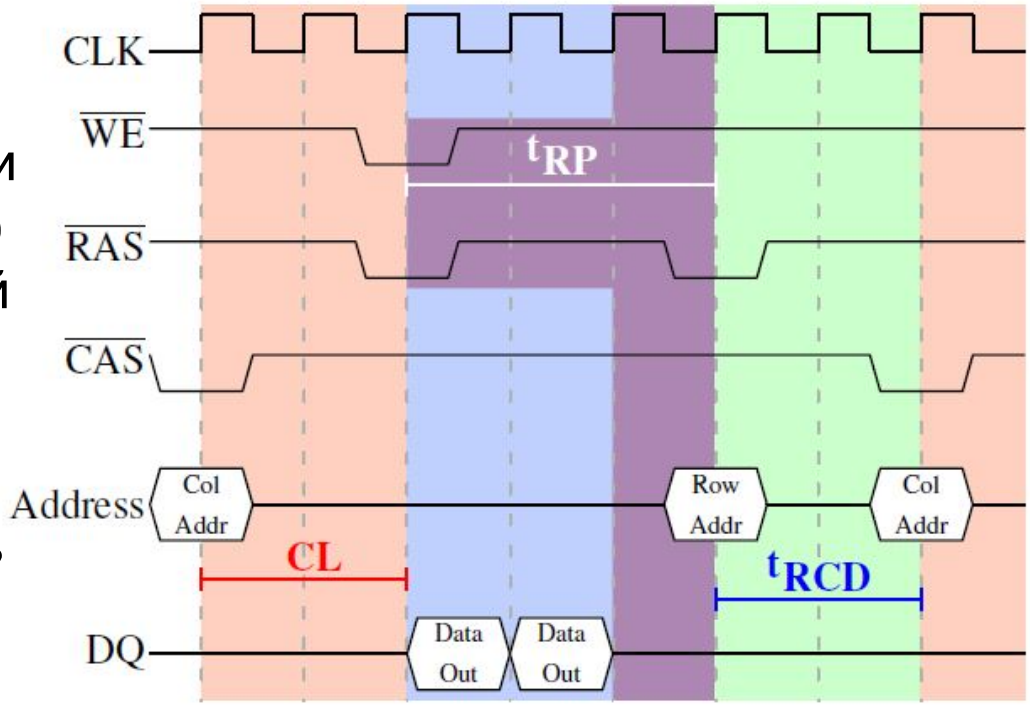
- На определение состояния и перезарядку требуется время



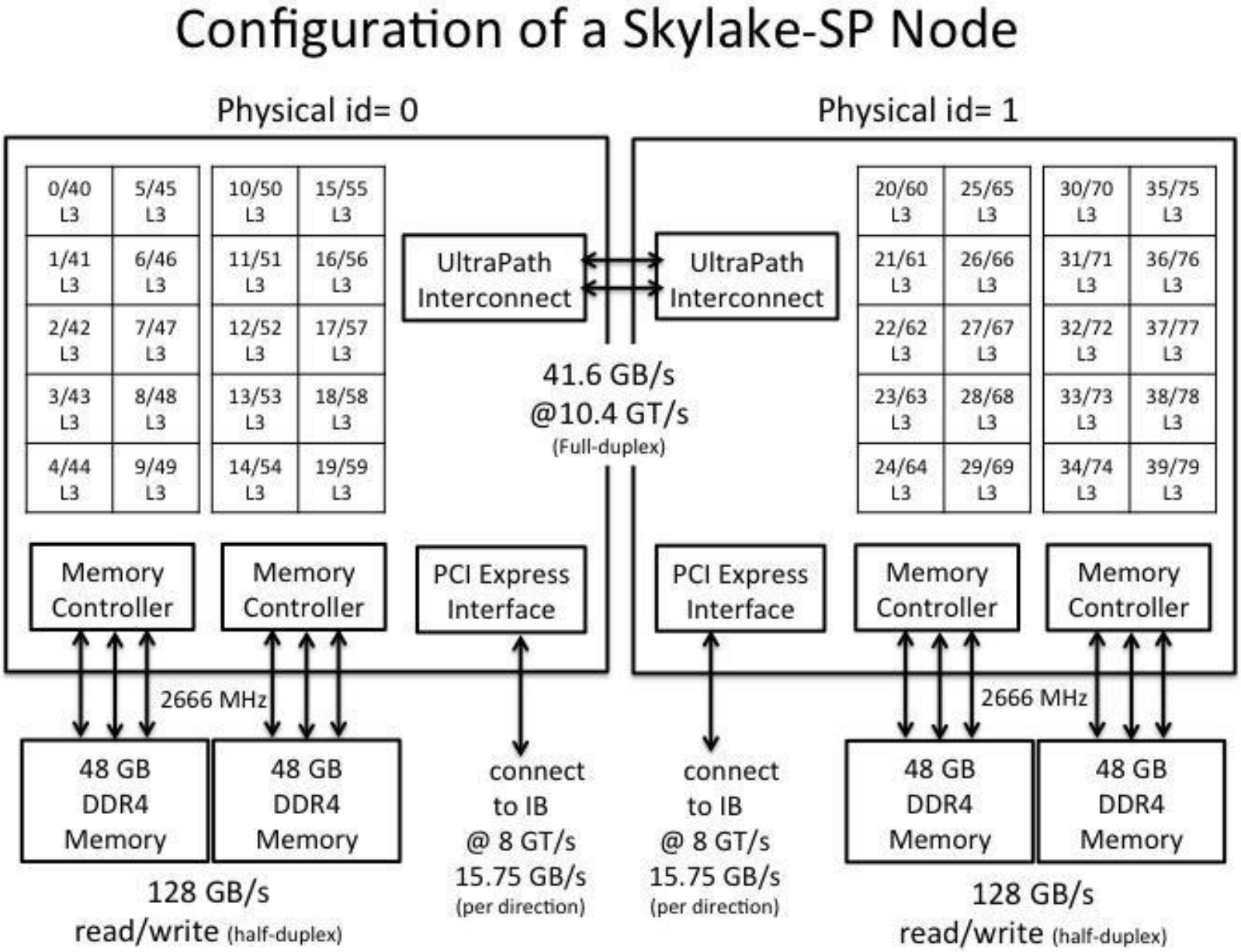
Память SDRAM

- Чтение памяти, необходимо подзаряжать конденсаторы
- Необходимость перезарядки конденсаторов (токи утечки)
- t_{RP} - время предварительной зарядки

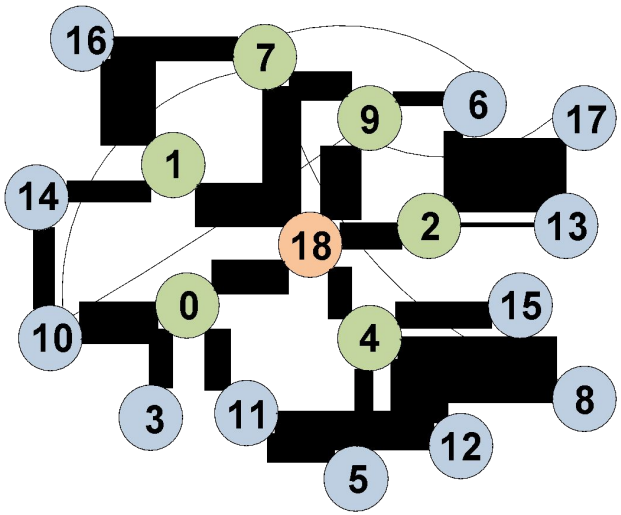
- Каждая строка должна быть перезаряжена каждые 7.8 мкс

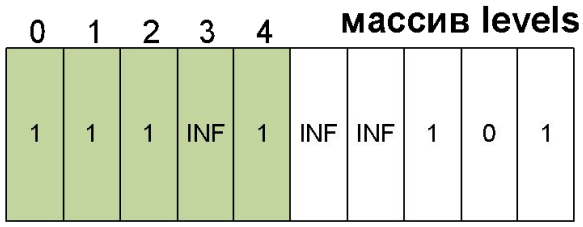


Архитектура процессора, контроллер DRAM



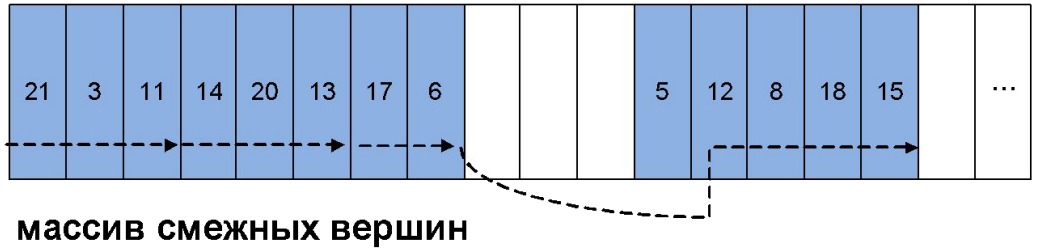
Подход Read-based, алгоритм read



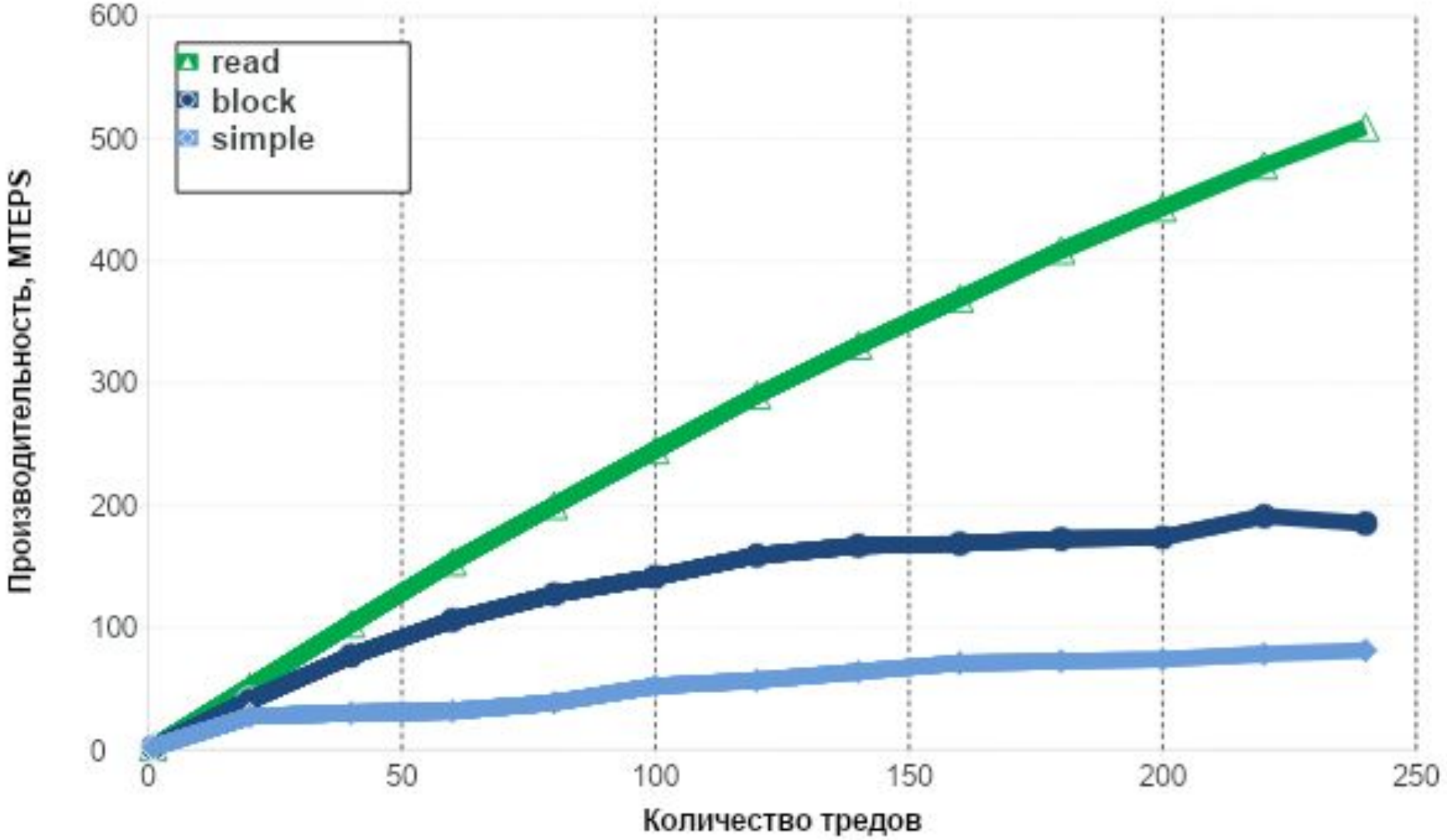


0 1 2 4

```
#pragma omp parallel for reduction (…)
for all vertex ∈ V do
    if levels[vertex] ≠ numLevel then
     continue
    for all w: (vertex, w) ∈ E  do
        if levels[w] == -1 then
            levels[w] = numLevel + 1
            nLevelVerts =  nLevelVerts + 1
        end if
    end for
end for
```

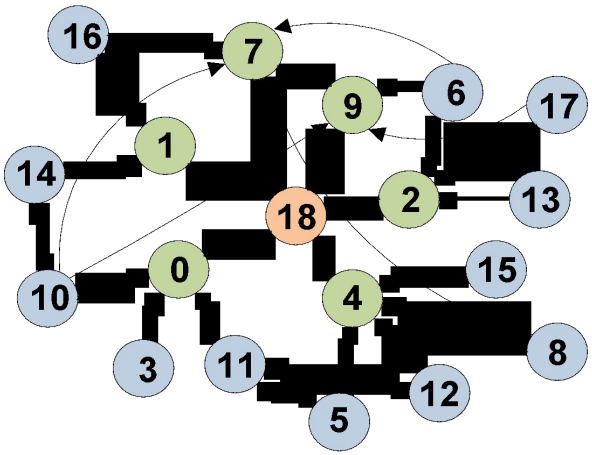


Производительность алгоритмов simple, block и read в зависимости от числа используемых тредов на сопроцессоре Phi-5110P

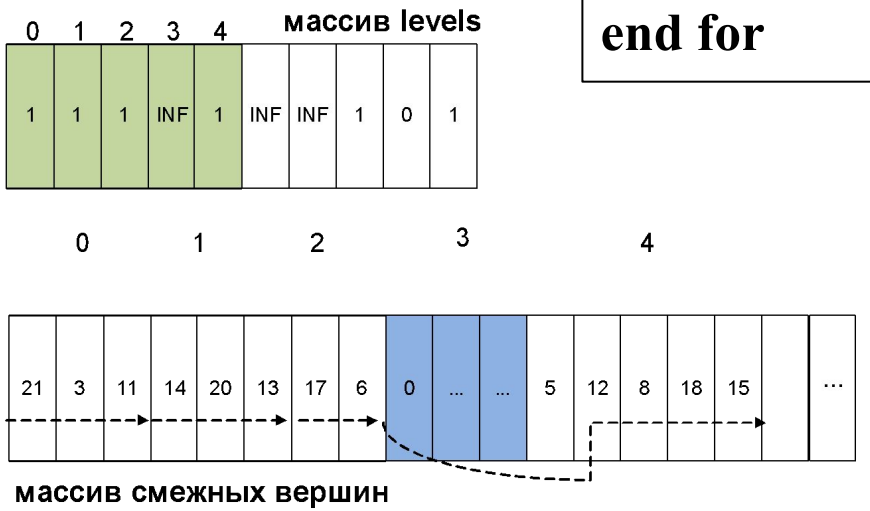


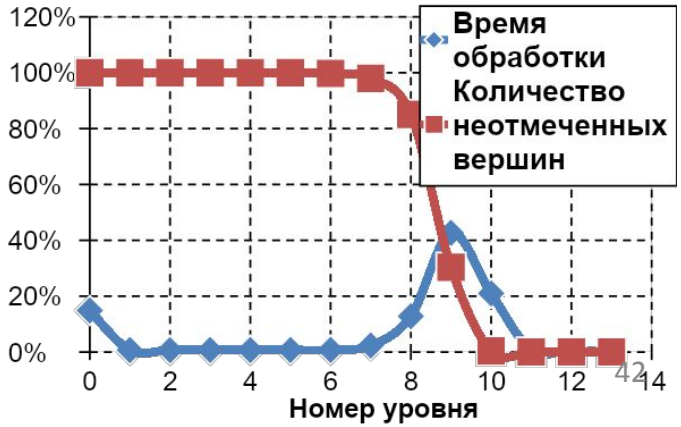
Число вершин в графе: N = 2^{27} (134 млн), средняя связность вершины: k = 8

Алгоритм bottom-up-hybrid

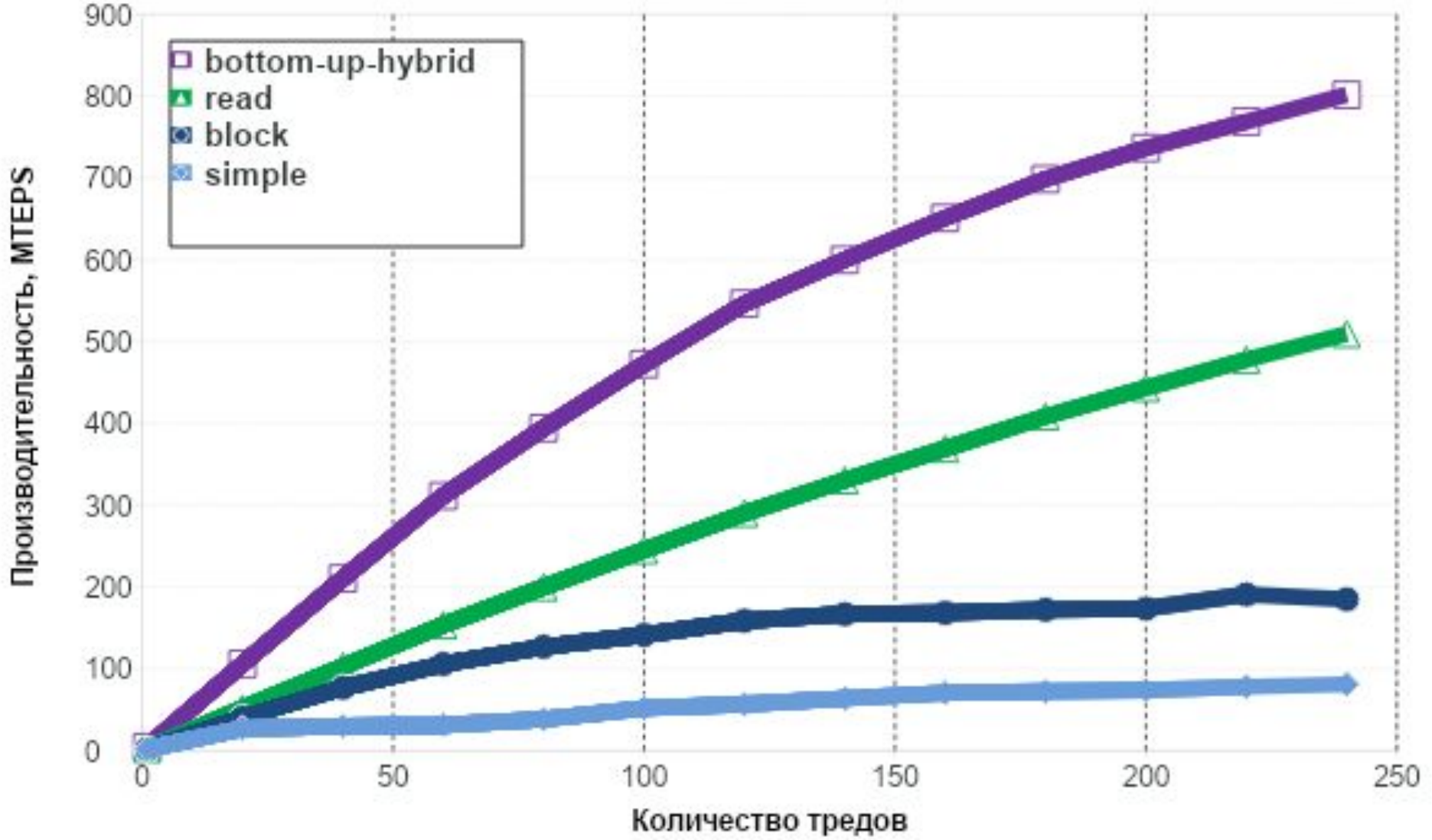



```
#pragma omp parallel for reduction (…)
for all vertex ∈ V do
        if levels[vertex] == -1 then
                for all w: (vertex, w) ∈ E  do
                        if levels[w] == numLevel then
                                levels[vertex] = numLevel + 1
                                nLevelVerts =  nLevelVerts + 1
                                break
                        end if
                end for
        end if
end for
```



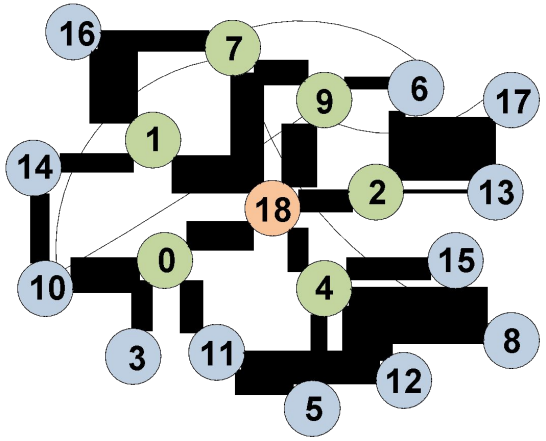


Производительность алгоритмов simple, block, read и bottom-up-hybrid в зависимости от числа используемых тредов на сопроцессоре Phi-5110P

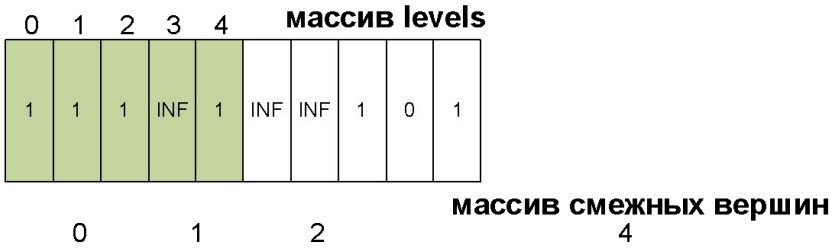


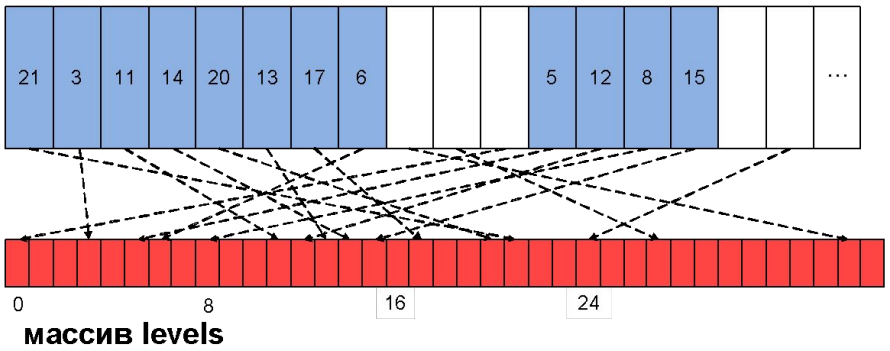
Число вершин в графе: N = 2^{27} (134 млн), средняя связность вершины: k = 8

Недостатки алгоритмов read и bottom-up-hybrid



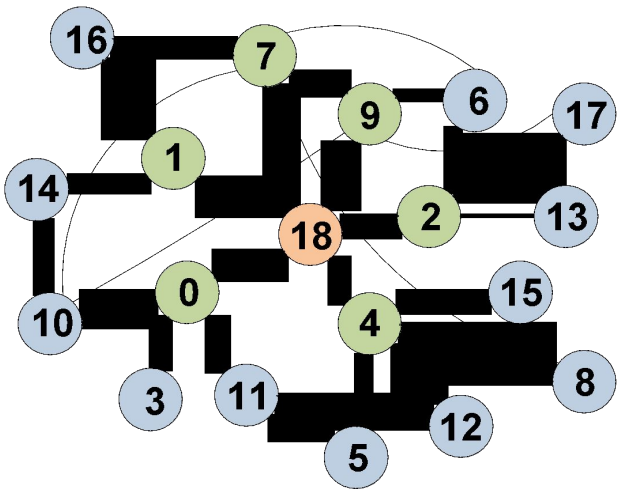

```
#pragma omp parallel for reduction
(…)
for all vertex ∈ V do
    if levels[vertex] ≠ numLevel then
        continue
    for all w: (vertex, w) ∈ E do
        if levels[w] == -1 then
            levels[w] = numLevel + 1
        …
        end if
    end for
end for
```

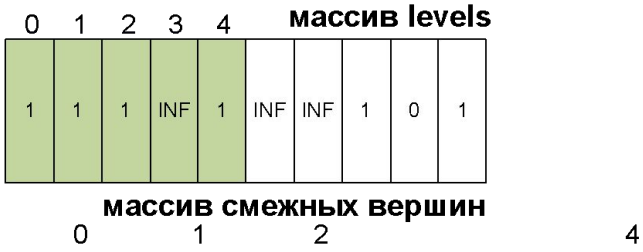




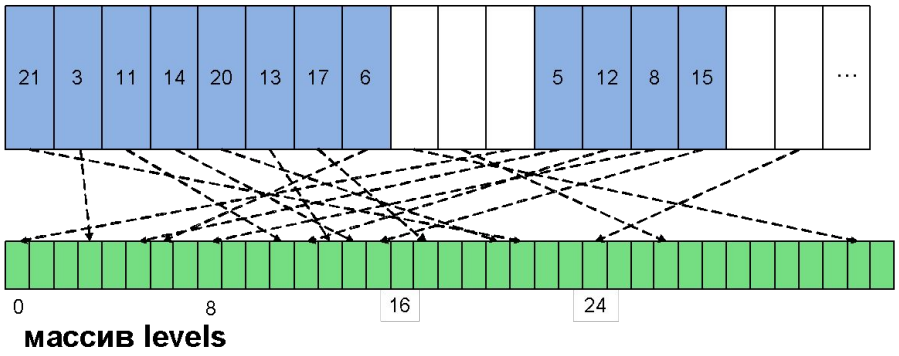
	SB	Phi-511 0P
Частота, ГГц	2.2	1.05
Задержка обращения в память (такты)	~150	~300

Решение: ручная развертка цикла + использование prefetch



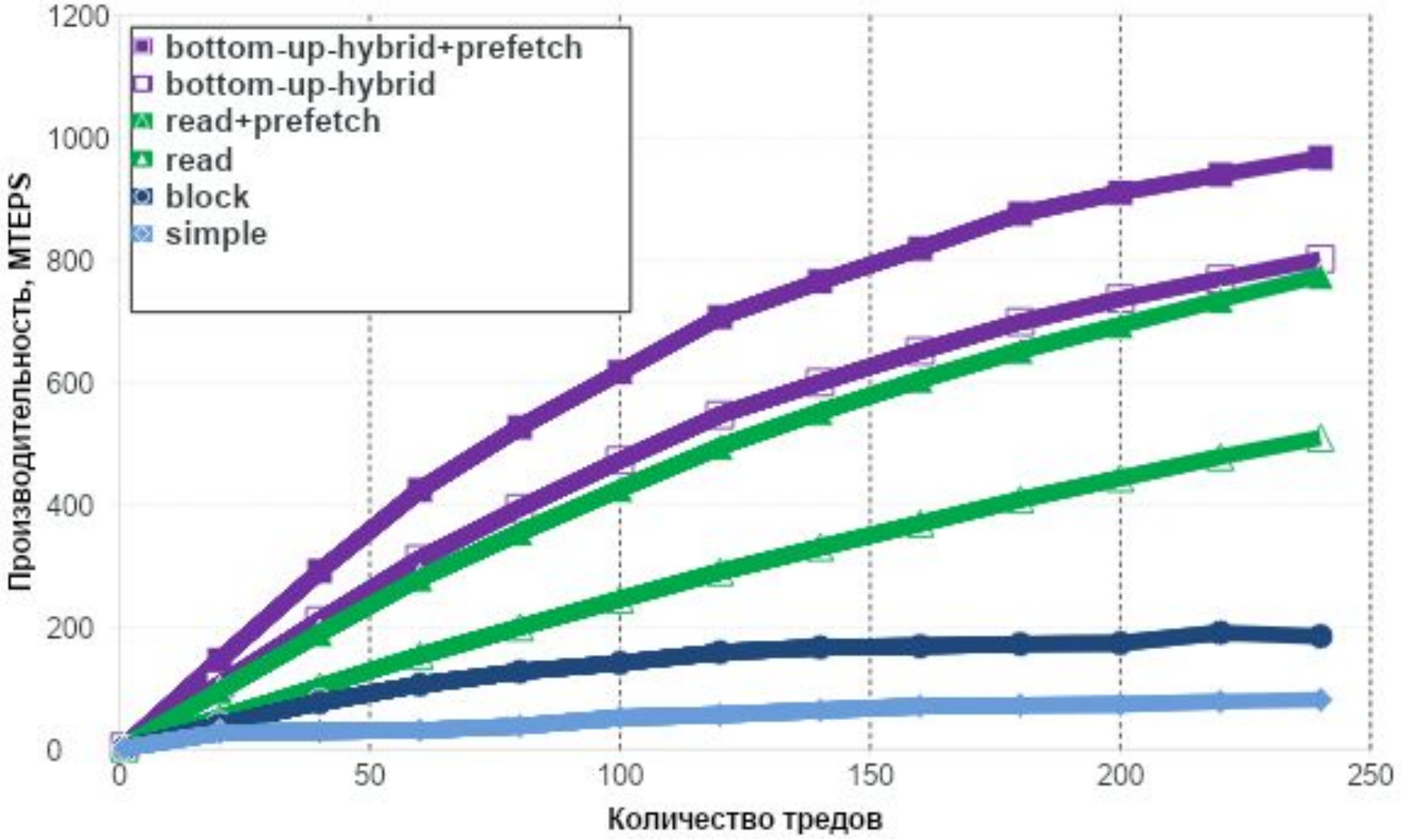



```
#pragma omp parallel for reduction (…)
for all vertex ∈ V do
    if levels[vertex] ≠ numLevel then continue
    for all w: (vertex, w) ∈ E  do
        prefetch(levels[w])
        …
        if levels[w] == -1 then
            levels[w] = numLevel + 1
        …
        end if
    end for
end for
```



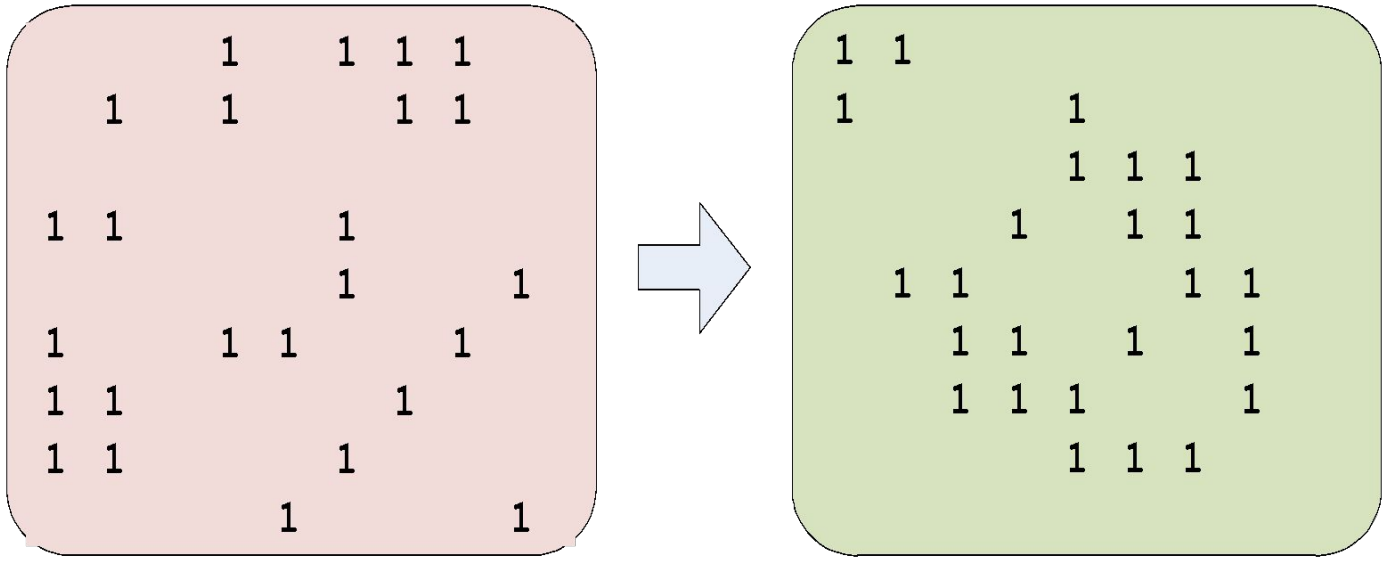
		Phi-5110P
Пиковая ПС памяти, ГБ/с	51	352
ПС чтения из памяти, ГБ/с; Последовательный / случайный доступ	42 / 3.3	183 / 3.8
Задержка, тактов	200	300

Производительность алгоритмов simple, block, read и bottom-up-hybrid с префетчем в зависимости от числа используемых тредов на сопроцессоре Phi-5110P



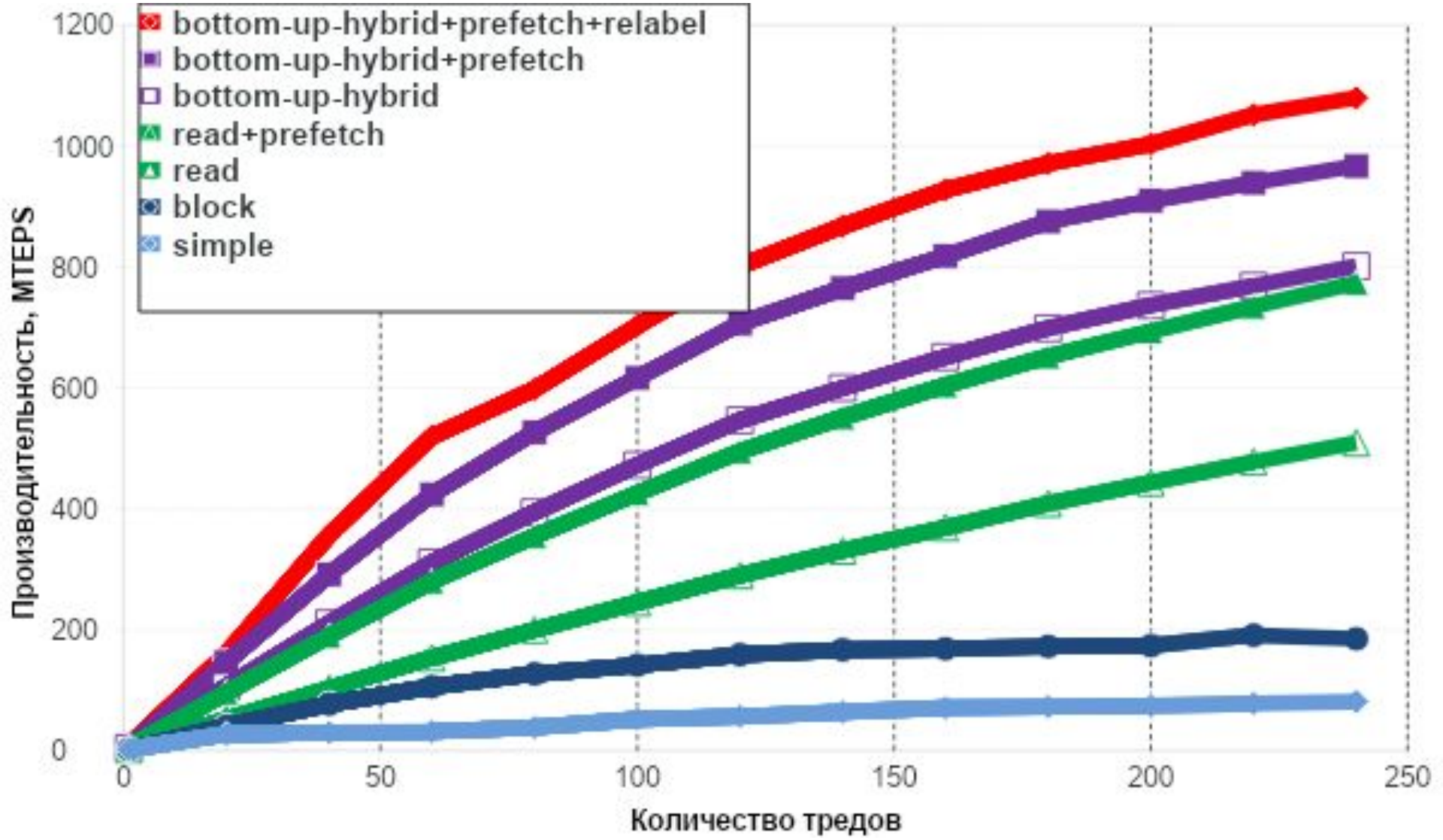
Число вершин в графе: N = 2^{27} (134 млн), средняя связность вершины: k = 8

Улучшение локализации: перестановка вершин



- Матрица смежности приводится к ленточному виду с уменьшением ширины ленты (алгоритм Reverse Cuthill-McKee) => уменьшается количество кэш-промахов
- Списки смежных вершин сортируются => уменьшается количество промахов в TLB
- Использование больших страниц

Производительность различных алгоритмов, с префетчем и перестановками в зависимости от числа используемых тредов на сопроцессоре Phi-5110P

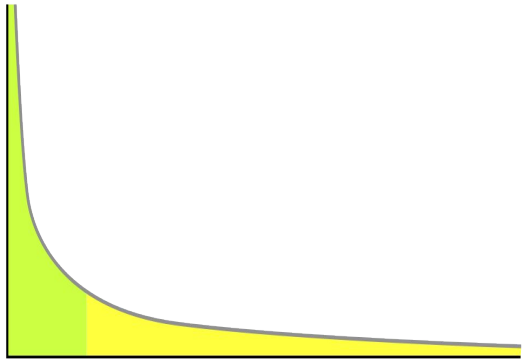


Число вершин в графе: N = 2^{27} (134 млн), средняя связность вершины: k = 8

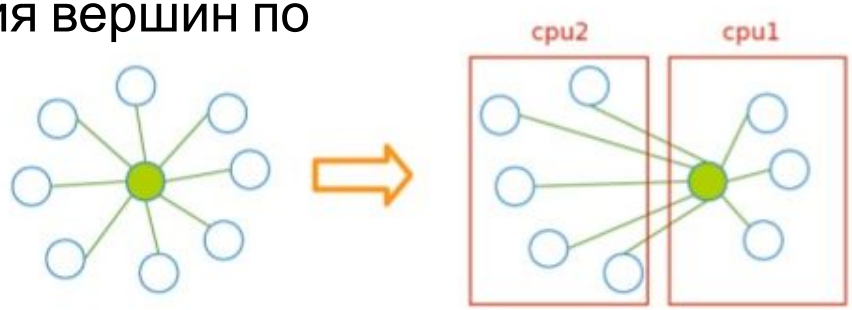
Распараллеливание: дисбаланс вычислительной нагрузки

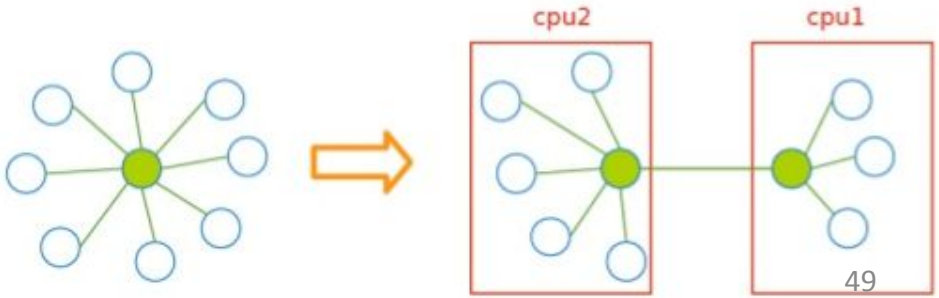
- **Проблема: неравномерность** итераций циклов

```
# pragma omp parallel for
for (int u = 0; u < G->n; u++)
    for (int j = G->rowsIndices[u]; j < rowsIndices[u+1]; j++) {
        ……
    }
```



- **Решение 1:** #pragma omp parallel for **schedule (guided)** – для **динамического** распределения вершин по тредам
- **Решение 2:** На этапе предобработки выполнение процедуры Vertex-cut: разделение вершины и **разрезание** списков смежности вершин





Большой объем памяти

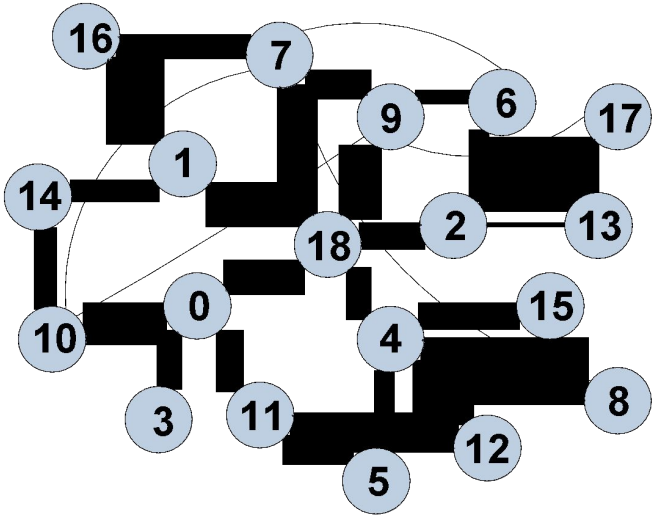
- **Проблема**: постоянная смена данных в кэше, низкие характеристики при случайном доступе
- **Решения** на этапе предобработки:
  - Хранение только половины графа (для неориентированного)
  - Удаление кратных ребер
  - Перестановка вершин (Cuthill-McKee)
  - Сжатие данных
    - edge_id_t: uint64_t --> uint32_t
  - Сортировка ребер каждой вершины
  - Сортировка всех ребер графа

Резюме: проблемы и подходы к решению задач в рамках одного узла

- Выбор оптимального представления графа
- По возможности организация последовательного доступа к данным
- По возможности избегать использовать межпотоковые синхронизации
- Стремиться работать не на задержке обращений к памяти, а на темпе
- Улучшение локализации
- Алгоритмические оптимизации
- Сжатие данных
- Аккуратная работа с памятью внутри NUMA-вычислительного узла
- Балансировка нагрузки
- Аккуратно измерять производительность

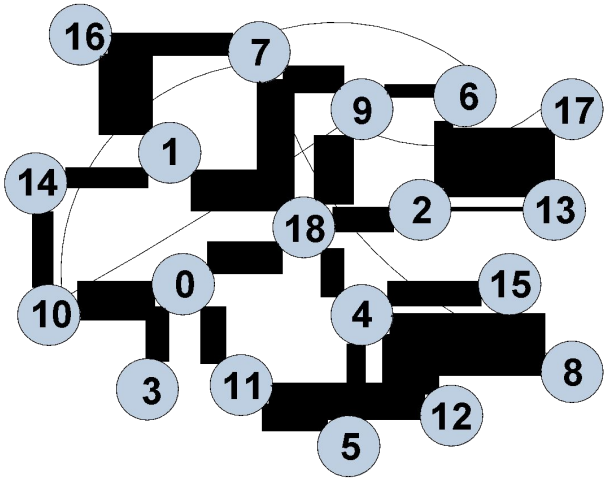
Проблемы и подходы к решению графовых задач на распределенной памяти

Представление графа

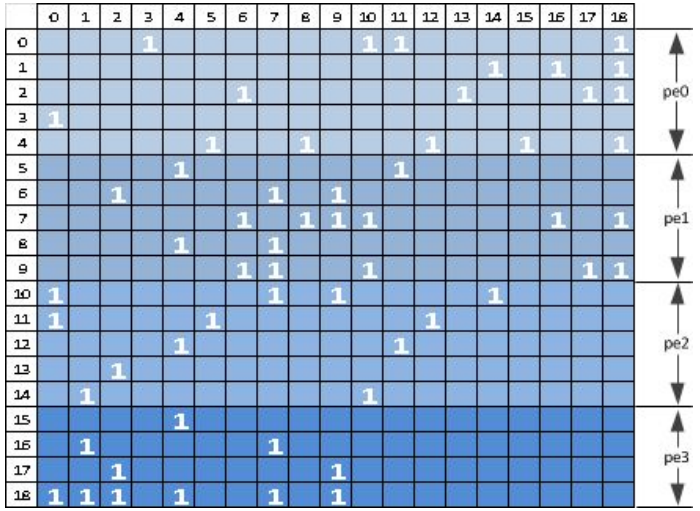


	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
0				1							1	1							1
1															1		1		1
2							1							1				1	1
3	1																		
4						1			1				1			1			1
5					1							1							
6			1					1		1									
7							1		1	1	1						1		1
8					1			1											
9							1	1			1							1	1
10	1							1		1					1				
11	1					1							1						
12					1							1							
13			1																
14		1									1								
15					1														
16		1						1											
17			1							1									
18	1	1	1		1			1		1									

Распределение данных

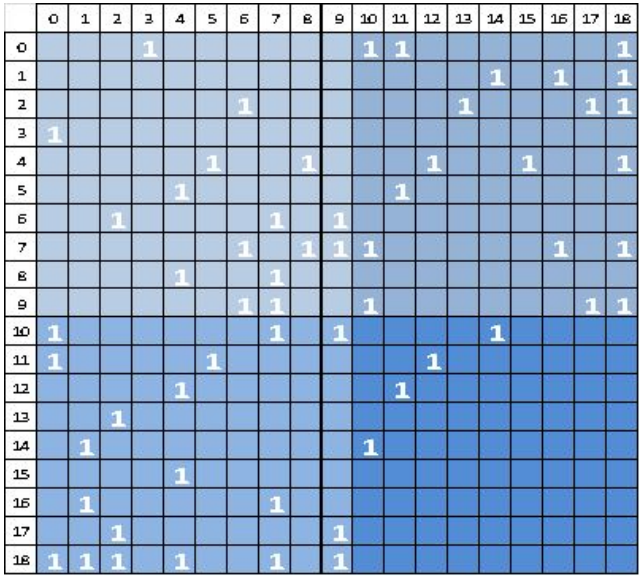


1D, блоками



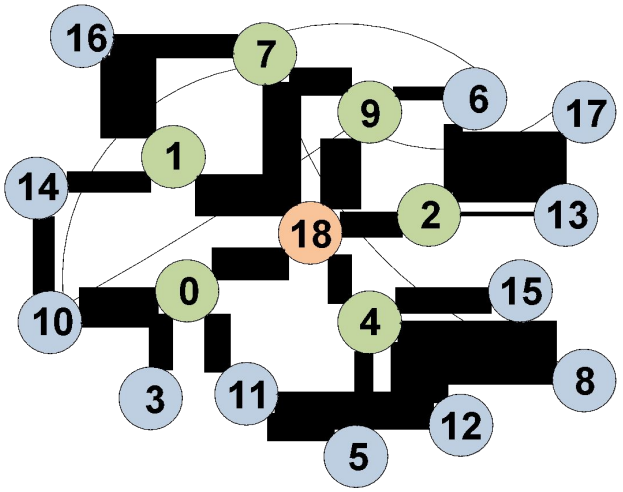
1D, с чередованием

2D



Поиск вширь в графе, распределенная версия

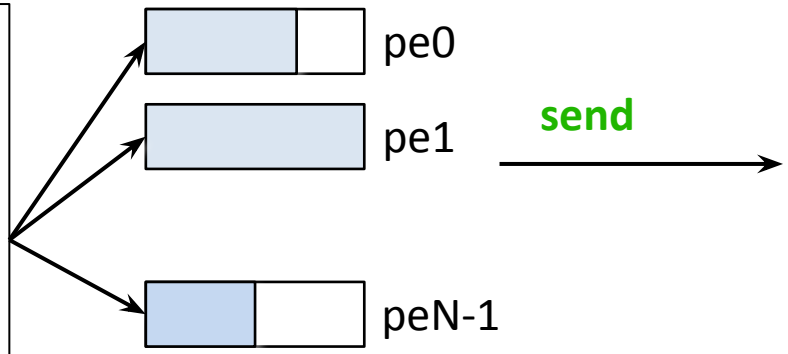
```
function ProcessQueue(Q, E)
    for all vertex ∈ Q do
        for all w : (vertex, w) ∈ E do
            send vertex, w to owner(w)
        end for
    end for
end function
```




```
function Receive(vertex, w)
    if w ∉ Visited then
        Q_next = Q_next ∪ w
        Visited = Visited ∪ w
        Parents(w) = vertex
    end if
end function
```

Поиск вширь в графе, агрегация сообщений

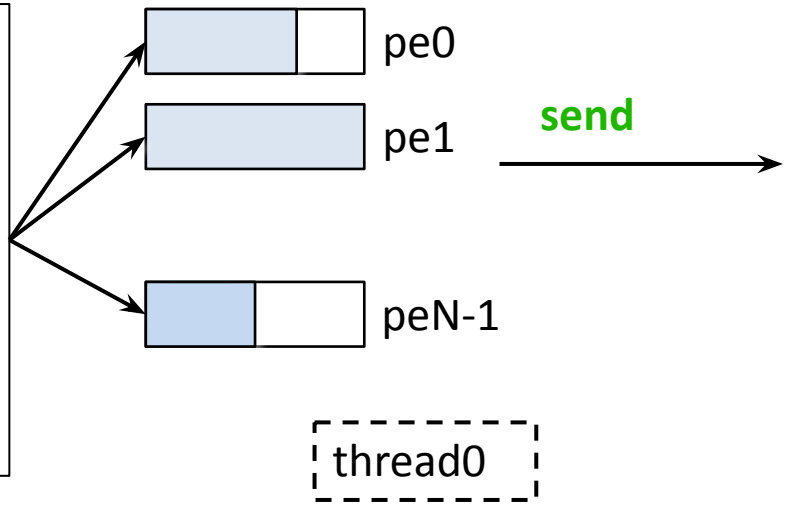
```
function ProcessQueue(Q, E)
    for all vertex ∈ Q do
        for all w : (vertex, w) ∈ E do
            send vertex, w to owner(w)
        end for
    end for
end function
```




```
function Receive(vertex, w)
    if w ∉ Visited then
        Q_next = Q_next ∪ w
        Visited = Visited ∪ w
        Parents(w) = vertex
    end if
end function
```

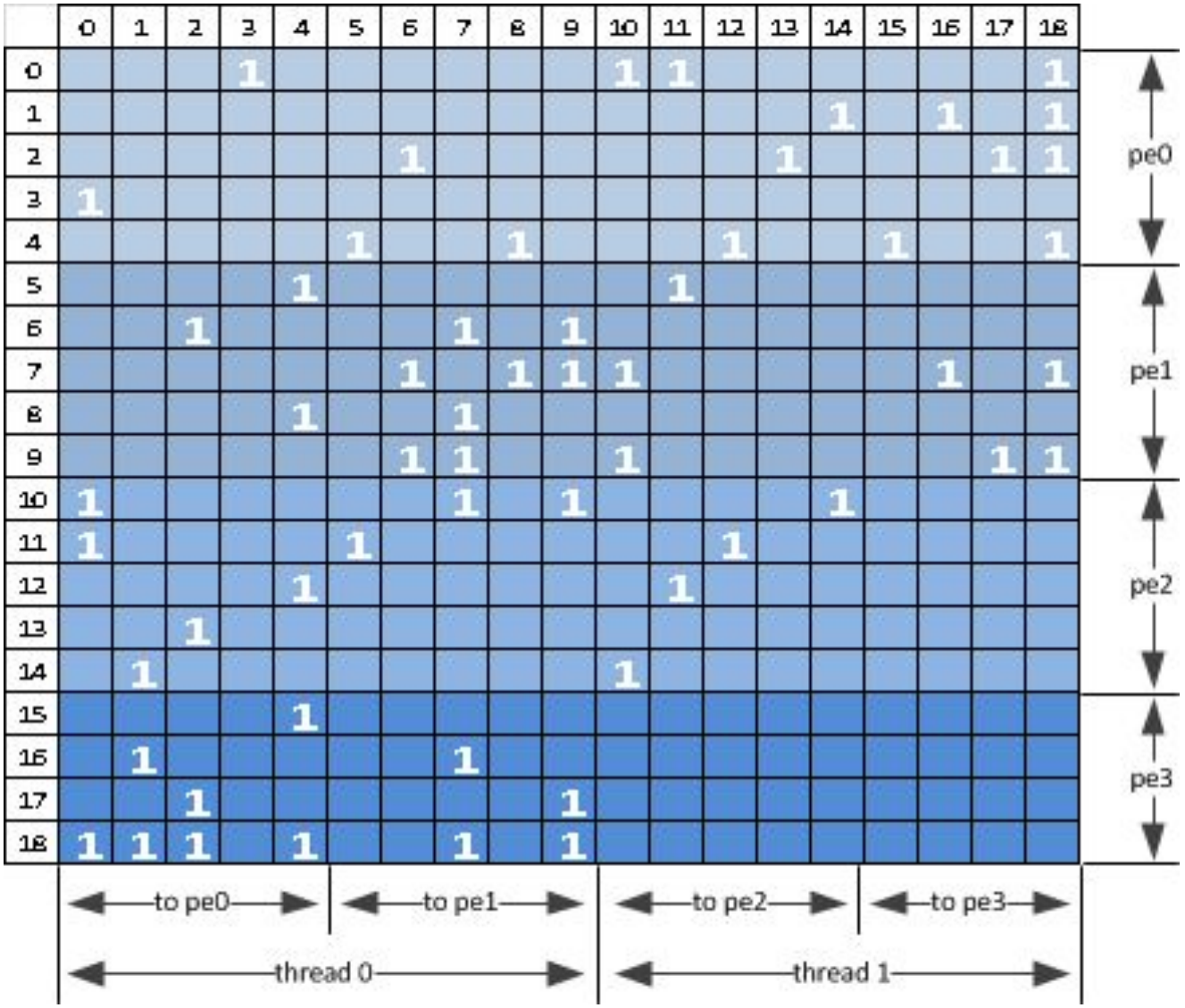
Поиск вширь в графе, параллельная отправка и прием

```
function ProcessQueue(Q, E)
    for all vertex ∈ Q do
        for all w : (vertex, w) ∈ E do
            send vertex, w to owner(w)
        end for
    end for
end function
```

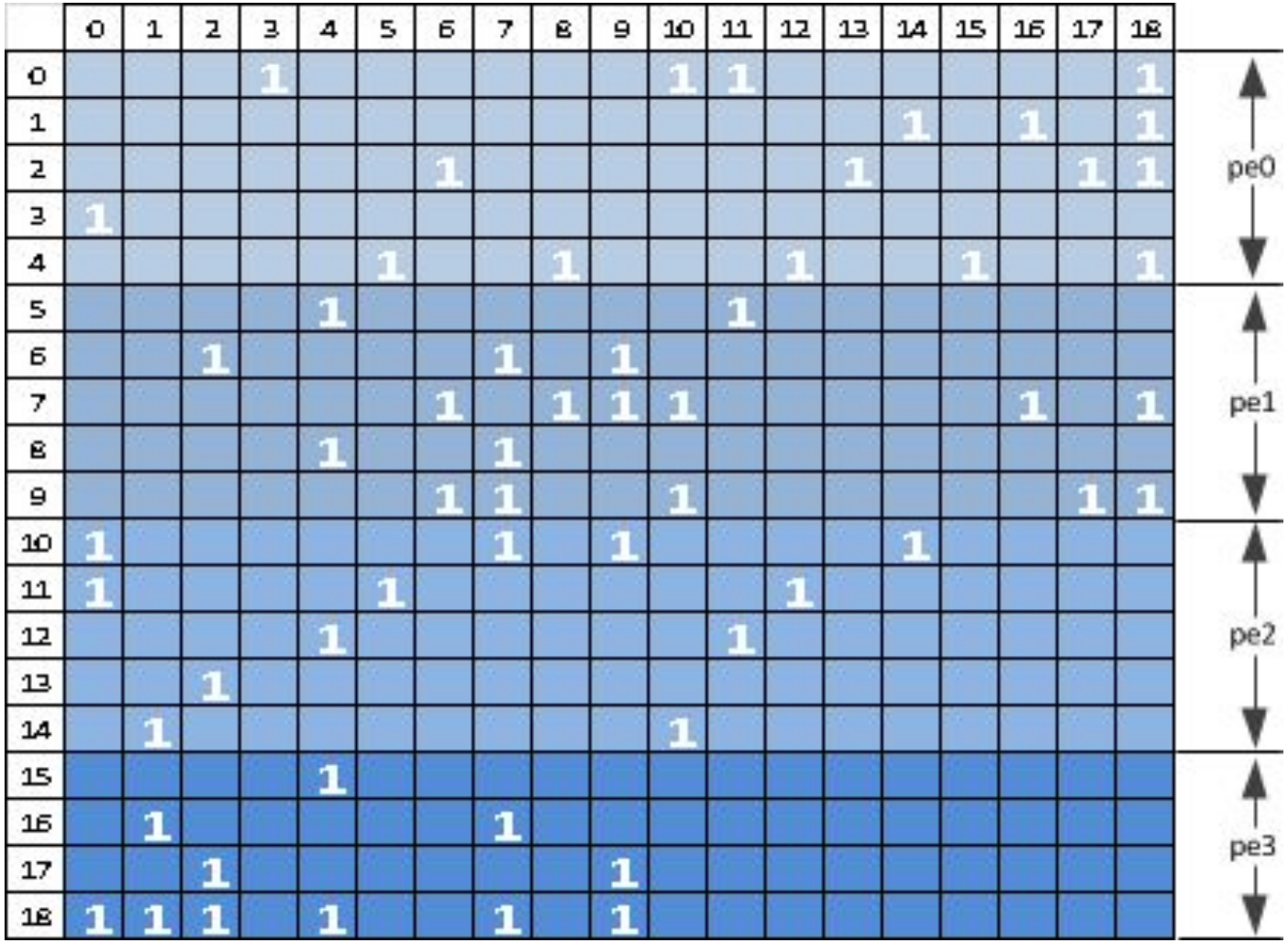



```
function Receive(vertex, w)
    if w ∉ Visited then
        Q_next = Q_next ∪ w
        Visited = Visited ∪ w
        Parents(w) = vertex
    end if
end function
```

Организация параллелизма потоков



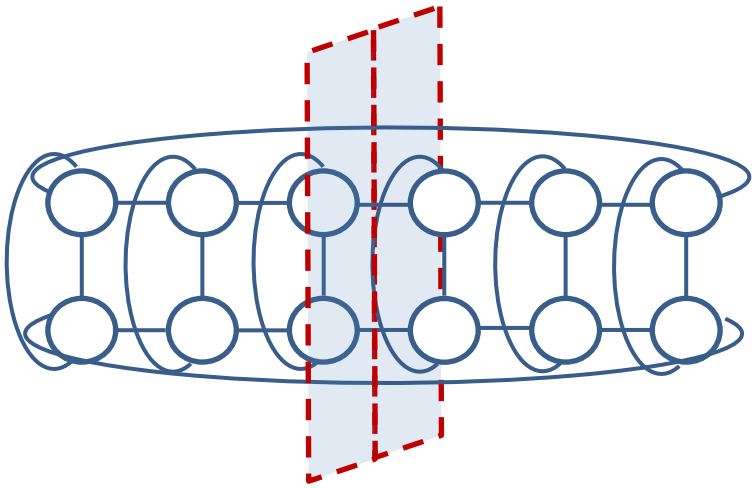
Хаотично расположенные вершины и ребра графа



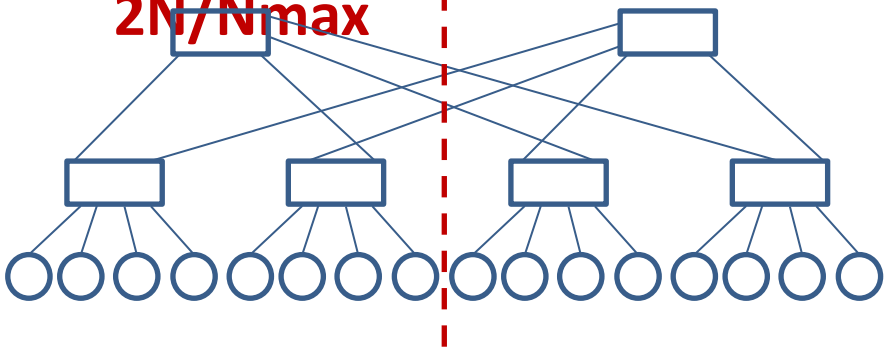
Шаблон обменов
all-to-all

Коммуникационная сеть. Бисекционная пропускная способность

- **Бисекционная плоскость – минимальный разрез, который разделяет сеть на две равные связные части**
- Бисекционная пропускная способность – пропускная способность каналов связи через бисекционную плоскость
- **В случае равномерных случайных посылок (all-to-all) каждый узел посылает сообщение через бисекционную плоскость с вероятностью ½**
- **Посылают все узлы – для линейной масштабируемости требуется N/2 линков в бисекционной плоскости**



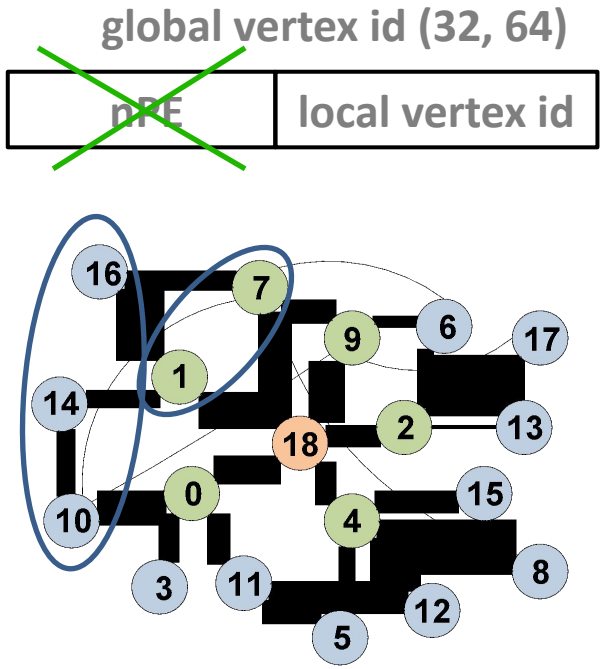
Бисекция тора = 2N/Nmax

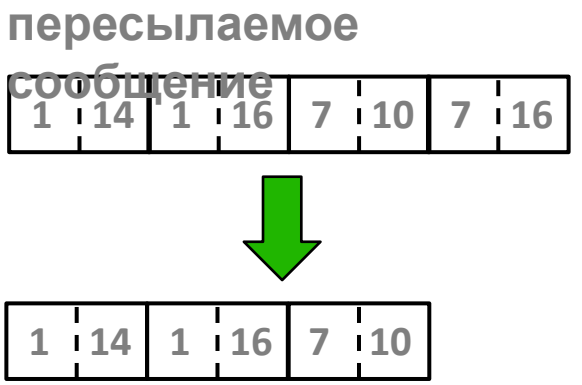


Бисекция жирного дерева (half bisection) = N/4

Уменьшение количества пересылаемых данных

- **Использование простаивающего процессора**
- **Сокращение пересылок**
  - **Отказ от лишней пересылаемой информации**
  - **Удаление дублирующей информации**
- **Сжатие данных**
  - **Использование знаний о структуре графа**





Графы реального мира. Степенной закон

- WWW, Социальные сети, Биоинформатика
- Графы small-world

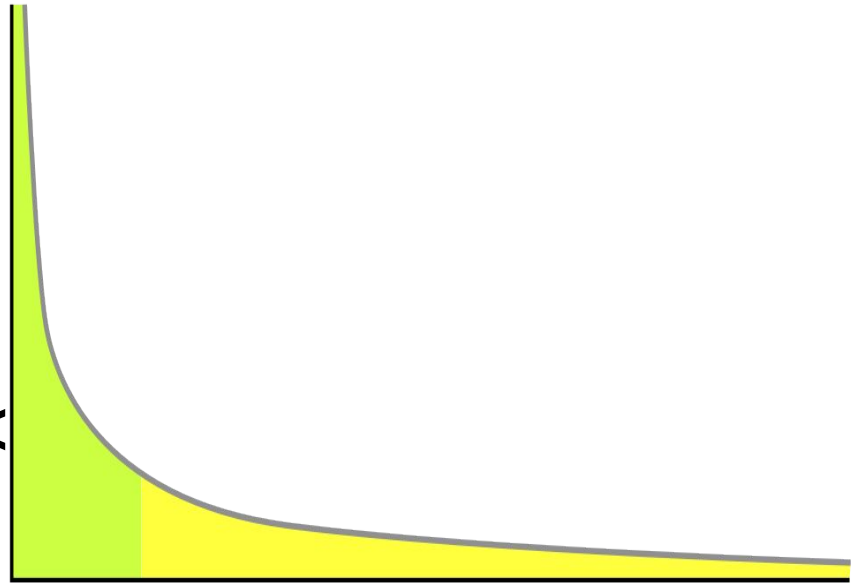
$L \sim \log N$,

- scale-free – графы,

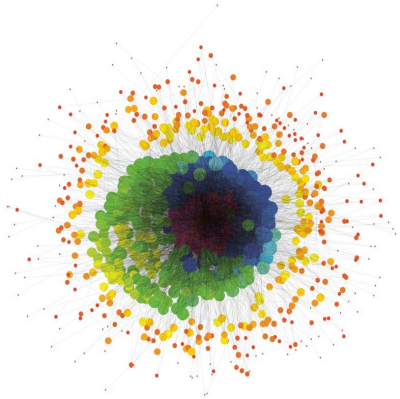
доля $P(k) \sim k^{-tau}$, $2 < tau <$

k – связность вершины

$L \sim \log \log N$



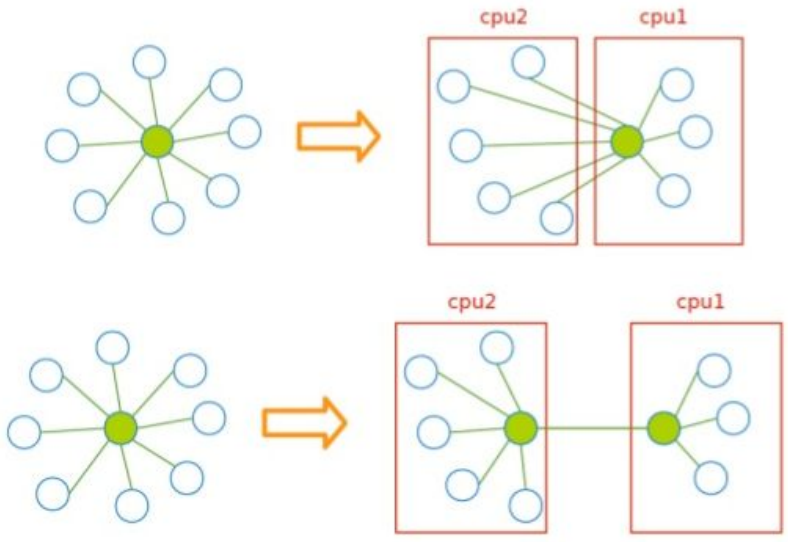
Граф Кронекера:



Балансировка нагрузки

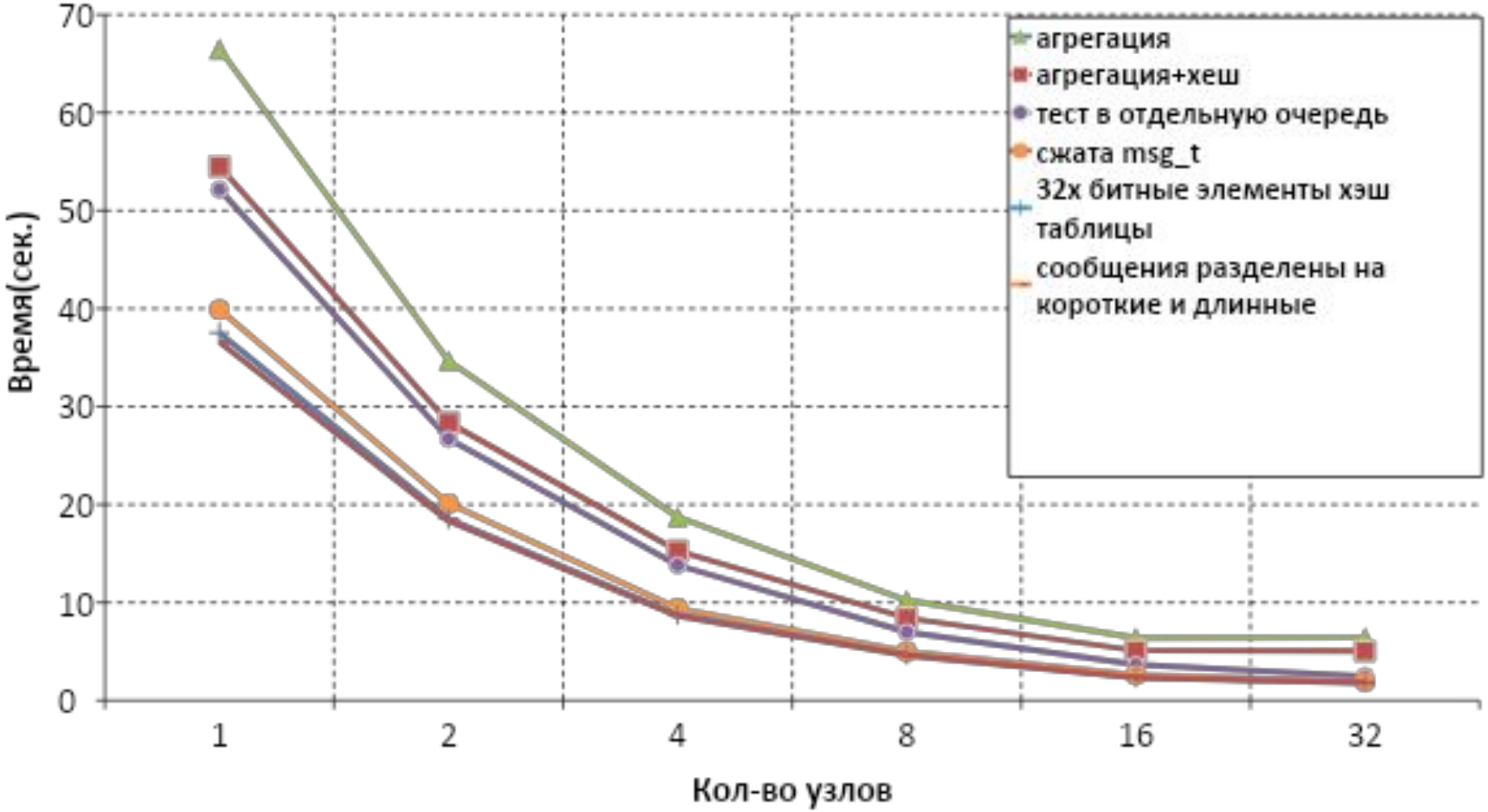
- При использовании большого числа вычислительных узлов особенно важна равномерная загрузка
- **Решение1:** На этапе предобработки выполнение процедуры Vertex-cut: разделение вершины и **разрезание** списков смежности вершин
- **Решение2:**

```
function ProcessQueue(Q, E)
    for all vertex ∈ Q do
        for all w : (vertex, w) ∈ E do
        if w ∈ Heavy then
            Out^H = Out^H ∪ w
            else
                send vertex, w to owner(w)
            end if
        end for
    end for
    broadcast Out^H
end function
```



Задача поиска минимального остовного дерева (MST)

Алгоритм Gallagher, Humblet, Spira. Сеть Ангара



Граф RMAT-23, средняя связность - 32

Проблемы и подходы к решению задач на распределенной памяти

- Выбор распределения данных
- Агрегация сообщений
- Организация внутриузлового параллелизма
- Уменьшение количества пересылаемых данных
- Балансировка нагрузки
- Использование эффективных коммуникаций
  - Аккуратно использовать MPI
- Алгоритмические оптимизации

Вопросы?

alxdr.semenov@gmail.com