



**Обработка больших данных с использованием
байесовского подхода на универсальном
суперкомпьютерном гетерогенном вычислительном
комплексе высокой плотности PetaCube**

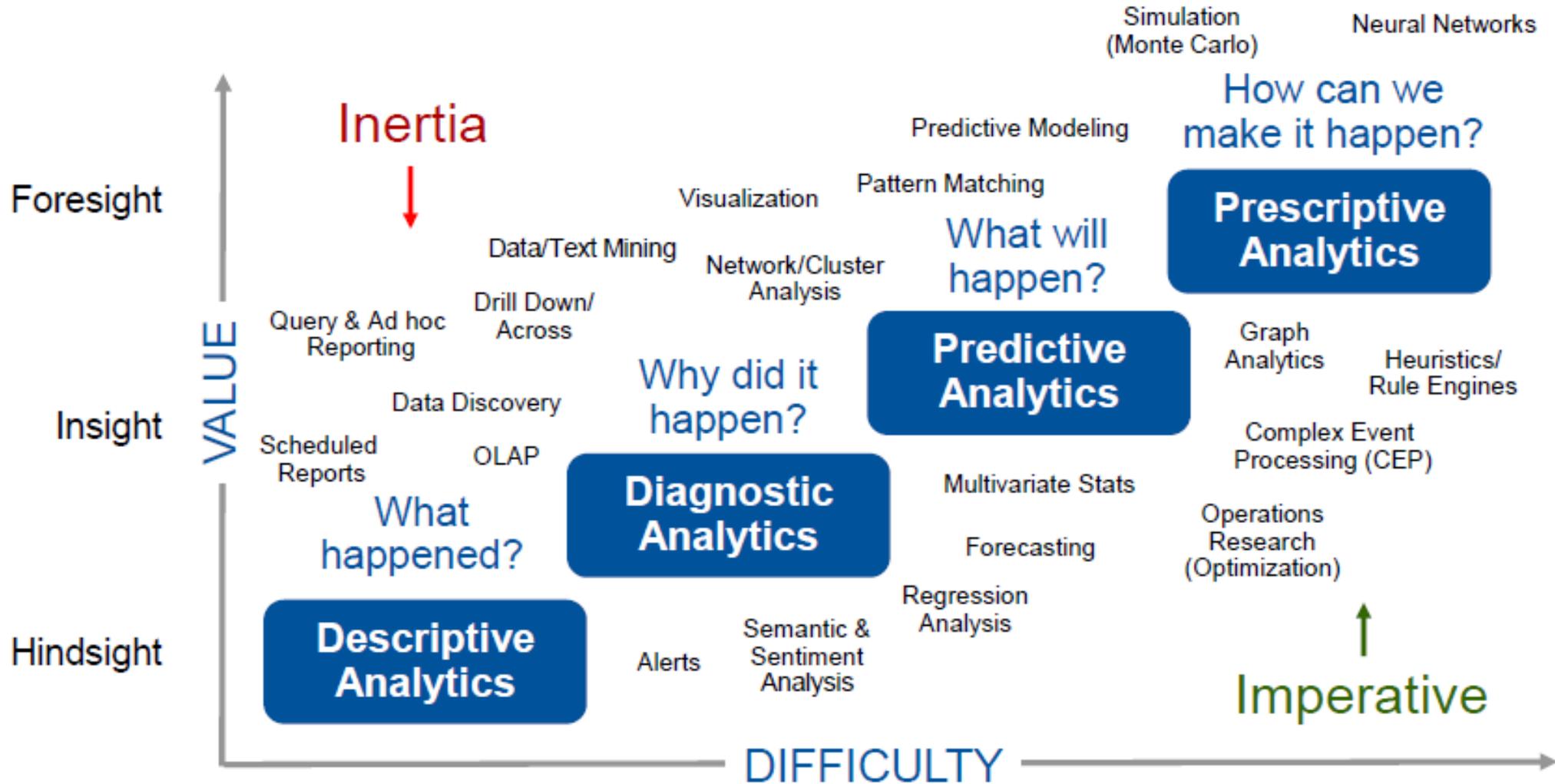
М.А. Марченко, А.В. Новиков

**Институт вычислительной математики и математической
геофизики СО РАН
Новосибирск**

Russian Supercomputer Days - 2018



Большие данные (Big Data) в современной науке





Большие данные



- **Большие данные** – ключевой драйвер современных исследований во всех областях научных знаний и в сфере управления государством.
- Данные генерируются постоянно и их анализ – насущная потребность.
- **Обработка больших данных** – критическая компетенция в науке.

Потребность в обработке больших данных в Новосибирской области и ННЦ:

- 1) Экономические, социальные, медицинские, экологические и др. данные Сибирского региона, Новосибирской области и Новосибирска.
- 2) Физика высоких энергий (ИЯФ СО РАН).
- 3) Геномика и системная биология (ИЦиГ СО РАН).
- 4) Экономика (ИЭОПП СО РАН).



Технологии обработки больших данных



- 1) **Научные компетенции:** математическая статистика, вычислительная математика, методы Монте-Карло.
- 2) **Вычисления:** суперкомпьютеры (петафлопсы, распределенная сеть).
- 3) **Хранение:** современные ЦОД (эксабайты, Tier-3).

Компетенции в ННЦ:

- 1) Вычислительная математика и методы обработки данных: ИВМиМГ, ИМ, ИСИ, ИВТ.
- 2) Суперкомпьютеры: ИВМиМГ, НГУ.
- 3) Хранение данных: ИВТ, НГУ.



Большие данные (Big Data) в биологии и физике.



Геномика:

- Расшифровка одного генома – **терафлопсный уровень производительности, хранилище в сотни терабайт.**
- Сравнение геномов – порядка 100 петабайт данных и нужен **петафлопсный уровень, хранилище в сотни петабайт.**
- Новое направление - синтетическая биология (= инжинирия) - **эксафлопсный уровень, хранилище экзабайтного уровня.**

Физика высоких энергий:

- Поточные данные с коллайдеров – от 10 Гб до 1 Тб в секунду - **петафлопсный уровень, хранилище в сотни петабайт, вплоть до экзабайта.**



Информационно-вычислительные методы обработки больших данных.



Для усвоения больших данных измерений применяются методы **искусственного интеллекта, машинного обучения и нейронные сети**^[1].

- **Искусственный интеллект:** общее название для цифровых устройств и компьютерных алгоритмов, позволяющих автоматизировать процесс принятия решений, управлять рынками, торговлей, финансами и пр.
- **Машинное обучение:** построение решающего алгоритма и оценка его параметров путем обучения на заданном наборе данных с использованием Байесовского подхода.
- **Нейронная сеть:** математическая модель, её программное или аппаратное воплощение, построенная по принципу связывания простых программных элементов для решения задач прогнозирования, распознавания образов, управления и др.

[1] ВМК МГУ Bayesian Methods Research Group <http://bayesgroup.ru>



Байесовский подход к усвоению данных.



Определение информации об объекте на основании данных измерений^[1-2]:

- Все величины предполагаются случайными:

q – оцениваемый параметр объекта, f – данные измерений.

Нужно определить условную вероятность распределения q при заданном f .

- Задано: $p(q)$ - априорное распределение параметра q ,
 $p(f|q)$ – функция правдоподобия для f при заданном q .

Апостериорное распределение параметра q при заданных данных измерений f вычисляется по **формуле Байеса**^[1]

$$p(q|f) = p(f|q)p(q) / \int p(f|q)p(q)dq.$$

- Применяя параллельные **методы Монте-Карло и супервычисления**, моделируются выборочные значения параметра q и выборочные оценки, строятся гистограммы.

[1] Gelman A., Meng X. Applied Bayesian Modeling and Causal Inference from Incomplete-Data Perspectives. Wiley. 2004

[2] BMK МГУ Bayesian Methods Research Group <http://bayesgroup.ru>



Байесовский подход. Обратная задача с усвоением больших данных.

Обратные задачи.

- **Постановка обратной задачи в общем виде** ^[1]:

найти значение параметра q , если задано уравнение

$$A(q) = f$$

где A – оператор, $f \in R^m$ – данные измерений, $q \in R^n$ – параметр оператора.

- Для ряда приложений экономики, геофизики, медицины данные измерений представляются в виде ^[2]

$$f = A(q) + \varepsilon,$$

$A(q)$ - модель, q – параметр модели, $\varepsilon \sim N(0, \Gamma)$ – случайная ошибка измерений.

[1] Kabanikhin S.I. Inverse and ill-posed problems: theory and applications. Berlin: De Gruyter, 2013.

[2] Insua D., Ruggeri F., Wiper M. Bayesian Analysis of Stochastic Process Models. Wiley, 2012.



Байесовский подход. Обратная задача с усвоением больших данных.

Применение Байесовского подхода к решению обратной задачи.

- Вектора данных измерений f и параметров модели q имеют большую размерность.
- Функция правдоподобия $p(f|q)$ - плотность многомерного нормального распределения с математическим ожиданием $A(q)$ и ковариационной матрицей Γ .
- Получение выборочных значений параметра q согласно плотности распределения

$$p(q|f) \propto p(f|q)p(q)$$

производится на суперкомпьютере путем статистического моделирования цепей Маркова с использованием малотрудоемких методов^[1].

[1] Solonen, A., Ollinaho, P., et al. Efficient MCMC for climate model parameter estimation: parallel adaptive chains and early rejection: Bayesian Anal. 2012. V. 7. No. 3. P. 715–736.



Байесовский подход. Моделирование апостериорного распределения.

- “Классический” метод **Метрополиса-Хастингса**^[1] – итерационный алгоритм. Плохо подходит при работе с большими выборками наблюдаемых значений, поскольку **требует вычислений функции правдоподобия на каждой итерации...**
- Существуют модификации алгоритма Метрополиса-Хастингса, огрубляющие процедуру моделирования, но делающие ее быстрее. В результате моделируемое распределение не соответствует апостериорному распределению^[2].
- **Алгоритм Zig-Zag**^[3] – строится на основе Марковского процесса с непрерывными кусочно-линейными траекториями. Соответствует апостериорному распределению, но требуется апробация...

[1] Hastings, W.K. (1970) Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications. *Biometrika*. 57 (1): 97–109.

[2] Gilks, W. R.; Best, N. G.; Tan, K. K. C. (1995). Adaptive Rejection Metropolis Sampling within Gibbs Sampling. *Journal of the Royal Statistical Society. Series C (Applied Statistics)*. 44 (4): 455–472

[3] Bierkens, J., Fearnhead, P. and Roberts, G. O. (2017). Supplement to The Zig-Zag Process and Super-Efficient Sampling for Bayesian Analysis of Big Data.



Преимущества байесовского подхода.



Преимущества Байесовского подхода^[1]:

- Масштабируемость модели усвоения данных на большие по объему выборки.
- Гибкость модели усвоения данных: изучается связь между распределениями разных параметров.
- Возможность построения сложных вероятностных моделей из простых: результат байесовского вывода - апостериорное распределение - используется как априорное в новой вероятностной модели.
- Регуляризация процедуры машинного обучения: априорное распределение вводится на те параметры алгоритма, которые настраиваются в ходе процедуры обучения.
- Возможность построения модели с латентными (скрытыми или пропущенными) переменными.

[1] Д. Ветров. Нейробайесовский подход к задачам машинного обучения. <https://habr.com/company/yandex/blog/321434/>



Параллельный генератор псевдослучайных чисел и библиотека PARMONC



Известные параллельные генераторы
псевдослучайных чисел

Распределительный способ
получения псевдослучайных чисел

Различные архитектуры супер-ЭВМ

Тестирование параллельного
генератора

Реализация в библиотеке PARMONC в
ЦКП ССКЦ СО РАН

**Мультипликативный 128-битный
генератор псевдослучайных чисел
с периодом 10^{38} :**

$$u_0 = 1, u_{k+1} \equiv u_k A \pmod{2^r}, \alpha_k = u_k 2^{-r},$$
$$r = 128, A \equiv 5^{100109} \pmod{2^{128}}.$$

Марченко М.А. Свидетельство № 2016616687 РФ. PARMONC - библиотека для реализации технологии распределённого численного статистического моделирования на массивно-параллельных вычислительных системах. 2016



Большие вычислительные задачи финансовой математики



Численное моделирование цен финансовых активов с помощью стохастических дифференциальных моделей ценовых рядов.

- Классический подход – обработка данных в виде n -минутных баров.
Пример: обработка годовых данных в виде 5-минутных баров - оценка свободных параметров модели ценового ряда и прогнозирование цены закрытия для минутных баров на дневную торговую сессию^[1,2].
- Однако, эта упрощенная модель ценового ряда, обусловленная недостаточной вычислительной мощностью вычислительных систем!
- **Вывод – нужны адекватные подробные модели в потиковом формате.**
Т.о. моделируется реальный ценовой ряд, а не упрощенная модель ряда.

[1] Новиков А.В. Математические модели и вычислительные алгоритмы для решения некоторых задач финансовой математики. Диссертация на соискание ... к.ф.-м.н. Новосибирск. 2003.

[2] Artemiev S.S., Novikov A.V., Ogorodnikov V.A. Mathematical aspects of computer-aided share trading. RJNAM, 2002.



Большие вычислительные задачи финансовой математики



**Пример: данные акции Сбербанк ПАО (SBER)
с биржи ММВБ (период наблюдения 2017-2018):**

Показатель	Значение
Количество торговых сессий в год	250 дн.
Продолжительность торговой сессии	525 мин.
Среднее количество тиков за торговую сессию	90 000
Среднее количество тиков за час торговой сессии	10 200
Среднее количество тиков в 5 минутном баре	852

- ПО TechAn позволяет провести моделирование SBER на ускорителе Intel Xeon Phi на порядок быстрее, чем на оборудовании предыдущего поколения.
- Вычислительная система из 64 Intel Xeon Phi позволит моделировать ценовой ряд в потоковом формате, что существенно повысит точность и скорость получения прогноза, что важно при разработке торговых стратегий в режиме реального времени.



Вычислительный комплекс PetaCube



Универсальный гетерогенный вычислительный комплекс высокой плотности PetaCube.

Комплекс использует комплектующие от ведущих производителей: **AMD, Intel, NVIDIA**.

Стандартная серверная стойка 42U – около 1 куб. м.:

- Оборудование с производительностью до 1 Петафлопс
 - для вычислений с двойной точностью (DP),
 - 2 Петафлопс – с одинарной (SP),
 - 4 Петафлопс - с половинной (SP/2),
 - 16 Петафлопс - тензорные вычисления.
- Оперативная память - от 96 Гигабайт до 30 Терабайт.
- Дисковый массив с объемом до 1 Петабайта.

Потребление электроэнергии - до 48 кВт.





Вычислительный комплекс PetaCube



Универсальность комплекса обусловлена возможностями:

- удовлетворения потребностей научных организаций в решении широкого класса прикладных задач на вычислительных системах с массивно-параллельной и гетерогенной архитектурами;
- решения широкого класса вычислительных задач с разным типом и уровнями параллелизма - от распределенных, массивно-параллельных вычислений до приложений с многоуровневым параллелизмом;
- исполнения программ с различными технологиями параллельного программирования - MPI, OpenMP, OpenCL, CUDA и тензорными вычислениями (NVIDIA Volta);
- выполнения вычислений с двойной (DP), одинарной (SP) и половинной (SP/2) точностью для всех технологий программирования, а также т.н. тензорных вычислений на ускорителях NVIDIA Volta.



Вычислительный комплекс PetaCube



- Ключевой особенностью комплекса PetaCube является возможность его **гибкой автоматической настройки под конкретную задачу** в многопользовательском режиме и масштабируемости.
- Работа комплекса начинается с **замера потребностей разных пользовательских задач в режиме реального времени.**
- На основе проведенных замеров строится архитектура вычислительного комплекса PetaCube **с оптимальными характеристиками** по параметрам:
 - вычислительная мощность на ватт
и (или)
 - вычислительная мощность на стоимость
и (или)
 - вычислительная мощность на объем занимаемого пространства



Вычислительный комплекс PetaCube



Моделирования взаимодействия электронного пучка с плазмой*:

- Моделирование в трехмерной постановке генерации терагерцового излучения, наблюдаемого в многопробочной магнитной ловушке ГОЛ-3 (ИЯФ СО РАН).
- Система уравнений Максвелла и Власова (отдельно для ионной и электронной компонент плазмы).
- Уравнения Максвелла решаются методом конечных разностей во временной области, уравнение Власова — методом частиц в ячейках.
- Сетка, на которой решаются уравнения Максвелла, разделена на одинаковые подобласти по одной из координат.
- С каждой подобластью связана группа процессоров или один графический ускоритель (GPU).

*** Благодарим А.В. Снытникова (ИВМиМГ СО РАН) за постановку задачи и расчеты!!**



Вычислительный комплекс PetaCube



Время расчета на различных GPU для тестовой задачи:

- размер сетки $100 * 6 * 6$ узлов,
- 6,4 млн. модельных частиц.

Вычисления производили на CUDA v9.2.

Замеры времени для процедуры перемещения частиц:

	Время, мс
Kepler	402,2
Pascal	8,77
Volta	6,58



Вычислительный комплекс PetaCube



Заявленные производителем показатели:

	Заявленная макс. производительность (DP), Терафлопс	Макс. возможное энергопотребление, Ватт	Теоретическая производительность на ватт, Гигафлопс/Ватт
Nvidia	7,0	250	28,0
AMD	2,5	235	10,64
Intel	2,8	300	9,33

Показатели по High Performance Linpack (HPL):

	Производительность (DP), Терафлопс	Энергопотребление, Ватт	Производительность на ватт, Гигафлопс/Ватт
Nvidia	4,2	160	26,25
Intel	1,8	260	6,92
AMD	1,5	220	6,82



Вычислительный комплекс PetaCube



Стоимость AMD FirePro принимаем за 1,0, тогда Intel - 2,8 Nvidia - 8,5.

Стоимость/производительность для задачи HPL:

	Цена/Терафлопс
AMD	0,67
Intel	1,56
Nvidia	2,02

Вывод: для разных критериев эффективности – разные оптимальные конфигурации.



Спасибо за внимание!