«Суперкомпьютерные дни в России»
26-27 сентября 2022, Москва, Российская Федерация

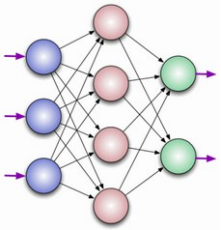
Вычислительный комплекс **Тераграф** для обработка графов сверхбольшой размерности

Алексей Юрьевич Попов
к.т.н., доцент,
руководитель проекта Тераграф

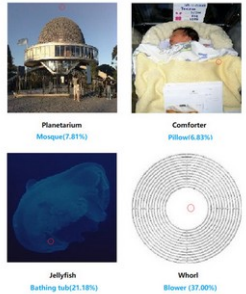
Московский государственный технический университет
им. Н.Э. Баумана, Москва, РФ

Проблемы слабого искусственного интеллекта

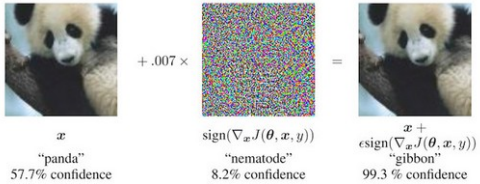
Искусственные нейронные сети генерируют выходные данные для любого входного шаблона



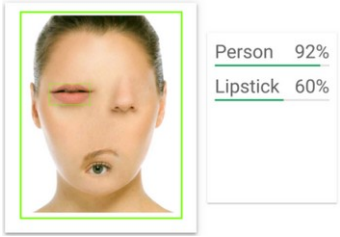
Результат обучения нейронной сети не всегда предсказуем



Внесение шума в изображение существенно снижает точность распознавания



Трансляционная инвариантность приводит к ошибкам



Дэниэлл Денетт,
философ из Университета Тафтса

«Я считаю, что если мы собираемся использовать эти вещи и зависеть от них, тогда нужно понимать, как и почему они действуют так, а не иначе. Если они не могут лучше нас объяснить, что они делают, то не стоит им доверять».

Аналитическая система на основе графов знаний

Этого достигли ИТ

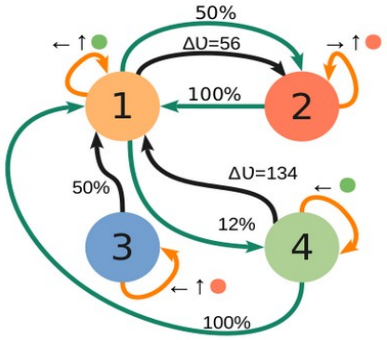
- Структуры/способы/методы/алгоритмы статичны.
- Структура вычислителя определяется на основе принципов универсальности.
- Структура программных систем определяется применяемыми технологиями.
- Информация в большинстве случаев представляется в виде реляционных моделей.
- Технический эффект достигается в рабочем режиме информационной системы.

Это сделала природа

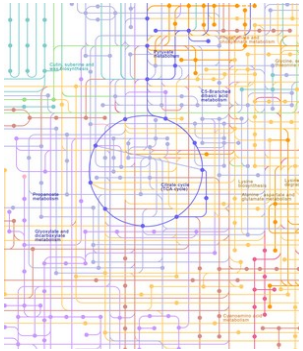
- Живой организм непрерывно обучается с момента рождения до смерти, при этом обеспечивает свою жизнедеятельность.
- Окружающая действительность определяют физиологические особенности, которые передаются последующим поколениям.
- Знания передаются различными способами.
- Человек проходит около 12 различных стадий на жизненном пути.

Представление знаний

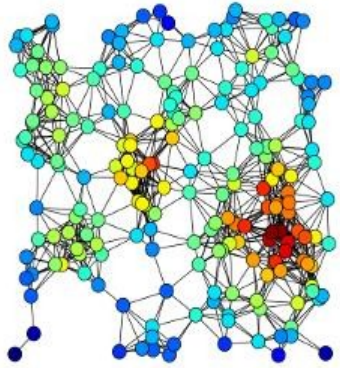
Знания представляются в виде графовых моделей, позволяющих однозначно интерпретировать результат. Вершины и ребра графа представления знаний обладают атрибутами, которые анализируются алгоритмами и позволяет делать логический вывод.



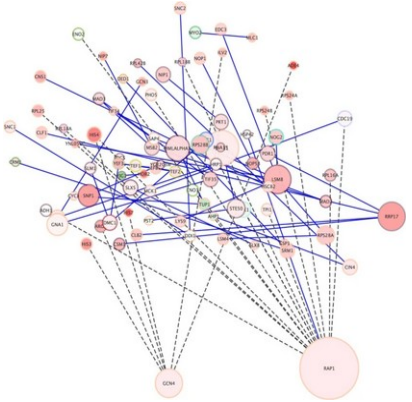
Динамический граф сцены



Фрагмент графа обмена веществ



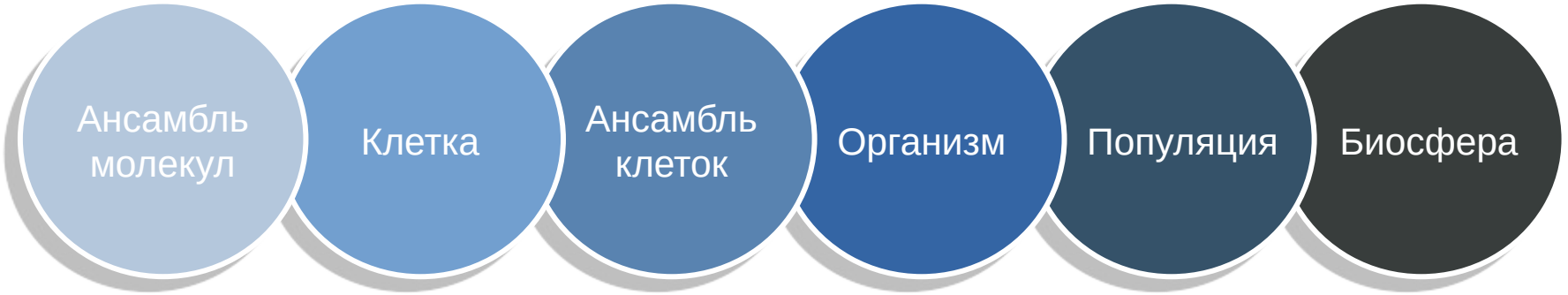
Граф результатов анализа контрагентов для участника рынка



Граф белок-белковых взаимодействий

Применение графов в биологии и медицине

- Интерактомика
- Анализ проблемы индивидуальной нормы
- Моделирование и визуализация процессов в биологических системах
- Моделирование и анализ популяций и сложных сообществ



Существующие подходы к обработки графов

Режимы обработки

- Обработка статичных графов
- Потоковая обработка статичных графов
- Обработка динамических графов

Программные решения

Эффективные структуры данных

Библиотеки обработки графов

Графовые базы данных

Аппаратные решения

Многопоточность и многонитевость

Графические ускорители

Специализированная память

Ускорители на ПЛИС

Набор команд дискретной математики DISC

Discrete math operations	Description	DISC instructions
$A = \langle A_1, \ldots, A_n \rangle$	- store function of n sets as an A tuple	Insert
$R(A_i, x, y)$, $x \in A_i$, $y \in A_i$	- relationship between the x and y in the set A_i	Next/Previous/Neighbors
$\lvert A_i \rvert$, i = 1,n	- cardinality of the A_i set	Cardinality
$x \in A_i$, $x \notin A_i$, i = 1,n	- check the inclusion/exclusion of the x in the set	Search
$A_i \cup x$, i = 1,n	- inserting the x into the set	Insert
$A_i \setminus x$, i = 1,n	- removing an element x from the set	Delete, Delete structure
$A \setminus A_i$	- removing the set A_i from the tuple A	Delete structure
$A_i \subset A_j$	- inclusion relation of the set A_i in A_j	Slices
$A_i \equiv A_j$	- equivalence relation operation	Slices
$A_i \cup A_j$	- union operation of two sets	OR
$A_i \cap A_j$	- intersection operation of two sets	AND
$A_i \setminus A_j$	- difference operation	NOT
$A_i \triangle A_j$	- symmetric difference	–
$\overline{A}$	- complement of the A_i	NOT
$A_i \times A_j$	- Cartesian product operation	–
2^{Ai}	- Boolean operation	–

Набор команд дискретной математики DISC

Операции, основанные на поиске

- Поиск по ключу *SRCH*
- Поиск минимального *MIN*
- Поиск максимального *MAX*
- Поиск следующего *NEXT*
- Поиск предыдущего *PREV*
- Ближайший больший *NGR*
- Ближайший меньший *NSM*

Операции добавления/удаления

- Вставка *INS*
- Удаление *DEL*
- Удаление множества *DELS*

Операции И-ИЛИ-НЕ

- Объединение множеств *OR*
- Пересечение множеств *AND*
- Дополнение множеств *NOT*

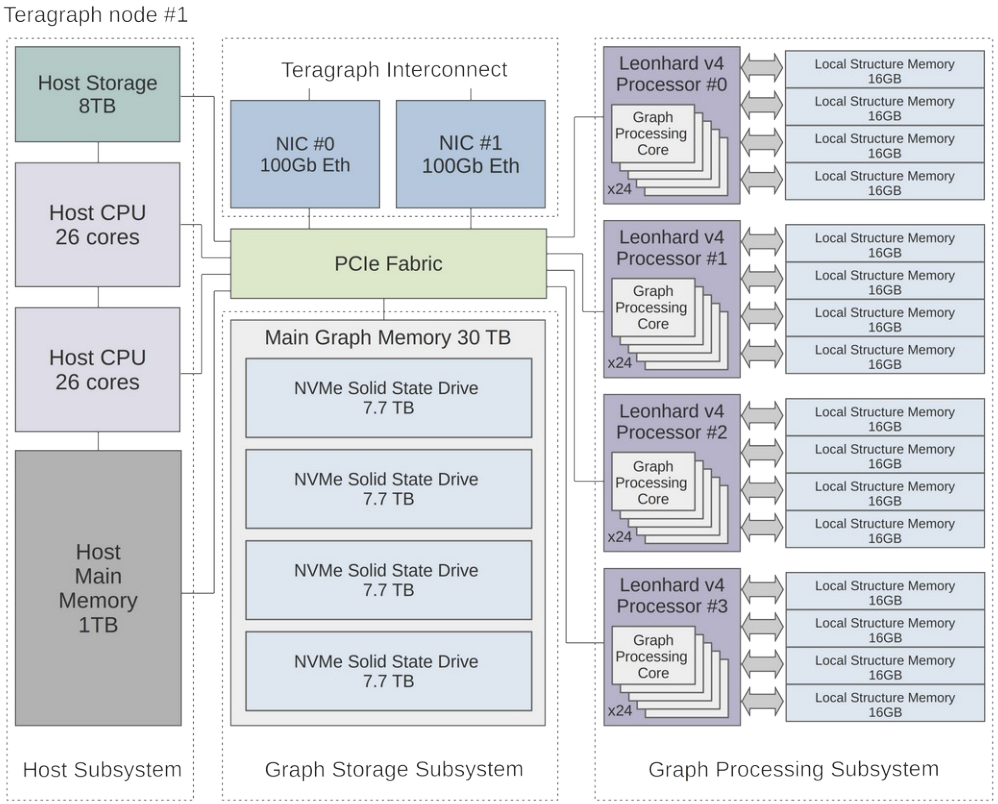
Операции среза

- Срез больше *GR*
- Срез больше или равно *GREQ*
- Срез меньше *LS*
- Срез меньше или равно *LSEQ*
- Срез меньше/больше *GRLS*

Свойства множеств

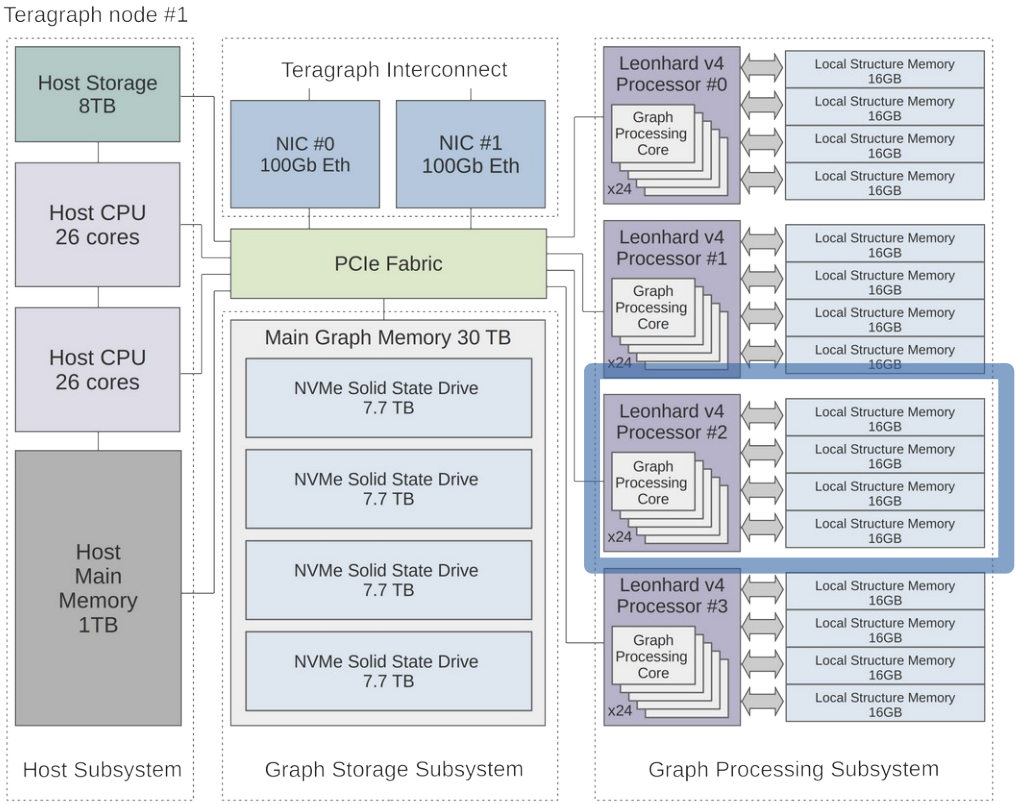
- Мощность множества *CNT*

Вычислительный узел комплекса Тераграф



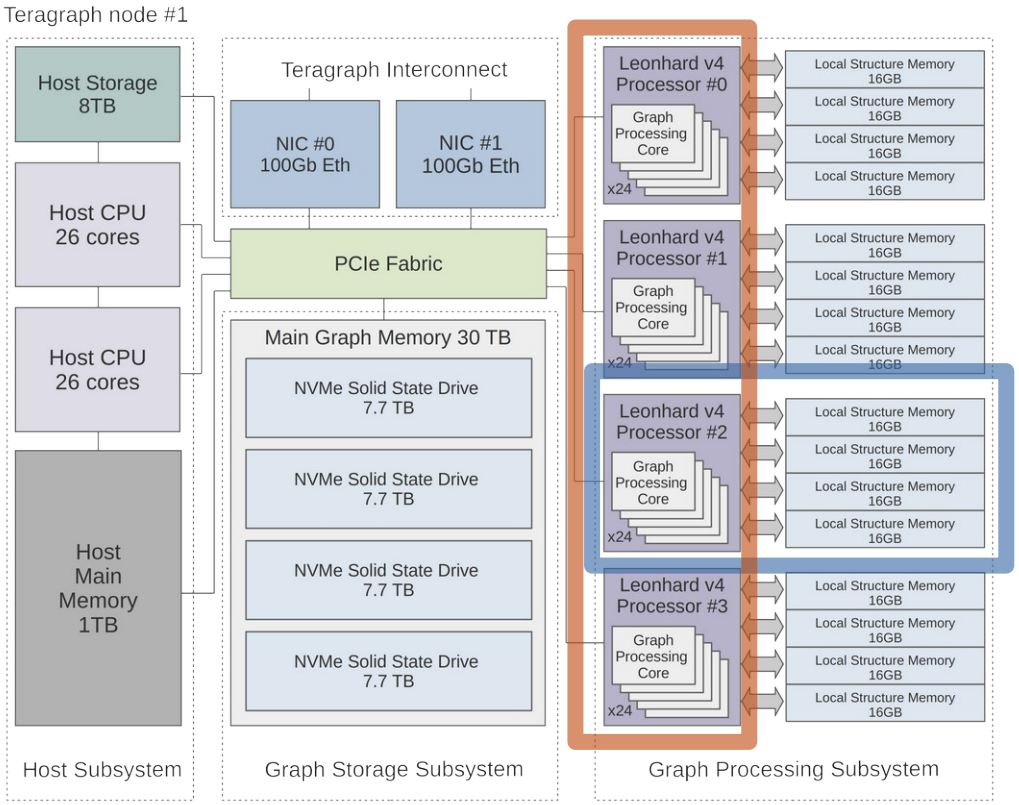
- Предусмотрено длительное размещение графов в оперативном доступе.
- Используется ассоциативная память большого объема (2.5ГБ на одно ядро Graph Processing Core, GPC)
- Ядра GPC являются весокоэффективными гетерогенными системами, взаимодействующими через единой адресное пространство PCIe
- GPC самостоятельно обращается в локальное графовое хранилище 30ТБ и графовые хранилища других узлов
- Хост система выполняют второстепенные функции (инициализация,распределение и т.д.)

Вычислительный узел комплекса Тераграф



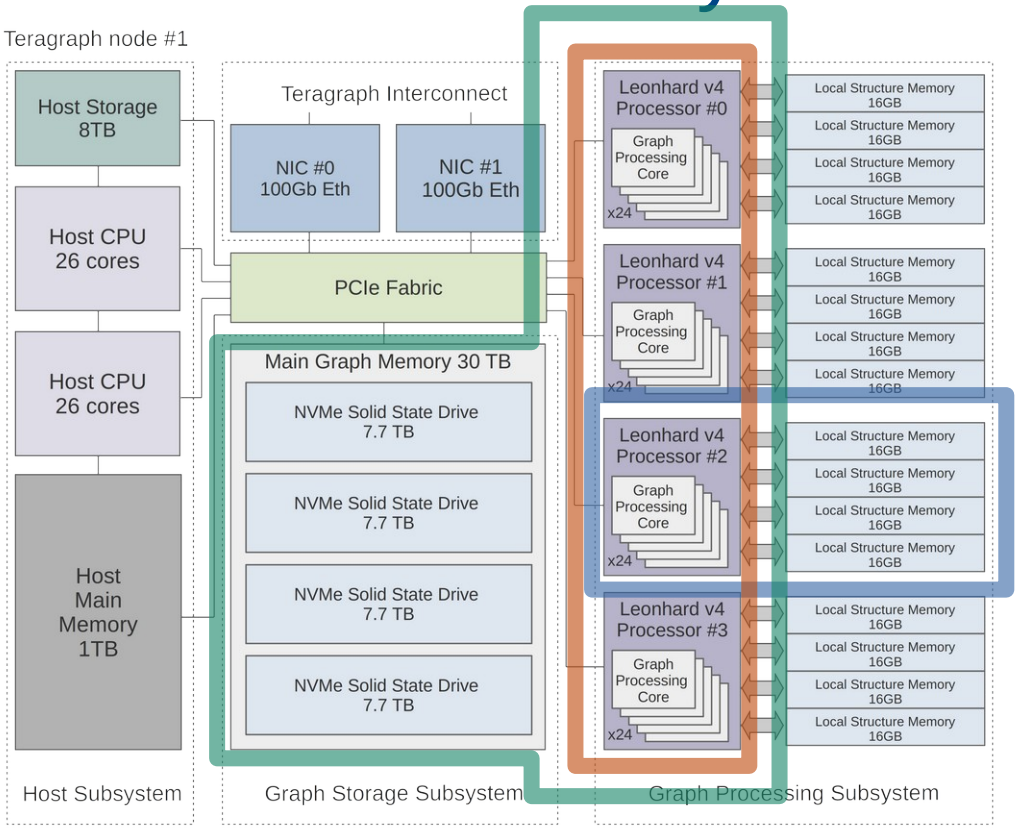
- Предусмотрено длительное размещение графов в оперативном доступе.
- Используется ассоциативная память большого объема (2.5ГБ на одно ядро Graph Processing Core, GPC)
- Ядра GPC являются весокоэффективными гетерогенными системами, взаимодействующими через единой адресное пространство PCIe
- GPC самостоятельно обращается в локальное графовое хранилище 30ТБ и графовые хранилища других узлов
- Хост система выполняют второстепенные функции (инициализация,распределение и т.д.)

Вычислительный узел комплекса Тераграф



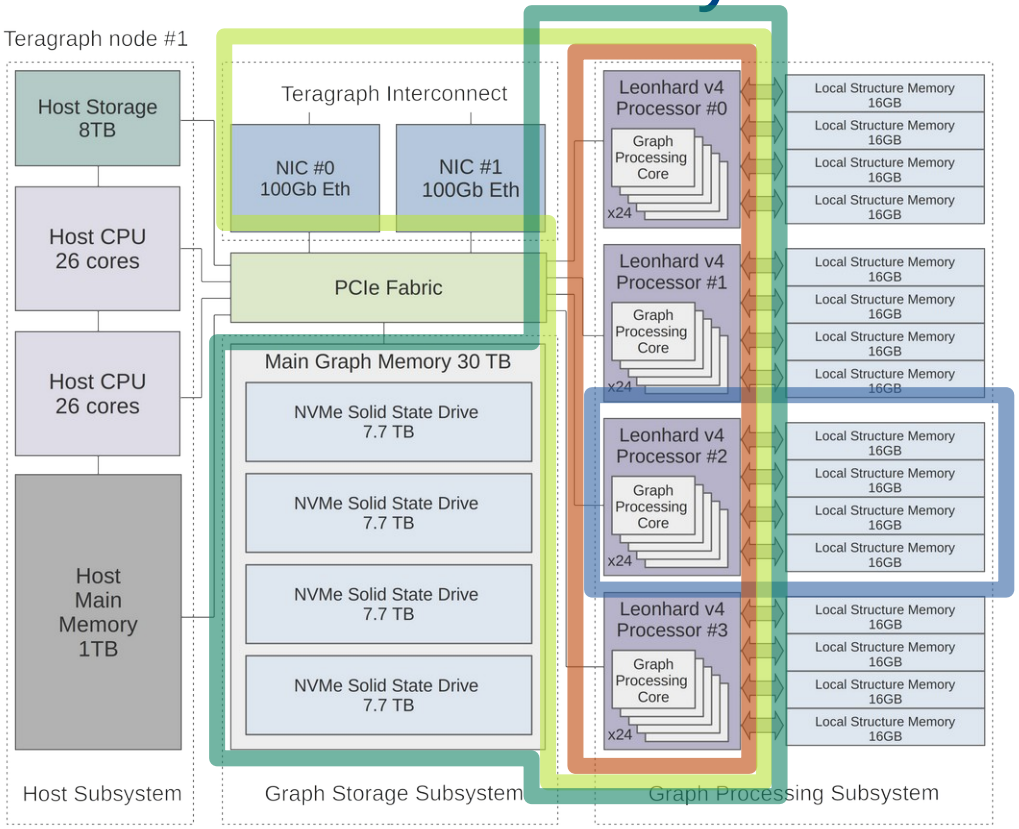
- Предусмотрено длительное размещение графов в оперативном доступе.
- Используется ассоциативная память большого объема (2.5ГБ на одно ядро Graph Processing Core, GPC)
- Ядра GPC являются весокоэффективными гетерогенными системами, взаимодействующими через единой адресное пространство PCIe
- GPC самостоятельно обращается в локальное графовое хранилище 30ТБ и графовые хранилища других узлов
- Хост система выполняют второстепенные функции (инициализация,распределение и т.д.)

Вычислительный узел комплекса Тераграф



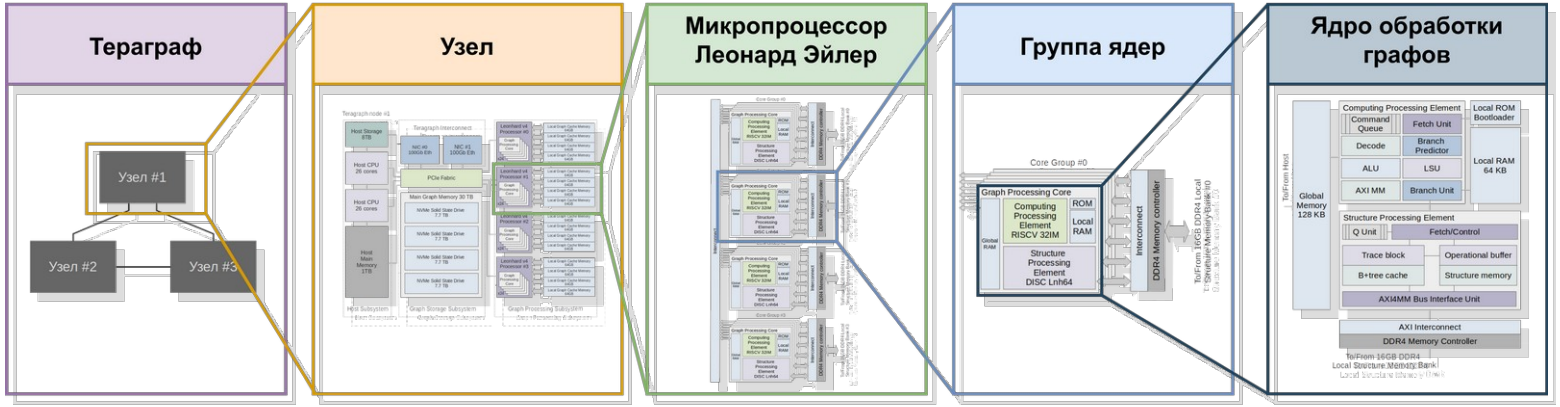
- Предусмотрено длительное размещение графов в оперативном доступе.
- Используется ассоциативная память большого объема (2.5ГБ на одно ядро Graph Processing Core, GPC)
- Ядра GPC являются весокоэффективными гетерогенными системами, взаимодействующими через единой адресное пространство PCIe
- GPC самостоятельно обращается в локальное графовое хранилище 30ТБ и графовые хранилища других узлов
- Хост система выполняют второстепенные функции (инициализация,распределение и т.д.)

Вычислительный узел комплекса Тераграф



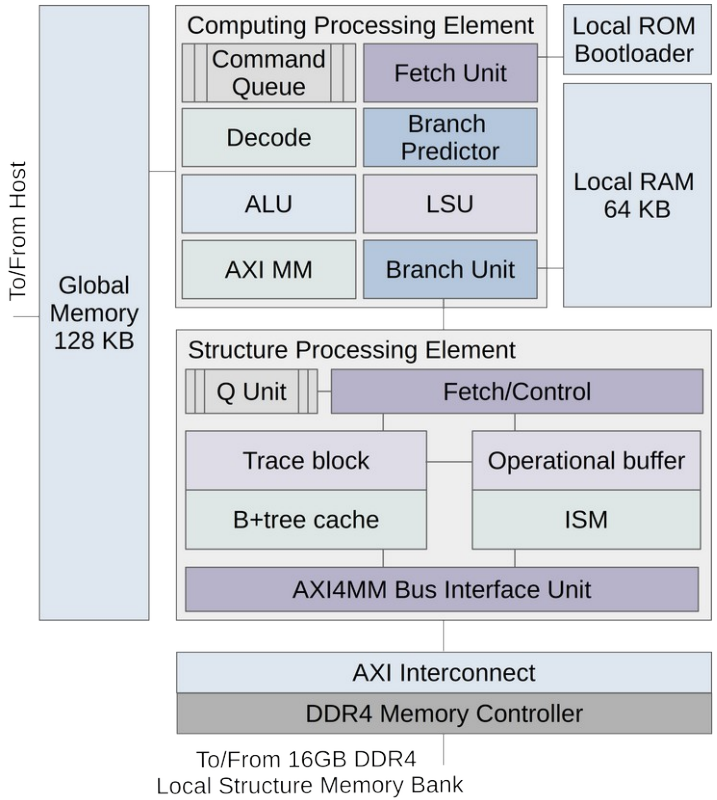
- Предусмотрено длительное размещение графов в оперативном доступе.
- Используется ассоциативная память большого объема (2.5ГБ на одно ядро Graph Processing Core, GPC)
- Ядра GPC являются весокоэффективными гетерогенными системами, взаимодействующими через единой адресное пространство PCIe
- GPC самостоятельно обращается в локальное графовое хранилище 30ТБ и графовые хранилища других узлов
- Хост система выполняют второстепенные функции (инициализация,распределение и т.д.)

Архитектура комплекса Тераграф



Характеристика	Значение
Количество процессоров Леонард Эйлер	**9**
Количество GPC	**216**
Кэш память (DDR4, ГБ)	**576**
Оперативная память GPC (ТБ)	**48**
Количество хранимых ключей	**1 триллион**

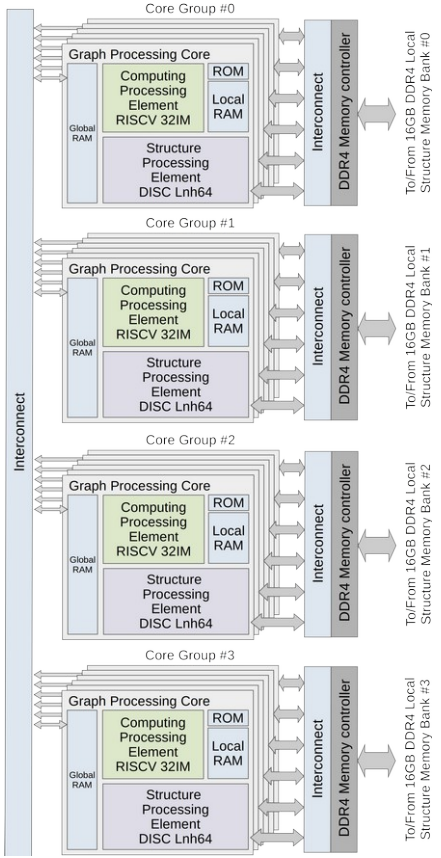
Гетерогенное ядро обработки графов



- GPC состит из двух тесно связанных микропроцессоров: Computing Processor Element (CPE) и Structure Processing Element (SPE).
- CPE реализован на базе микропроцессора с набором команд riscv32im.
- SPE представляет собой микропроцессор с набром команд дискретной математики DISC
- SPE подключен, как ускорительное ядро к шине памяти CPE.
- Производительность GPC сопоставима с производительностью одного ядра Intel Xeon Platinum v8 при 10x меньшей частоте (267 МГц) и 40x меньшем количестве вентилей (2.5 млн.)

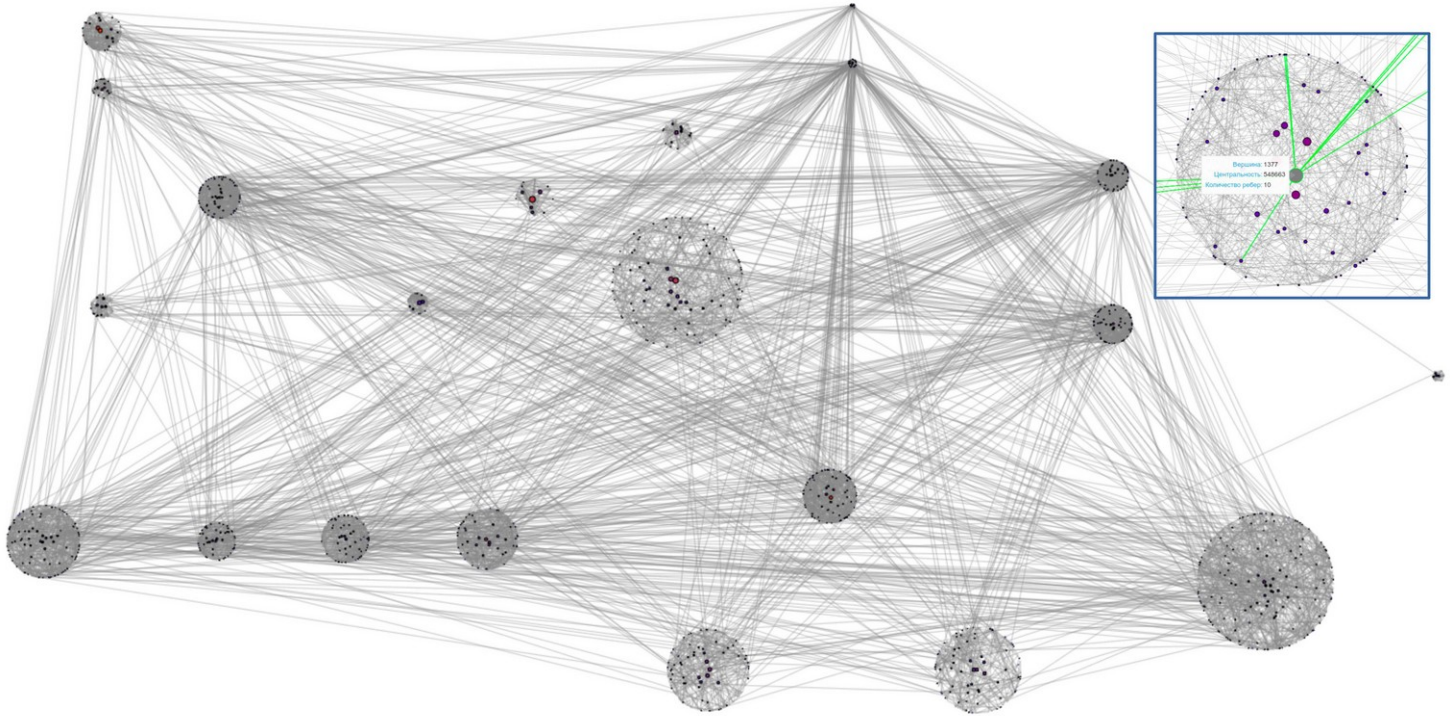
Микропроцессор Леонард Эйлер

- Ядра GPC объединяются в группы ядер (до 6 ядер в группе)
- В каждой группе предусмотрена глобальная память 128КБ для обмена данными между хост-подсистемой и CPE.
- В каждом ядре CPE предусмотрены аппаратные очереди сообщений Host2GPC и GPC2Host на 512 записей по 32 бит каждая.
- Все GPC в одной группе подключены к одной шине памяти DDR4 (16ГБ).
- Хост-подсистема может независимо управлять каждым GPC в отдельности.
- Основным программным компонентов программного ядра является обработчик (подобно шейдеру), который написан на языке C и загружается по запросу хост-системы.



Примеры, исходные коды библиотек: https://alexbmstu.github.io/2022

Пример работы одного гетерогенного ядра Тераграф



Определение сообществ и центральности
~4K вершин, 16 млн кратчайших путей

Наиболее значимые результаты исследований

Научные

- Принципы функционирования микропроцессора обработки структур данных
- Вычислительная система со множественным потоком команд и одиночным потоком данных
- Набор команд дискретной математики DISC

Практические

- Ассоциативная память большого объема
- Гетерогенное ядро обработки графов
- Многоядерный микропроцессор Леонард Эйлер
- Архитектура комплекса обработки графов
- Библиотека обработки графов

Направления дальнейших исследований

Проблема	Методология решения
Определение принципов организации подсистемы хранения графов	Теоретические и экспериментальные исследования
Определение принципов многопоточной и многонитевой обработки графов в вычислительном комплексе Тераграф	Разработка, верификация, экспериментальное исследование производительности Разработка, верификация, экспериментальное исследование производительности
Разработка библиотек для сетевого доступа к распределенным ресурсам вычислительного комплекса Тераграф	Разработка, верификация, экспериментальное исследование производительности
Разработка библиотек для доступа к ресурсам подсистемы хранения графов	Разработка, верификация, экспериментальное исследование производительности
Разработка прикладных библиотек обработки и визуализации графов для моделирования биологических систем	Разработка, верификация, экспериментальное исследование производительности

Вычислительный комплекс **Тераграф** для обработка графов сверхбольшой размерности

Алексей Юрьевич Попов

alexpopov@bmstu.ru

Bauman Moscow State Technical University, ul. Baumanskaya 2-ya, 5/1, Moscow, 105005, Russia