

PL/CUDA

~Fusion of HPC Grade Power with In-Database Analytics~

The PG-Strom Project / NEC OSS Promotion Center
KaiGai Kohei <kaigai@ak.jp.nec.com>



KaiGai Kohei

- tw: @kkaigai
- <https://github.com/kaigai>

PostgreSQL

- SELinux, FDW, CustomScan, ...

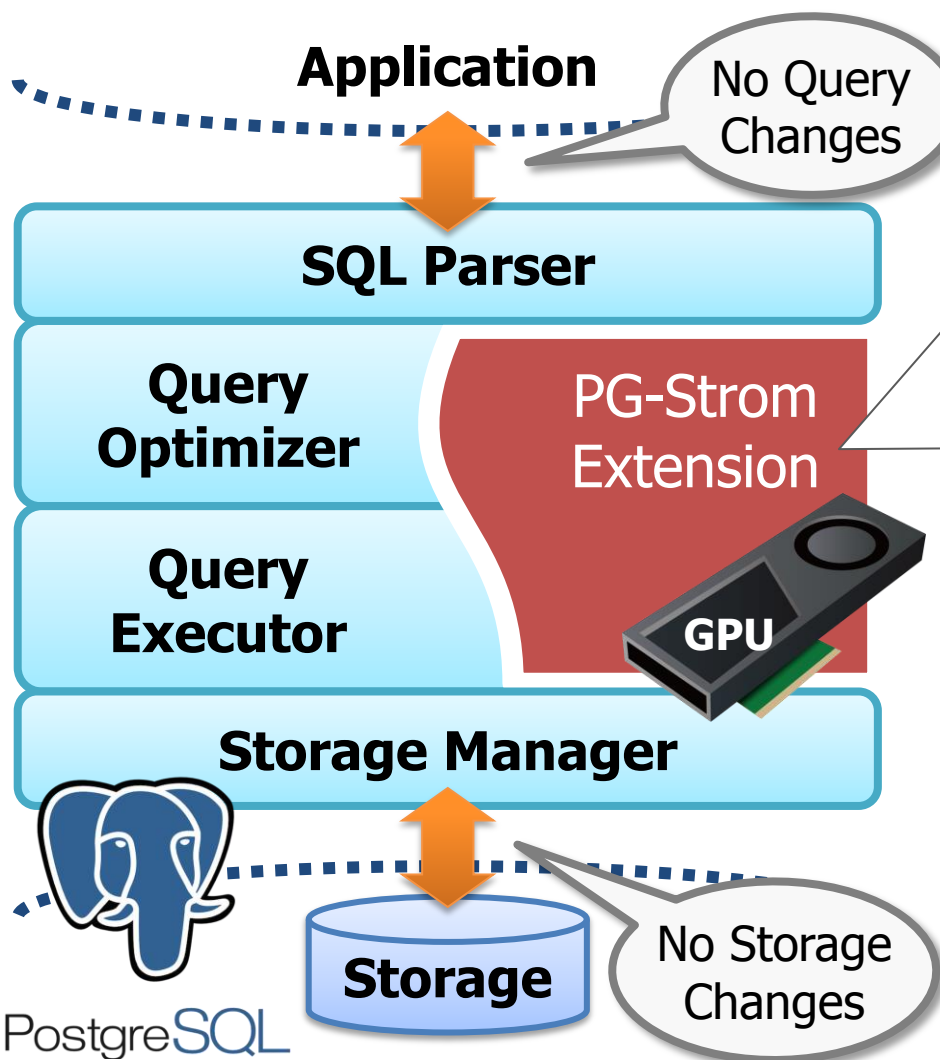
PG-Strom

- GPUを用いたPostgreSQL向け
高速化モジュールの作者

お仕事

- NEC OSS推進センタ
- SW開発／ビジネス開拓

PG-Strom概要 (1/2) – アーキテクチャ



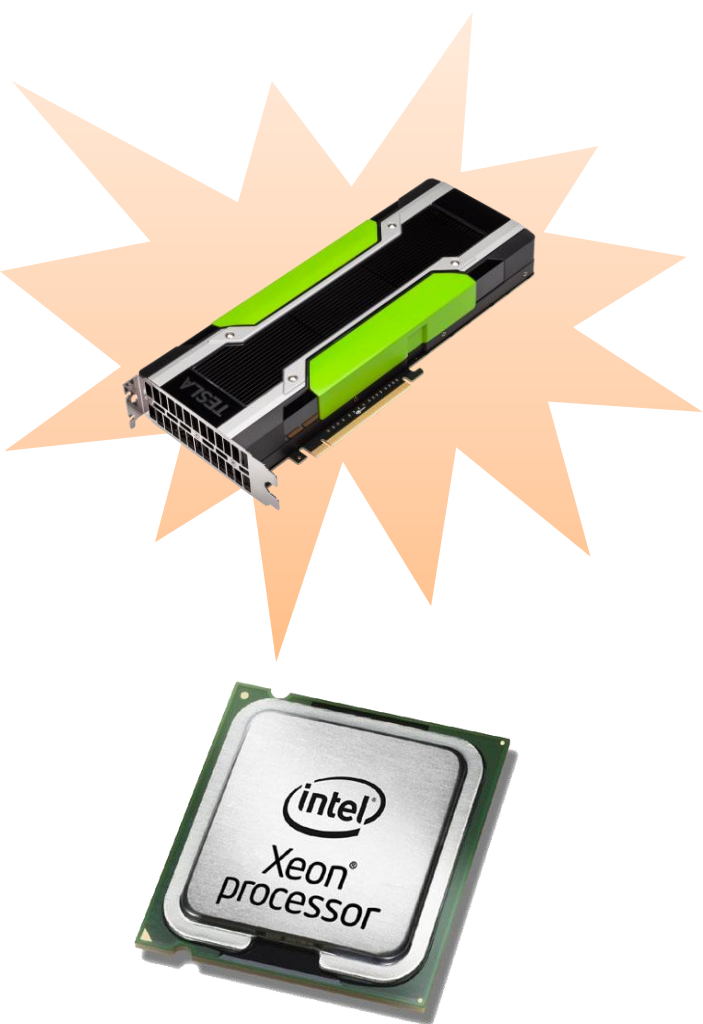
■ 機能

- SQLからGPUコードを自動生成。
- GPUによる非同期/超並列実行
- WHERE句、JOIN、GROUP BY、Projectionに対応

■ 利点

- 数千演算コアを用いた透過的なアクセラレーション
- 解析系ワークロードに対する低コストのソリューション

GPU (Graphic Processor Unit) の特徴



	GPU	CPU
Model	NVIDIA Tesla P100	Intel Xeon E5-2699v4
Architecture	Pascal	Broadwell
Launch	Q2-2016	Q1-2016
# of transistors	15billion	7.2billion
# of cores	3584 (simple)	22 (functional)
core clock	1.126GHz ~1.303GHz	2.20GHz ~3.60GHz
Perk FFLOPS (FP32)	9.3 TFLOPS	1.2 TFLOPS (with AVX2)
DRAM Size	16GB (HBM2)	max 1.5TB (DDR4)
Memory Band	732GB/s	76.8GB/s
Power Consumption	250W	145W

PG-Strom概要 (2/2) – GPUバイナリの自動生成

```
QUERY:  SELECT cat, count(*), avg(x) FROM t0
        WHERE x between y and y + 20.0 GROUP BY cat;
```

例) WHERE句での計算式を
CUDAプログラムに変換。

```
        :
STATIC_FUNCTION(bool)
gpupreagg_qual_eval(kern_context *kcxt,
                    kern_data_store *kds,
                    size_t kds_index)
{
    Reference to input data
    pg_float8_t KPARAM_1 = pg_float8_param(kcxt,1);
    pg_float8_t KVAR_3 = pg_float8_vref(kds,kcxt,2,kds_index);
    pg_float8_t KVAR_4 = pg_float8_vref(kds,kcxt,3,kds_index);

    return EVAL((pgfn_float8ge(kcxt, KVAR_3, KVAR_4) &&
                pgfn_float8le(kcxt, KVAR_3,
                pgfn_float8pl(kcxt, KVAR_4, KPARAM_1))));
}
        :
```

SQL expression in CUDA source code

Just-in-time
Compile



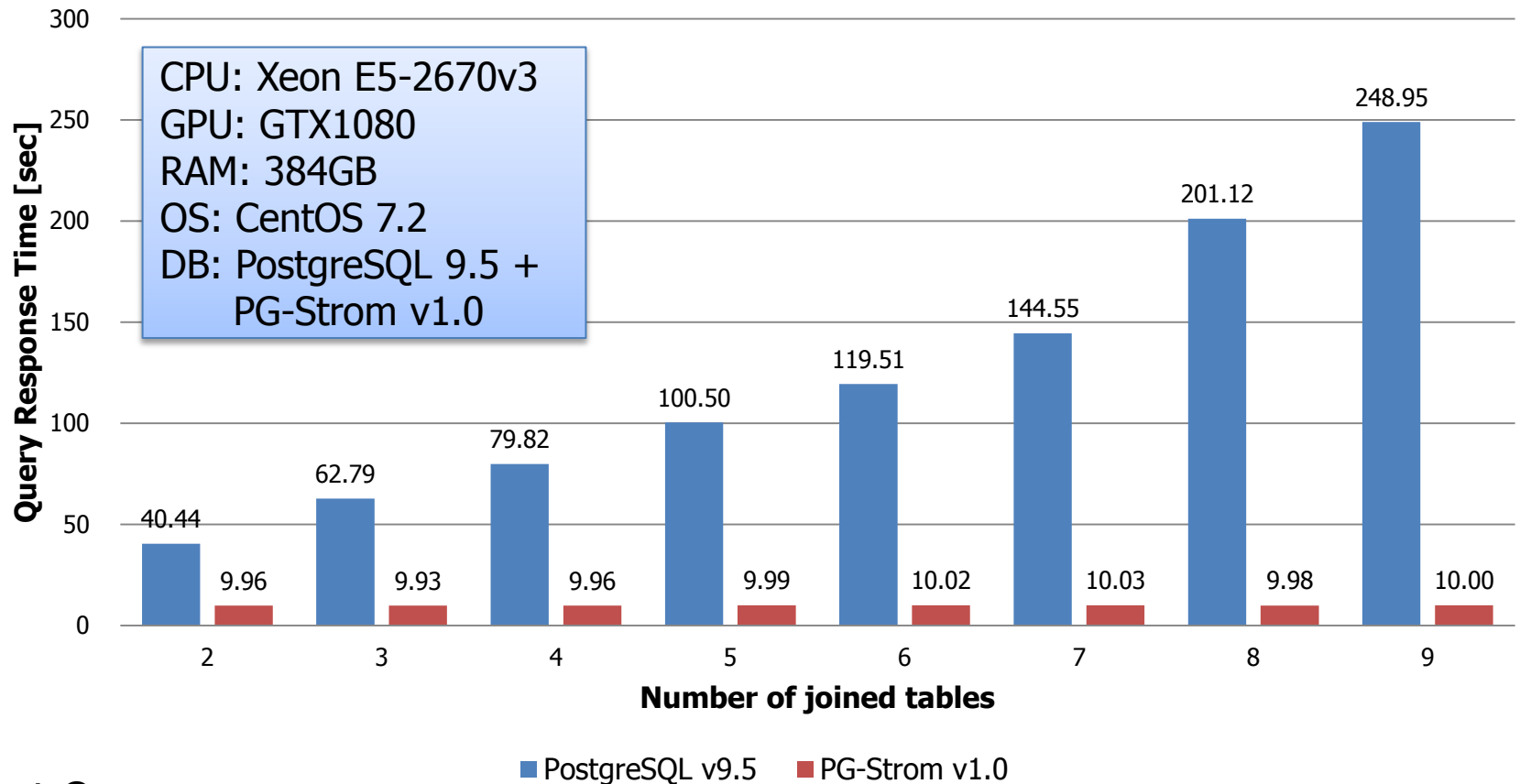
Run-time
Compiler
(nVRTC)



Parallel
Execution

GPUによるSQL実行高速化の一例

PG-Strom microbenchmark with JOIN/GROUP BY

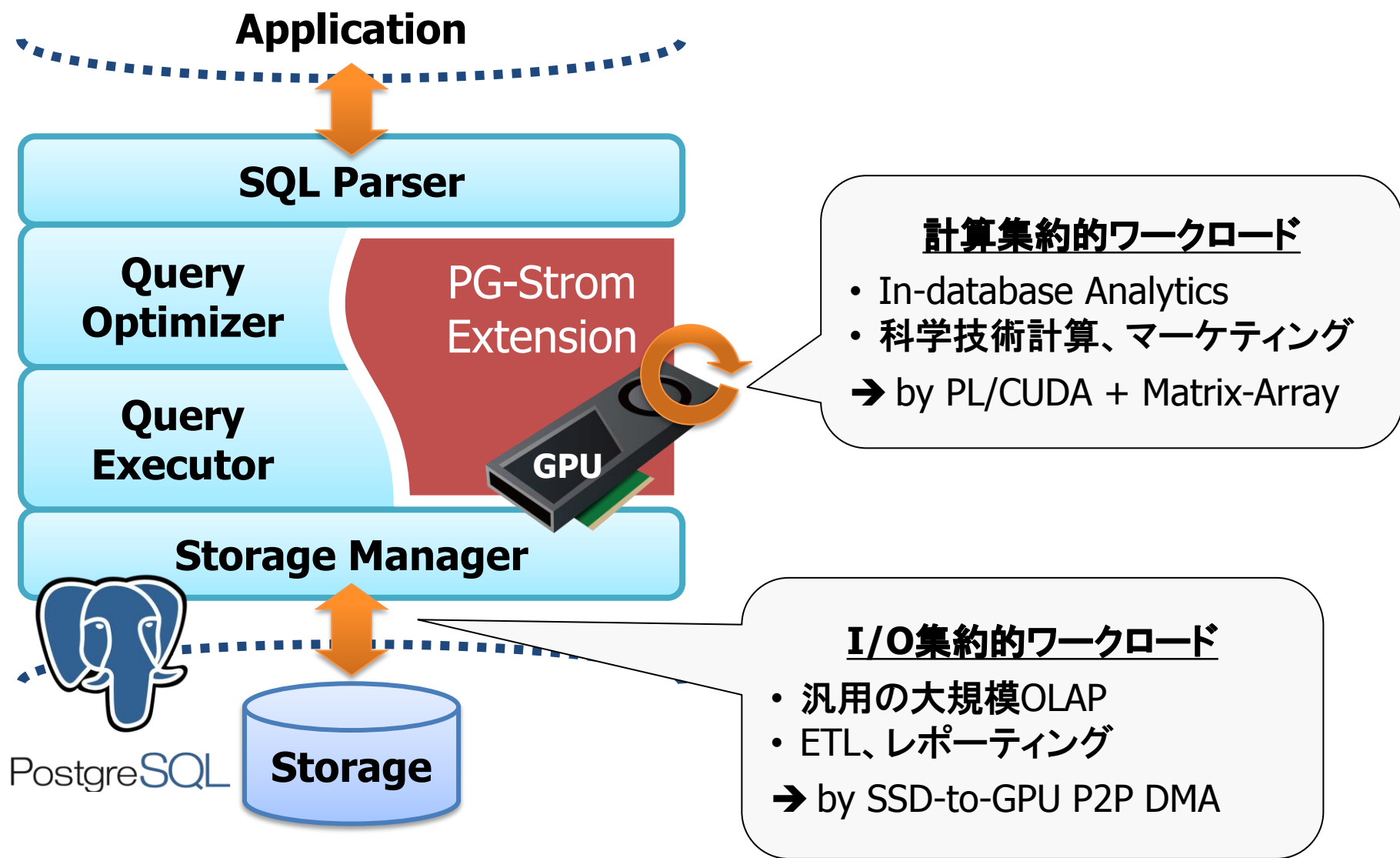


Test Query:

```
SELECT cat, count(*), avg(x)
  FROM t0 NATURAL JOIN t1 [NATURAL JOIN t2 ...]
 GROUP BY cat;
```

✓ t0 contains 100M rows, t1...t8 contains 100K rows (like a start schema)

v1.0開発過程におけるユーザからのフィードバック



Introduction of PL/CUDA



Reference) Query for MAX-MIN method

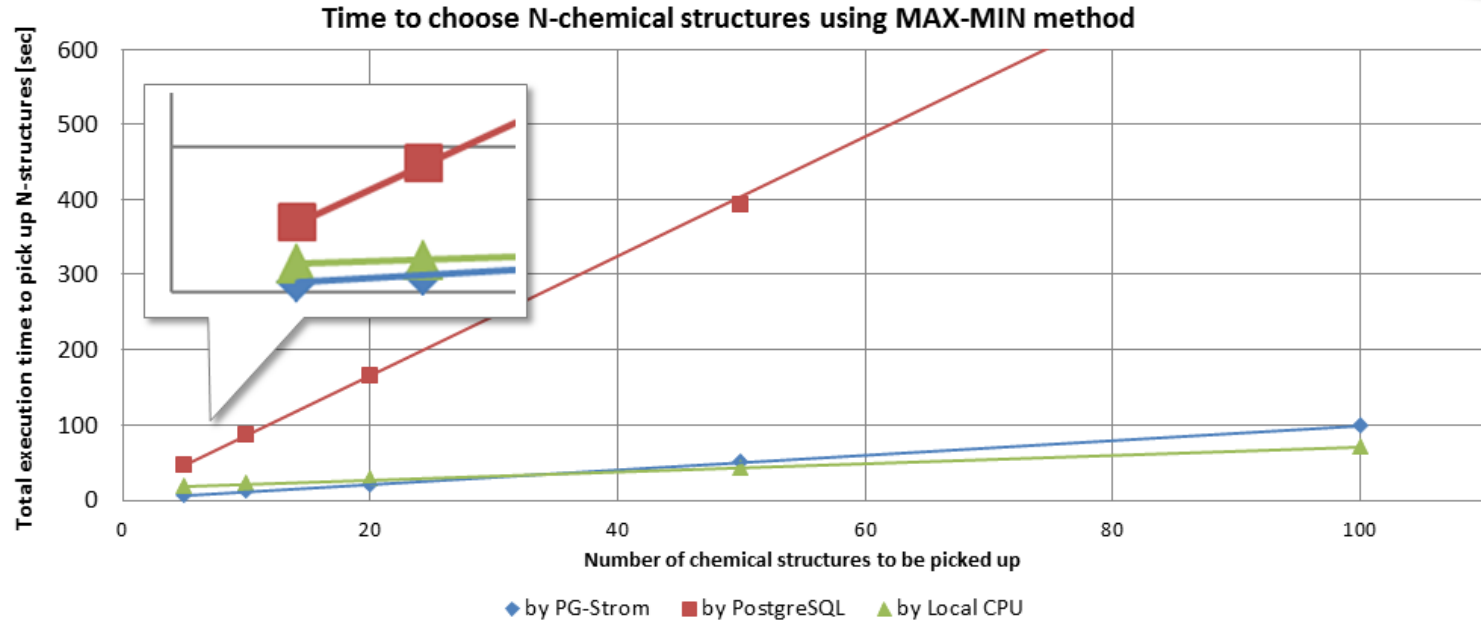
Apr-2016

```
WITH next_item AS (  
  INSERT INTO pg_temp.subset_table (  
    SELECT r.*  
      FROM mqn r,  
           (SELECT id FROM pg_temp.dist_table  
            ORDER BY dist DESC LIMIT 1) d  
      WHERE r.id = d.id)  
  RETURNING *  
)  
SELECT r.id, LEAST(d.dist, sqrt((r.c1 - n.c1)^2 +  
                               (r.c2 - n.c2)^2 +  
                               :  
                               (r.c41 - n.c41)^2 +  
                               (r.c42 - n.c42)^2)) dist  
  
  INTO pg_temp.dist_table_new  
  FROM pg_temp.dist_table d,  
       next_item n, mqn r  
  WHERE r.id = d.id
```

Hot point of the SQL query

Benchmark Results – MAX-MIN Method

Apr-2016



Summary

- 10M rows, 211MB in total
- workload characteristics: $W_{I/O} \ll W_{CPU}$
- If no GPU support, calculation in RDBMS cannot be an option.
- PG-Strom recorded similar performance with download + R-script.

問題① – SQLでアルゴリズムを記述する人なんていない。

- そもそも、アルゴリズムの大半は手続き型言語を前提として開発されている。
- ユーザがCUDAでアルゴリズムの核を記述する必要がないとしても、これは権局、SQLのパズルを考えながらアルゴリズムのロジックを記述しているのと同じ事。

問題② – 性能上のメリットは本当にあった？

- Min-Max法の距離計算において、確かにPG-Stromの実行性能はPostgreSQLを遥かに上回っているが、そもそも、この種の計算をPostgreSQLで行っている人っていないんじゃないの？
- GpuProjectionの性能は、このアルゴリズムを処理するために設計されたCPU版の外部アプリの性能と概ね同等だった。なぜ？
 - ✓ SQL互換性に由来する非効率性
 - ✓ PostgreSQLの行フォーマットに由来する非効率性

解決策 – PL/CUDA + Array-Matrix

PL/CUDA

手動での最適化手段

```
CREATE FUNCTION my_logic(matrix, matrix)
RETURNS vector
AS $$
```

ユーザ定義のCUDAコードブロック

```
$$ LANGUAGE 'plcuda';
```

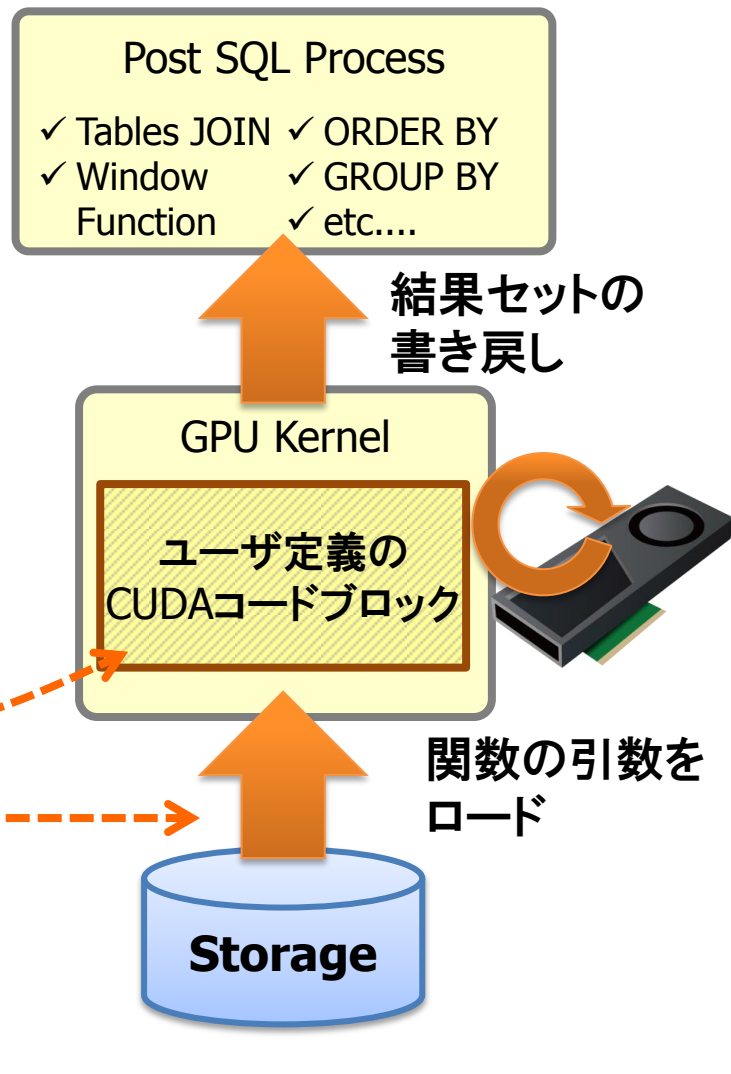
Array-Matrix

非NULLの2次元配列を“行列”と解釈

$$\begin{bmatrix} a_1 & \cdots & d_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_N & \cdots & d_N \end{bmatrix} \quad \text{4列N行 行列}$$

ArrayType ヘッダ

a_1	a_2	...	a_N	b_1	b_2	...	b_N	c_1	c_2	...	c_N	d_1	d_2	...	d_N
-------	-------	-----	-------	-------	-------	-----	-------	-------	-------	-----	-------	-------	-------	-----	-------



PL/CUDA関数定義の例

```
CREATE OR REPLACE FUNCTION
knn_gpu_similarity(int, int[], int[])
RETURNS float4[]
AS $$
```

CUDA code block

```
#plcuda_begin
cl_int      k = arg1.value;
MatrixType *Q = (MatrixType *) arg2.value;
MatrixType *D = (MatrixType *) arg3.value;
MatrixType *R = (MatrixType *) results;
:
nloops = (ARRAY_MATRIX_HEIGHT(Q) + (part_sz - k - 1)) / (part_sz - k);
for (loop=0; loop < nloops; loop++) {
    /* 1. calculation of the similarity */
    for (i = get_local_id(); i < part_sz * part_nums; i += get_local_size()) {
        j = i % part_sz;      /* index within partition */
        /* index of database matrix (D) */
        dindex = part_nums * get_global_index() + (i / part_sz);
        /* index of query matrix (Q) */
        qindex = loop * (part_sz - k) + (j - k);
        values[i] = knn_similarity_compute(D, dindex, Q, qindex);
    }
}
:
#plcuda_end

$$ LANGUAGE 'plcuda';
```

どのようにGPUカーネルを起動するか

引数チェックのためのヘルパー関数

bool func_sc(float[])

```
CREATE OR REPLACE FUNCTION  
my_cuda_func(float[])  
RETURNS int[]  
$$  
#plcuda_sanity_check  
#plcuda_begin
```

ユーザ定義のCUDAコードブロック

```
#plcuda_end  
#plcuda_working_bufsz  
$$ LANGUAGE 'plcuda';
```

bigint func_wb(float[])

バッファサイズ推定のためのヘルパー関数

GPUカーネルの ソースコード

共通の
GPUライブラリ

SQLデータの

ユーザ定義の
CUDAコードブロック

入出力

GPU側へ
引数をロード

ランタイム
コンパイラ

GPU
バイナリ

GPU
カーネル

PL/CUDA
関数の引数

作業用
バッファ

自動生成のGPUコードがベスト性能を出せない理由

```
select x*y from c_test;
```

```
STATIC_FUNCTION(pg_float4_t)
pgfn_float4mul(kern_context *kcxt, pg_float4_t arg1, pg_float4_t arg2)
{
    pg_float4_t result;

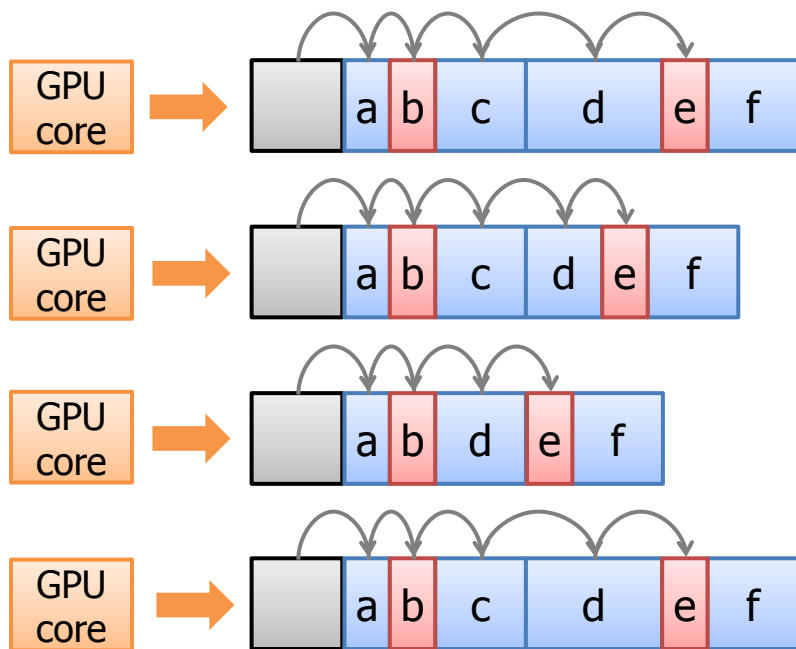
    result.isnull = arg1.isnull | arg2.isnull;
    if (!result.isnull)
    {
        result.value = arg1.value * arg2.value;
        CHECKFLOATVAL(&kcxt->e, result,
                      isinf(arg1.value) || isinf(arg2.value),
                      arg1.value == 0.0 || arg2.value == 0.0);
    }
    return result;
}
```

- ✓ 各変数を参照するたびにNULLチェックが必要
- ✓ 個々の四則演算の度にオーバフローチェックが必要
- ✓ プリミティブな演算を関数呼び出しで実現せざるを得ない

データ形式に起因する非効率さ (1/2)

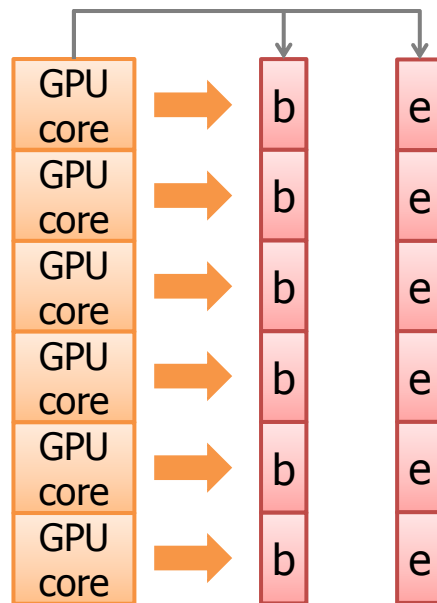
行形式 (Row-oriented) データ

- × 参照されない値も含む
- × データアクセスに複数回のメモリ参照
- PostgreSQLにおける標準のデータ構造



列形式 (Column-oriented) データ

- 参照される列のみをロードできる
- $O(1)$ でデータを参照できる
- × データ形式の変換が必要

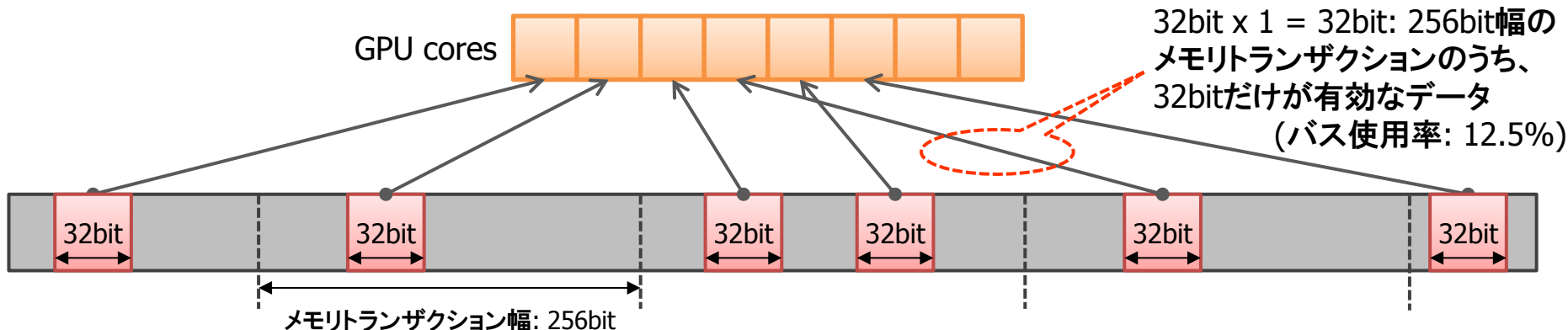


→ 通常のSQLワークロード程度の負荷では、さすがにデータ形式変換のコストを正当化できないが、高度なアルゴリズム処理となると話は変わってくる。

データ形式に起因する非効率さ (2/2)

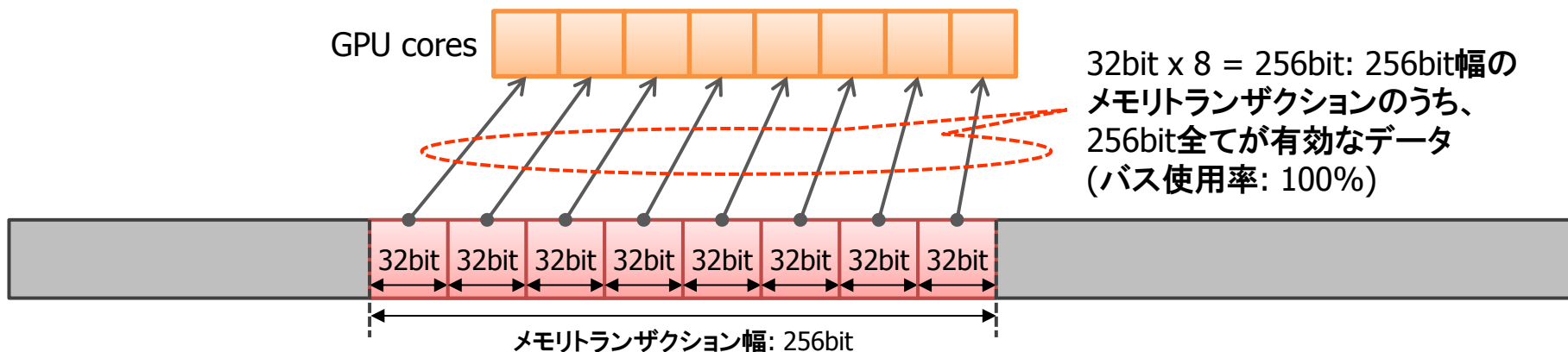
ランダムメモリアクセス (random memory access)

→ メモリランザクション回数が増える一方、メモリバスの使用率は決して高くない。



コアレスメモリアクセス (coalesced memory access)

→ 最小限のメモリアクセスで、メモリバスの使用率を最大化することができる。

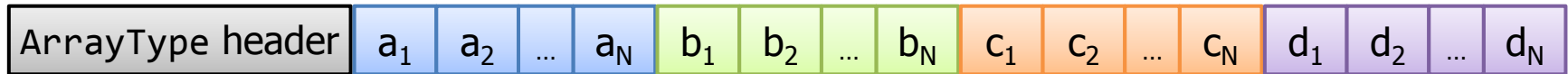


行列表現としての二次元配列

Array-Matrix

非NULL固定長の二次元配列を“行列”と見なす

$$\begin{bmatrix} a_1 & \cdots & d_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_N & \cdots & d_N \end{bmatrix} \quad \text{4列N行行列}$$



`datatype[] array_matrix(variadic datatype[])`

- 入力データを蓄積し二次元配列として出力する集約関数
- `datatype`はint2, int4, int8, float4 および float8 のどれか。
- この二次元配列はNULLを含んではならない。

`SETOF record matrix_unnest(datatype[])`

- m列n行の二次元配列を、m列から成るn個のレコードへと展開する関数。

課題

- 可変長データを扱う事ができない。
- PostgreSQLの可変長データの制約により、最大でも1GBになってしまう。

PL/CUDA関数の呼び出し例

```
SELECT row_number() OVER (),  
float4_as_int4(R.key_id) key_id,  
R.score
```

SQLによる後処理
(JOIN, Window関数)

```
FROM matrix_unnest(  
  (SELECT my_plcuda_function(A.matrix,  
    B.matrix)
```

2つのMatrix-like Arrayを
引数に持つ
PL/CUDA関数の呼出し

```
FROM (SELECT cbind(array_matrix(id),  
  array_matrix(x, y, z)) matrix  
FROM normal_table  
WHERE tag LIKE '%abc%') A,
```

```
(SELECT matrix  
FROM matrix_table) B
```

Matrix-like Arrayを
N個のレコードに再展開

```
)  
) AS R(key_id real, score real)
```

Matrix-like Arrayの生成、
または構築済みのものをロード

```
ORDER BY score DESC  
LIMIT 1000;
```

Case Study

創薬における類似度サーチ



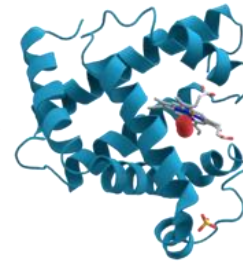
背景 - 病気と候補化合物の関係

ターゲットたんぱく質に "active" である化合物の探索

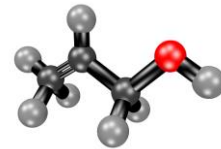
ターゲットの病気



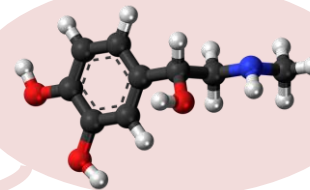
関連するたんぱく質



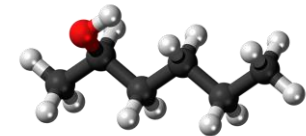
inactive



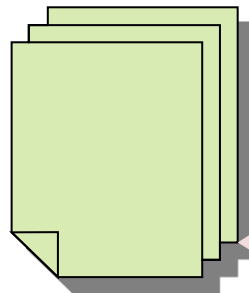
active



active
(毒性あり)



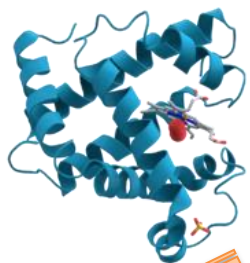
化合物 (= 医薬品の候補)



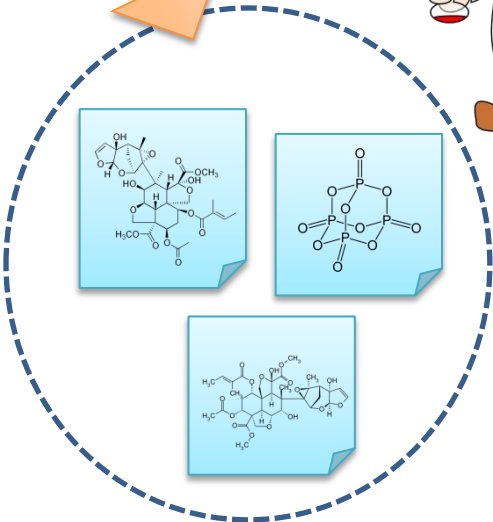
学術論文

k-NN法による類似化合物サーチ (1/2)

ターゲットたんぱく質



学术论文等から
ターゲットたんぱく質に
"active" である化合物
をピックアップ

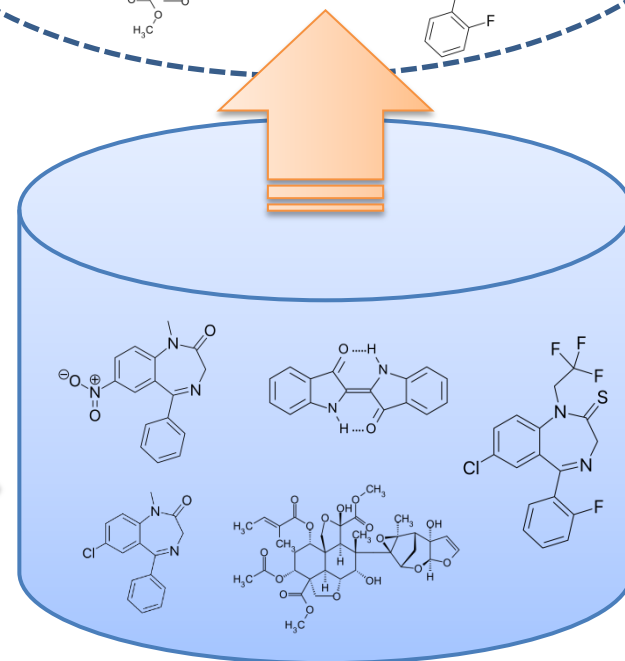
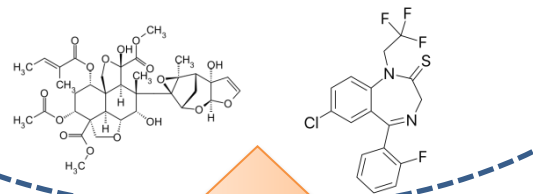


クエリ化合物群
(Q; ~1000件程度)

類似度による
サーチ

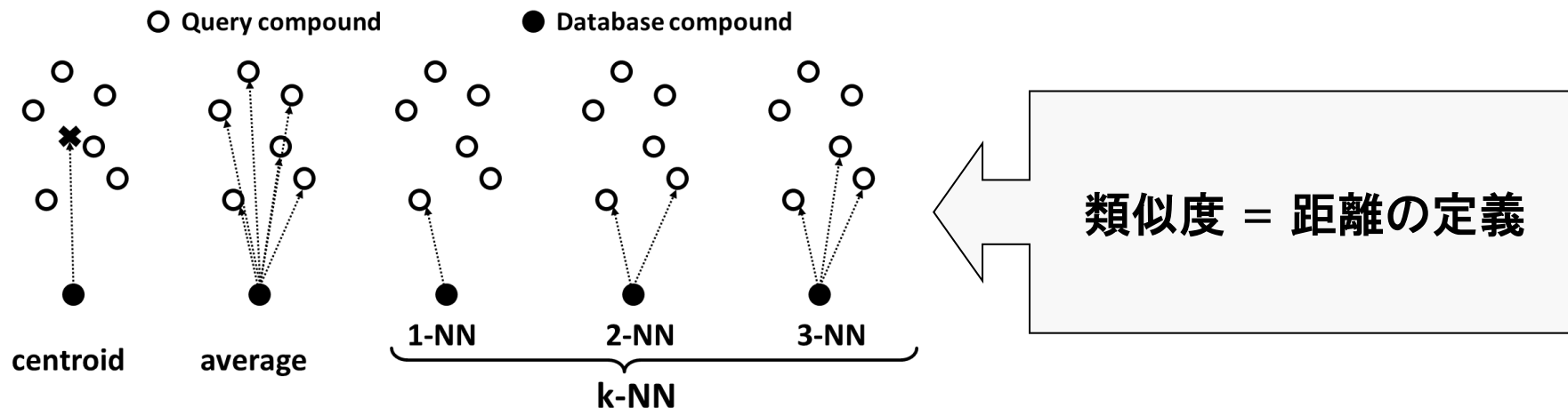


"似た特性の化合物"は
"active"である可能性も高いはず。



データベース化合物群
(D; ~1000万件程度)

k-NN法による類似化合物サーチ (2/2)



Definition of distance on similarity search using multiple reference molecules

化合物のデータ構造

ID	NAME	Fingerprint (1024bit)
1	CHEMBL153534	0000000000010000001000000000000010000000000000100000000000001000000...
2	CHEMBL405398	0000000000000000100100100000...
3	CHEMBL503634	000001000000000000000000000000001000000100000000000000000000000000...
:	:	:

Tanimoto Indexによる類似度の定義:

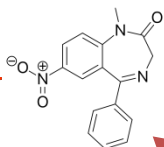
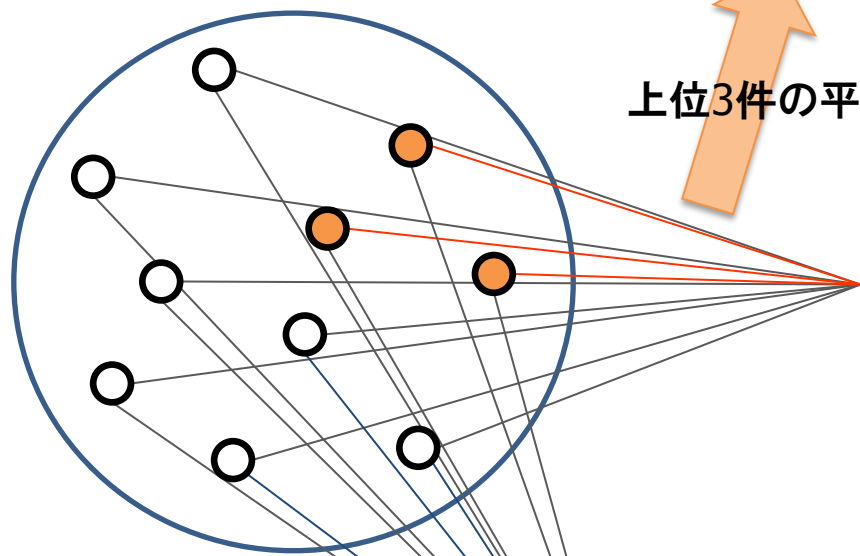
$$Similarity(A, B) = \frac{|A_{FP} \cap B_{FP}|}{|A_{FP} \cup B_{FP}|}$$

必要な計算量

Q: クエリ化合物群
(~1000件程度)

$d(Q, d_i)$: Q~ d_i 間の距離

上位3件の平均

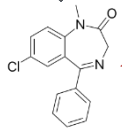


$d_i \in D$

上位3件の平均

$d(Q, d_j)$: Q~ d_j 間の距離

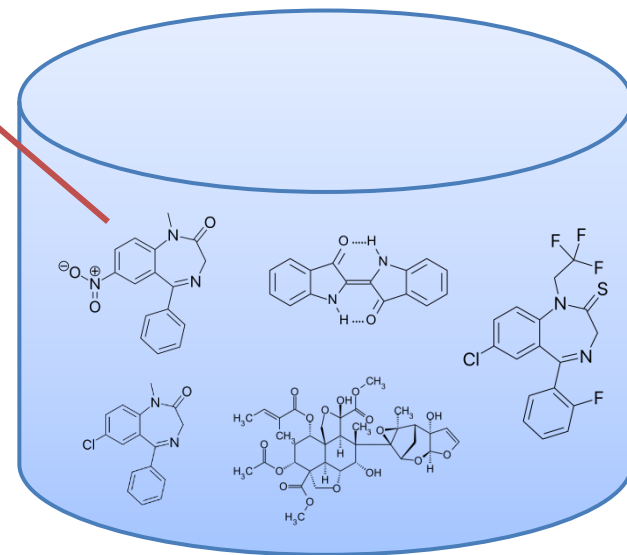
$d_j \in D$



計算量の目安:

$$O(Q \times D) + O(D \times Q \log Q)$$

(距離計算) (ソート+平均値)



データベース化合物群
(D; 10M件程度)

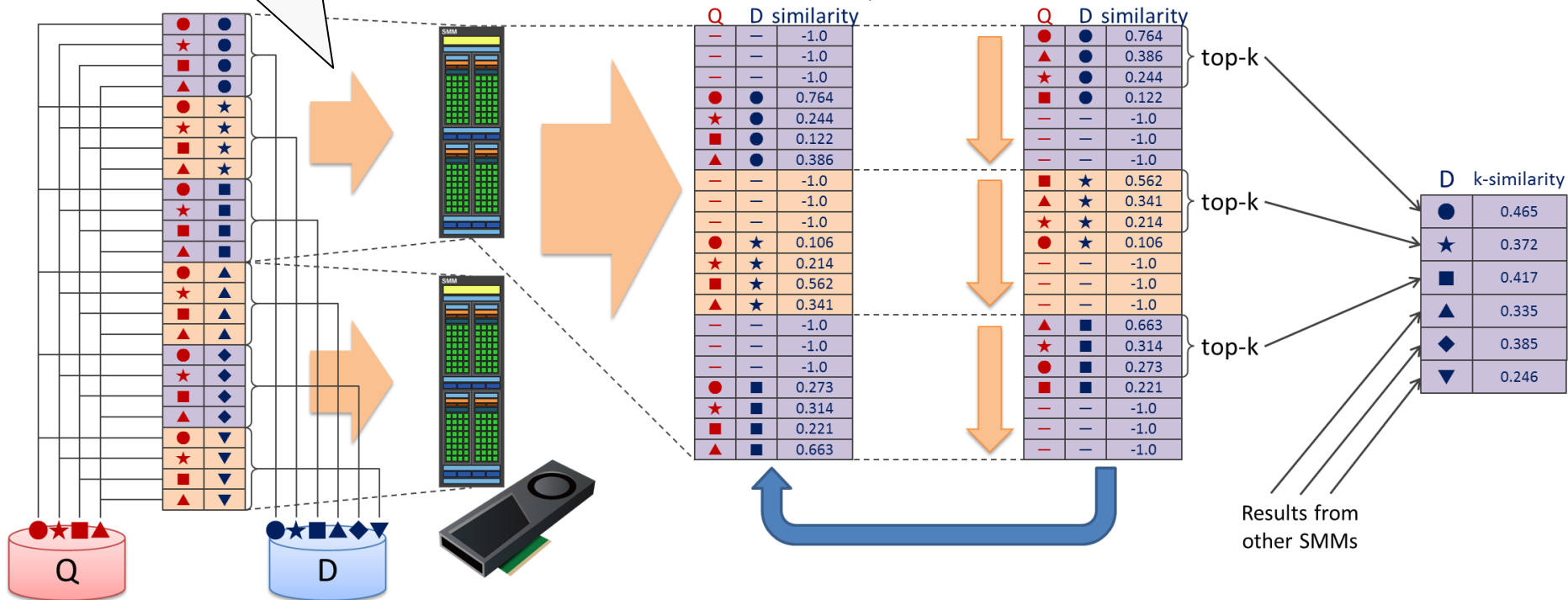
PL/CUDA関数の実装 (1/3)

Step-1

全てのQ×Dの論理的な組み合わせを、複数のパーティションに分割。これらをGPUの実行ユニットであるSMMIに割り当て。

Step-2

各GPUコアがQ化合物群とd化合物間の類似度スコアを算出。
L1キャッシュと同等のレイテンシでアクセス可能な“共有メモリ”にこれを格納



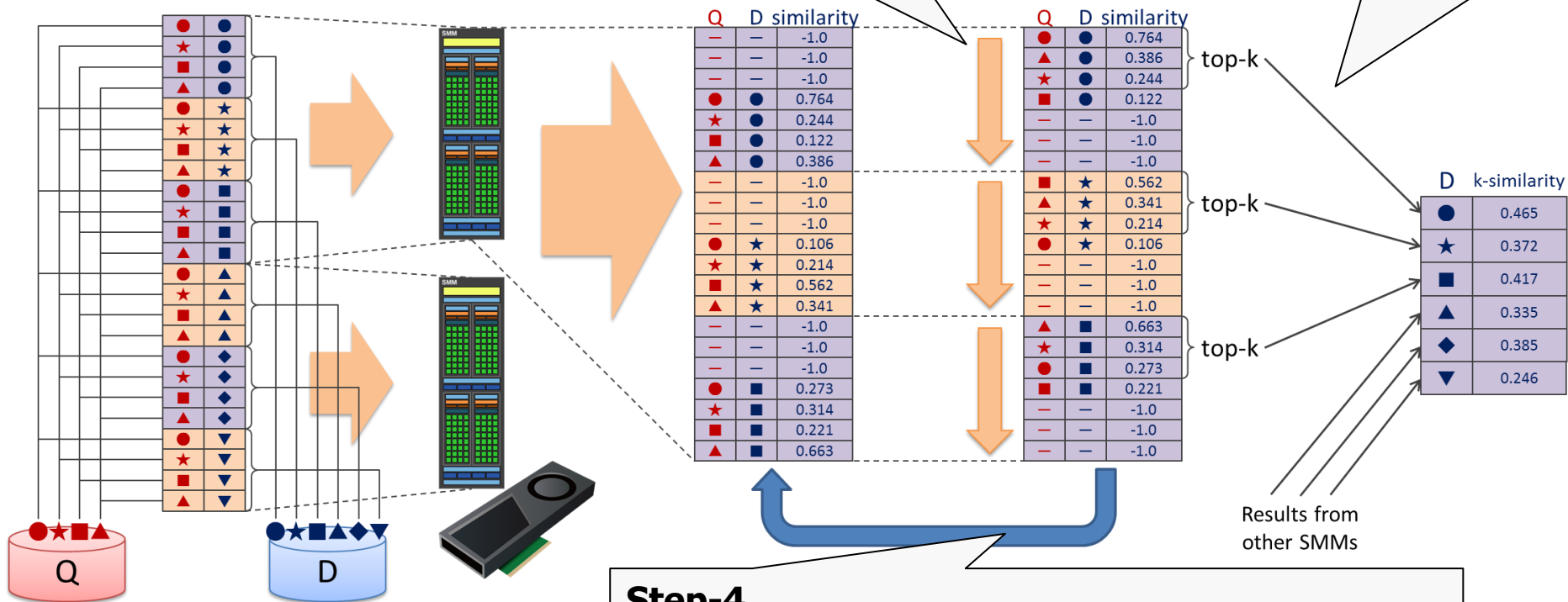
PL/CUDA関数の実装 (2/3)

Step-3

類似度スコアによる Bitonic-Sorting を実行。
ある d 化合物に対する q 化合物が、類似度の順に並ぶことになる。

Step-5

類似度上位k件による平均値を算出し、結果バッファに格納。



Step-4

Q化合物群のサイズが共有メモリよりも巨大な場合、
Step-2以降を繰り返す。

PL/CUDA関数の実装 (3/3)

```
real[]
knn_gpu_similarity(int k,
                  int[] Q,
                  int[] D);
```

-- ID+Similarity of D化合物 (2xN)
-- k-value
-- ID+Fingerprint of Q化合物 (33xM)
-- ID+Fingerprint of D化合物 (33xN)

CREATE OR REPLACE FUNCTION

```
knn_gpu_similarity(int, -- k-value
                  int[], -- ID+bitmap of Q
                  int[]) -- ID+bitmap of D
RETURNS float4[] -- result: ID+similarity
AS $$
```

```
#plcuda_decl
```

```
:
```

```
#plcuda_begin
```

```
#plcuda_kernel_blocksz ¥
```

```
knn_gpu_similarity_main_block_size
```

```
#plcuda_num_threads ¥
```

```
knn_gpu_similarity_main_num_threads
```

```
#plcuda_shmem_blocksz 8192
```

```
cl_int k = arg1.value;
```

```
MatrixType *Q = (MatrixType *) arg2.value;
```

```
MatrixType *D = (MatrixType *) arg3.value;
```

```
MatrixType *R = (MatrixType *) results;
```

```
:
```

```
for (loop=0; loop < nloops; loop++)
```

```
{
/* 1. calculation of the similarity */
```

```
for (i = get_local_id();
```

```
    i < part_sz * part_nums;
```

```
    i += get_local_size()) {
```

```
    j = i % part_sz; /* index within partition */
```

```
    dindex = part_nums * get_global_index()
```

```
        + (i / part_sz);
```

```
    qindex = loop * (part_sz - k) + (j - k);
```

```
    if (dindex < ARRAY_MATRIX_HEIGHT(D) &&
```

```
        qindex < ARRAY_MATRIX_HEIGHT(Q)) {
```

```
        values[i] = knn_similarity_compute(D, dindex,
```

```
            Q, qindex);
```

```
    }
```

```
}
```

```
__syncthreads();
```

```
/* 2. sorting by the similarity for each partition */
```

```
knn_similarity_sorting(values, part_sz, part_nums);
```

```
__syncthreads();
```

```
:
```

```
}
```

```
#plcuda_end
```

```
#plcuda_sanity_check knn_gpu_similarity_sanity_check
```

```
#plcuda_working_bufsz 0
```

```
#plcuda_results_bufsz knn_gpu_similarity_results_bufsz
```

```
$$ LANGUAGE 'plcuda';
```

PL/CUDA関数の呼出し

```
PREPARE knn_sim_rand_10m_gpu_v2(int) -- arg1:@k-value
```

```
AS
```

```
SELECT row_number() OVER (),  
fp.name,  
similarity
```

SQLによる後処理

- 他のテーブルとJOINして化合物ID→化合物名を変換
- window関数による類似度順位の計算

```
FROM (SELECT float4_as_int4(key_id) key_id, similarity
```

Q行列/D行列を引数にとる
PL/CUDA関数の呼出し。

```
FROM matrix_unnest(  
  (SELECT rbind(knn_gpu_similarity($1,Q.matrix,  
                D.matrix))
```

```
FROM (SELECT cbind(array_matrix(id),  
                  array_matrix(bitmap)) matrix  
FROM finger_print_query) Q,
```

PL/CUDA関数の戻り値である
3xNのArray-Matrixを展開し、
通常の3列N行のレコードへ変換

```
(SELECT matrix  
FROM finger_print_10m_matrix) D
```

```
)  
) AS sim(key_id real, similarity real)
```

テーブルから読み出したレコードを
Array-Matrixに変換
(または、事前にビルド)

```
ORDER BY similarity DESC) sim,
```

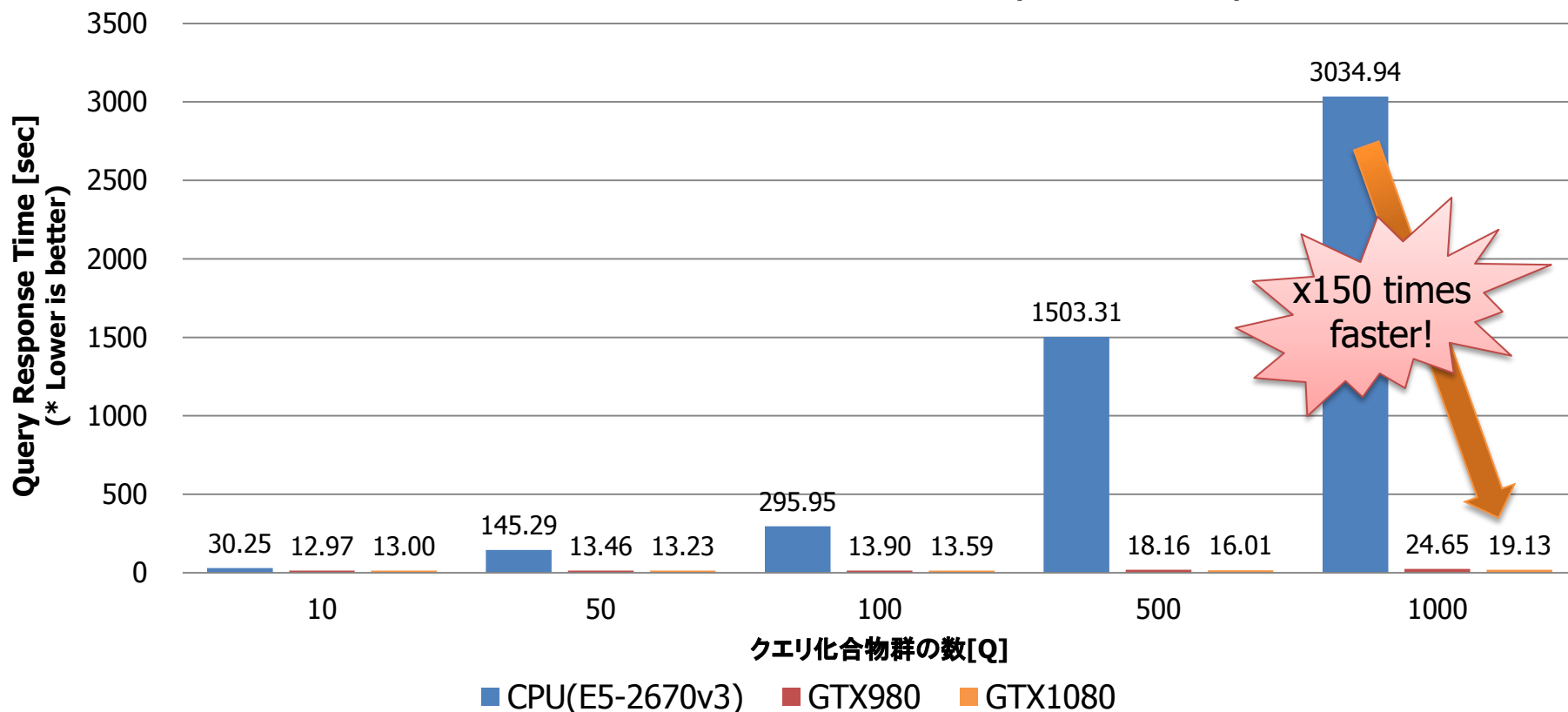
```
finger_print_10m fp
```

```
WHERE fp.id = sim.key_id
```

```
LIMIT 1000;
```

パフォーマンス

k-NN法による類似化合物サーチ応答時間 (k=3, D=10M)



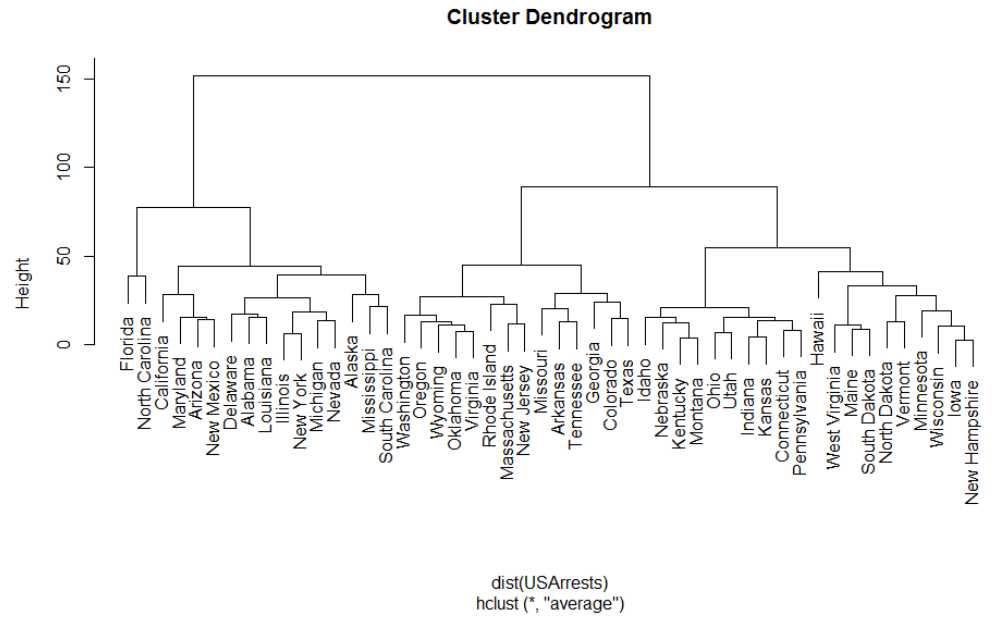
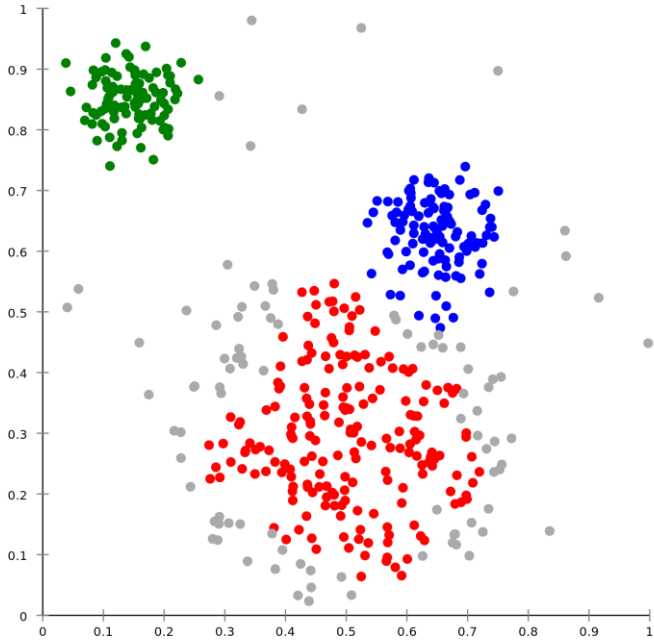
- CPU版は、同等のロジックをC言語によるバイナリ版で実装して比較計測
- D化合物群の数は1000万レコード、Q化合物群の数は10,50,100,500,1000個の5通り
→ 最大で100億通りの組合せを計算。これは実際の創薬ワークロードの規模と同等。
- HW) CPU: Xeon E5-2670v3, GPU: GTX980 / GTX1080, RAM: 384GB
- SW) CentOS7, CUDA8.0, PostgreSQL v9.5 + PG-Strom v1.0

Another Usage

In-databaseでk-meansクラスタリング

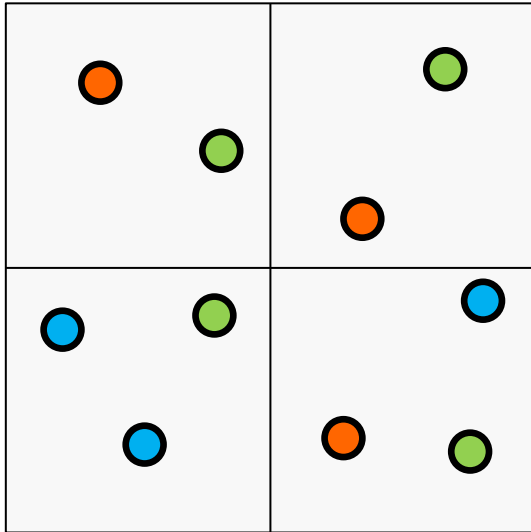


クラスター分析

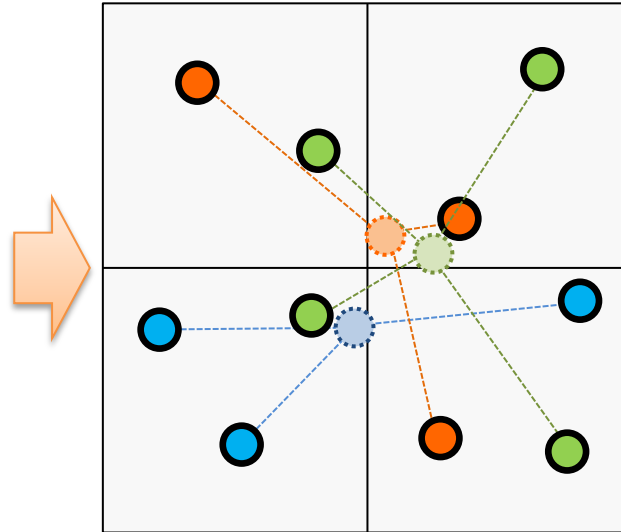


k-meansクラスタリング アルゴリズム

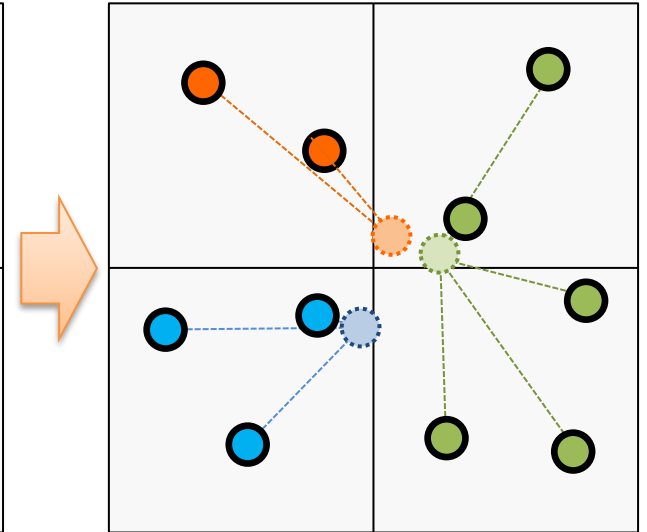
1. ランダムで初期クラスタを割り当て。



2. 各クラスタ毎にクラスタ中心点を計算

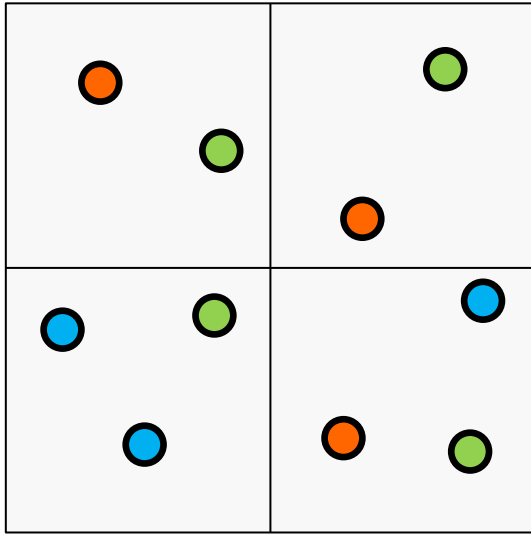


3. 各要素から最も近傍のクラスタ中心点を選択。クラスタ割当てを更新。

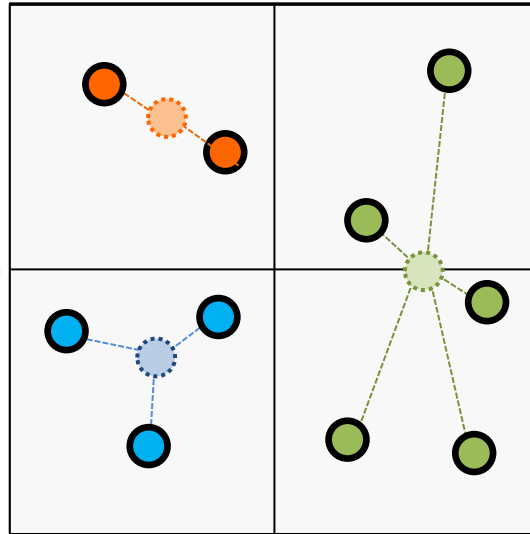


k-meansクラスタリング アルゴリズム

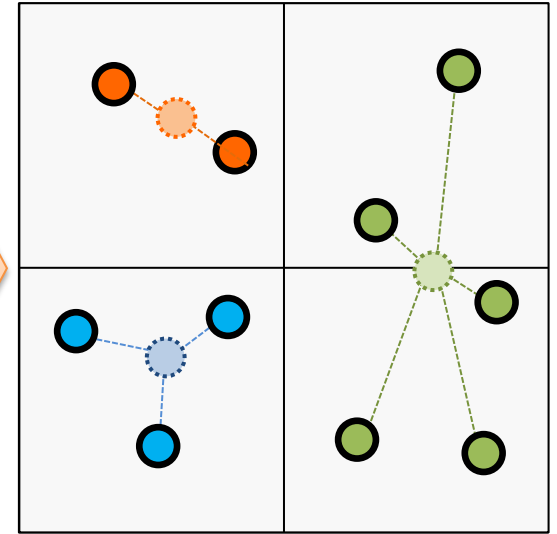
1. ランダムで初期クラスタを割り当て。



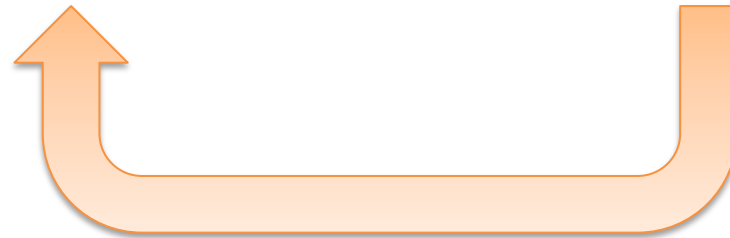
5. 新しいクラスタ割当てに基づいて、クラスタ中心点を再計算



6. クラスタ中心点が変わり、計算終了



4. 収束するか、一定回数に達するまで繰り返し



PL/CUDAによるk-meansクラスタリングの実装

```
CREATE OR REPLACE FUNCTION
gpu_kmeans(real[],      -- ID + Data Matrix
           int,         -- k-value (number of clusters)
           int = 10,    -- max number of iteration
           int = 1)     -- seed of initial randomness
RETURNS int[]
AS $$
#plcuda_decl
:
KERNEL_FUNCTION_MAXTHREADS(void)
update_centroid(MatrixType *D,
                MatrixType *R,
                MatrixType *C)
{
    :
    /* accumulate the local centroid */
    for (did = get_global_id();
         did < nitems;
         did += get_global_size())
    {
        /* pick up the target cluster */
        cid = r_values[nitems + did];
        atomicAdd(&l_cent[cid], 1.0);
        for (index=1; index < width; index++)
            atomicAdd(&l_cent[index * k_value + cid],
                     d_values[index * nitems + did]);
    }
    __syncthreads();
    /* write back to the global C-matrix */
    for (index = get_local_id();
         index < width * k_value;
         index += get_local_size())
        atomicAdd(&c_values[index], l_cent[index]);
}
```

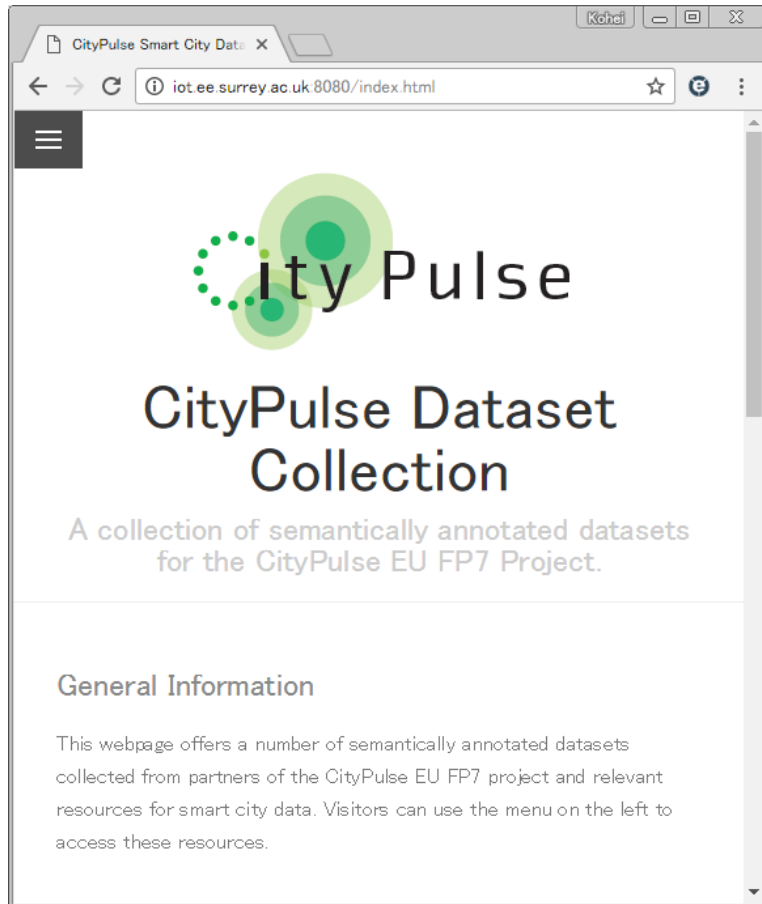
```

:
#plcuda_begin
:
status = pgstromLaunchDynamicKernel4((void *)
                                     setup_initial_cluster,
                                     (kern_arg_t)(D),
                                     (kern_arg_t)(R),
                                     (kern_arg_t)(C),
                                     (kern_arg_t)(r_seed),
                                     nitems, 0, 0);

if (status != cudaSuccess)
    PLCUDA_RUNTIME_ERROR_RETURN(status);

for (loop=0; loop < nloops; loop++)
{
    :
    status = pgstromLaunchDynamicKernelMaxThreads3(
            (void *)kmeans_update_cluster,
            (kern_arg_t)(D),
            (kern_arg_t)(R),
            (kern_arg_t)(C),
            (kern_arg_t)k_value,
            nitems, 0,
            sizeof(cl_int) + sizeof(cl_float));
    if (status != cudaSuccess)
        PLCUDA_RUNTIME_ERROR_RETURN(status);
    :
}
#plcuda_sanity_check    gpu_kmeans_sanity_check
#plcuda_working_bufsz   gpu_kmeans_working_bufsz
#plcuda_results_bufsz   gpu_kmeans_results_bufsz
#plcuda_end
$$ LANGUAGE 'plcuda';
```

k-meansクラスタリングの検証に使用したデータ



データセットの概要

- 測定区間毎に収集された自動車通行量のパブリックデータ
- デンマーク・オーフス市(Arhus, Denmark)における449観測点のデータ。
- データ件数: 1350万件 (2014年2月～6月)

データに含まれるもの

- 平均速度
- 平均観測時間
- 自動車台数
- 測定区間(始点、終点)の緯度・経
- など...

やった事

- 平均速度や自動車台数によって測定区間を5つのカテゴリに分割する。

GPU版k-means関数の呼出し

```
SELECT report_id, k, c
FROM (SELECT report_id, k, c,
row_number() OVER (PARTITION BY report_id
ORDER BY c DESC) rank
FROM (SELECT report_id, k, count(*) c
FROM matrix_unnest(
(SELECT gpu_kmeans ( array_matrix(
int4_as_float4(report_id),
avg_measured_time,
avg_speed,
vehicle_count),
5)
FROM tr_rawdata)
) R(report_id int, k int)
GROUP BY report_id, k
) __summary_1
) __summary_2
WHERE rank = 1;
```

Pick-up most frequent cluster

Run k-means clustering logic

Make a matrix from the raw-data

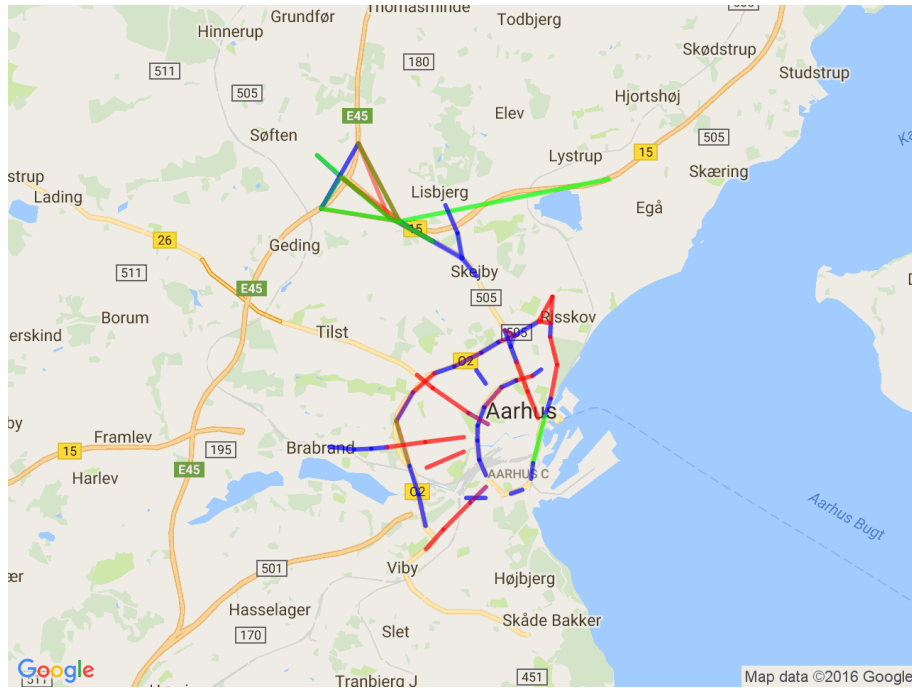
GPU版k-means (1/3) – 全データによるクラスタリング

```
$ wget -O map.png "`psql traffic -At -f ~/traffic.sql`"
```

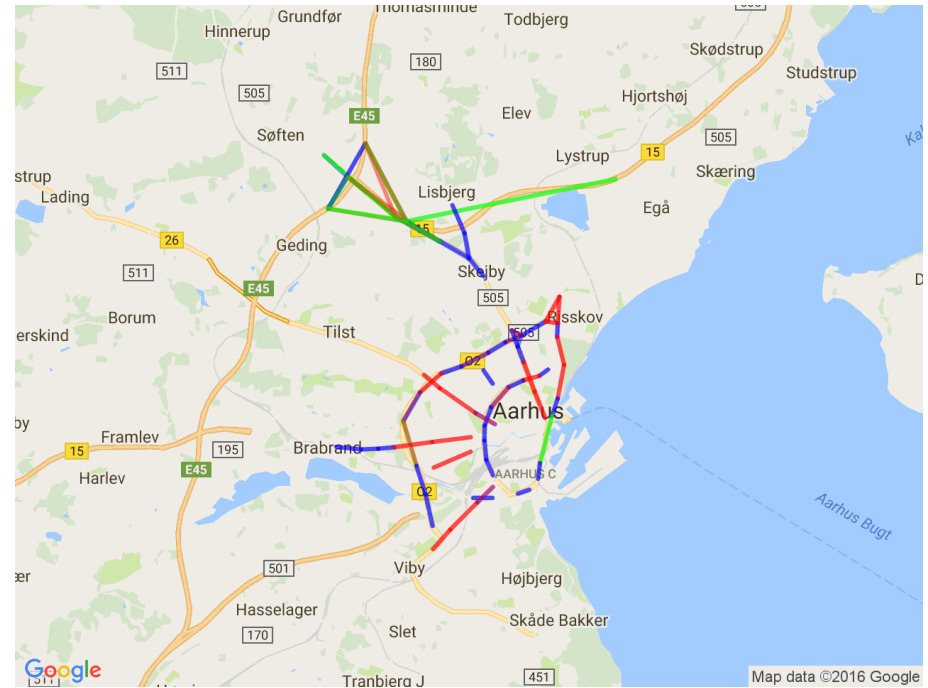


GPU版k-means (2/3) – 日中と夜間

日中 (8-17)

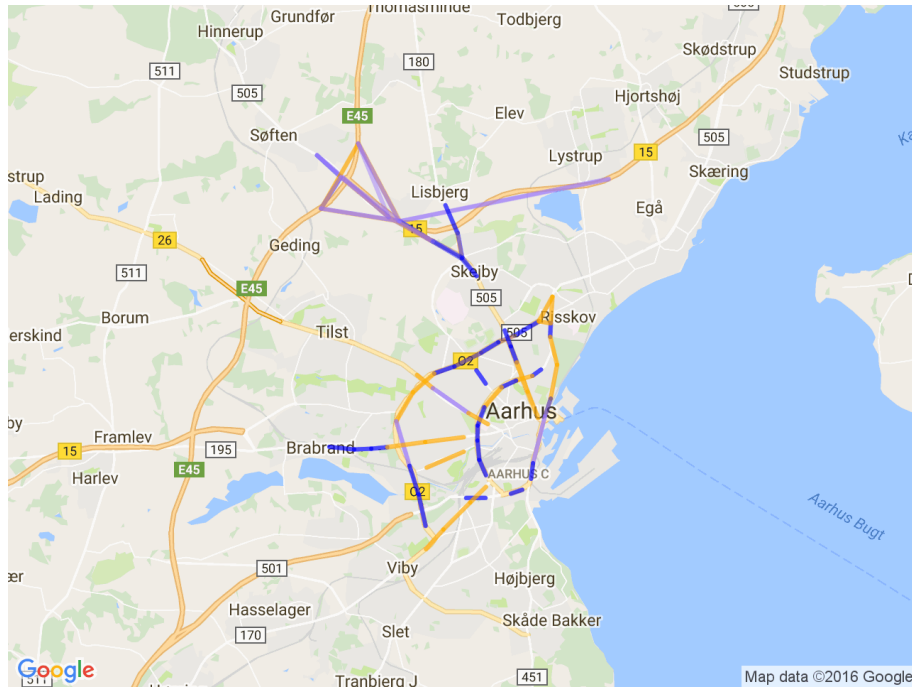


夜間 (18-7)

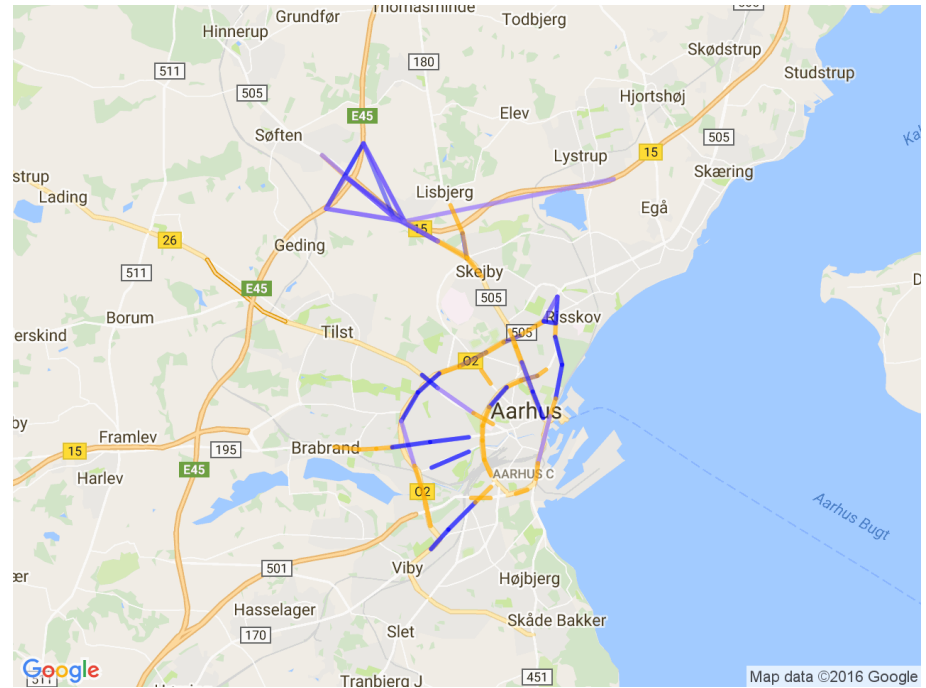


GPU版k-means (3/3) – 平日と週末

平日



週末



GPU版k-means関数の呼出し

```
SELECT report_id, k, c
  FROM (SELECT report_id, k, c,
              row_number() OVER (PARTITION BY report_id
                                ORDER BY c DESC) rank
  FROM (SELECT report_id, k, count(*) c
        FROM matrix_unnest(
          (SELECT gpu_kmeans ( array_matrix(
                                int4_as_float4(report_id),
                                avg_measured_time,
                                avg_speed,
                                vehicle_count),
                                5)
          FROM tr_rawdata
          WHERE extract('hour' from timestamp)
                between 7 and 17
          )
        ) R(report_id int, k int)
  GROUP BY report_id, k
  ) __summary_1
  ) __summary_2
WHERE rank = 1;
```

実は条件句を追加しただけ。
(これがSQLの柔軟性！)

https://madlib.incubator.apache.org/docs/latest/group_grp_km

MADlib 1.9.1

User Documentation for MADlib

- ▼ MADlib
 - ▶ Data Types and Transformations
 - ▶ Model Evaluation
 - ▶ Statistics
 - ▶ Supervised Learning
 - ▶ Time Series Analysis
 - ▼ Unsupervised Learning
 - ▶ Association Rules
 - ▼ Clustering
 - k-Means Clustering**
 - ▶ Topic Modelling
 - ▶ Utility Functions
 - ▶ Early Stage Development
 - ▶ Deprecated Modules

k-Means Clustering

Unsupervised Learning > Clustering

Clustering refers to the problem of partitioning a set of objects according to some problem-dependent measure of *similarity*. In the k-means variant, given n points $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d$, the goal is to position k centroids $c_1, \dots, c_k \in \mathbb{R}^d$ so that the sum of *distances* between each point and its closest centroid is minimized. Each centroid represents a cluster that consists of all points to which this centroid is closest.

Training Function

The k-means algorithm can be invoked in four ways, depending on the source of the initial set of centroids:

- Use the random centroid seeding method.

```
kmeans_random( rel_source,
               expr_point,
               k,
               fn_dist,
               agg_centroid,
               max_num_iterations,
               min_frac_reassigned
             )
```

Contents

- ▼ Training Function
- ▼ Output Format
- ▼ Cluster Assignment
- ▼ Examples
- ▼ Notes
- ▼ Technical Background
- ▼ Literature
- ▼ Related Topics

Generated on Tue Sep 20 2016 11:27:01 for MADlib by [doxygen](#) 1.8.10

CPUによるk-meansの代表的実装として、MADLib版 `kemans_random()` 関数を使用

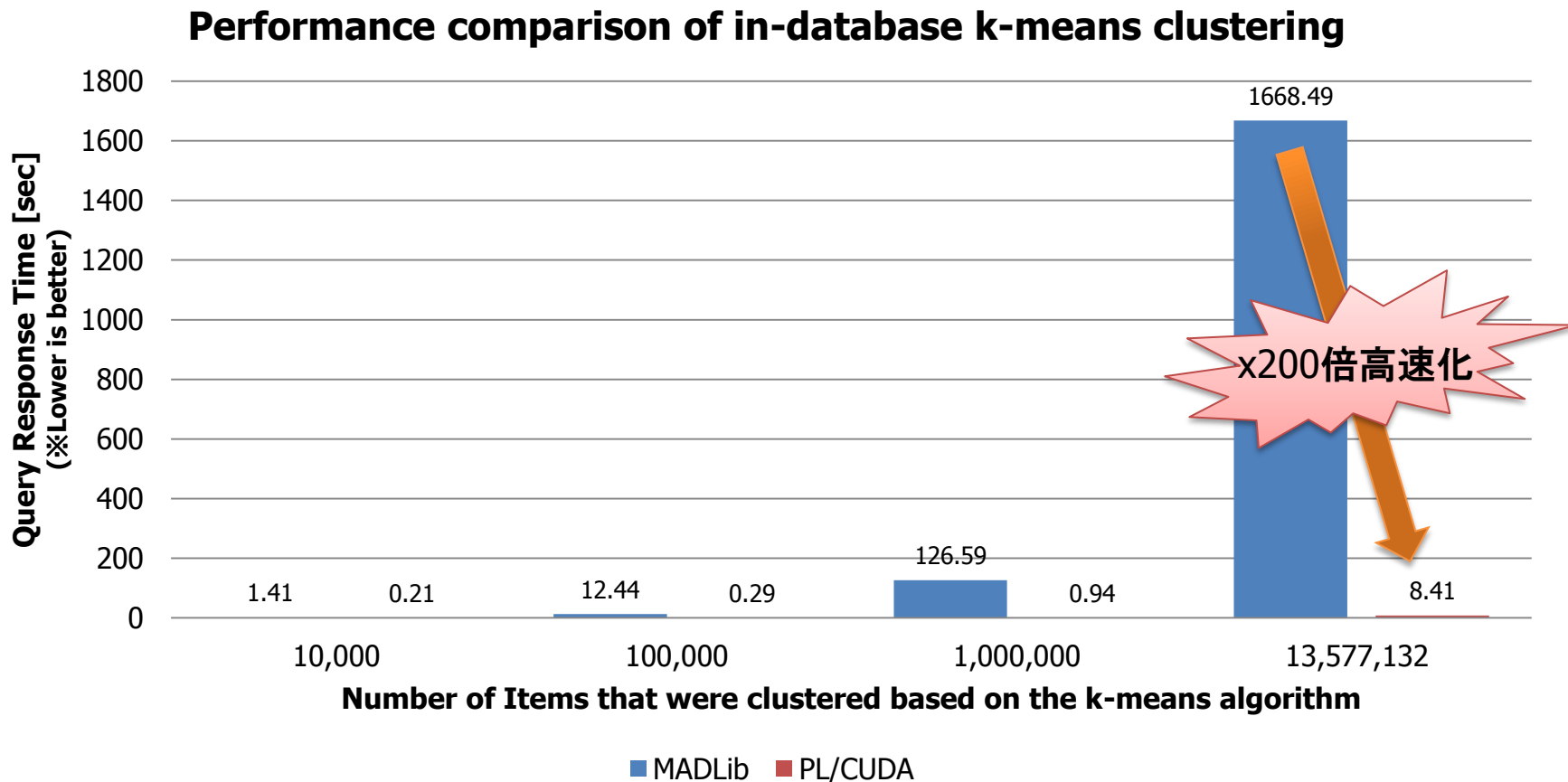
パフォーマンス (2/3) – MADLib版k-meansクラスタリングの呼出し

```
SELECT report_id, k, c
  FROM (SELECT report_id, k, c,
              row_number() OVER (PARTITION BY report_id
                                ORDER BY c DESC) rank
        FROM (SELECT t.report_id,
                    (madlib.closest_column(centroids,
                                           t.attrs)).column_id as k,
                    count(*) c
              FROM tr_rawdata_madlib_s t,
              (SELECT centroids
               FROM madlib.kmeans_random('tr_rawdata_madlib',
                                         'attrs',
                                         5)
              ) km;
        GROUP BY t.report_id, k
        ) __summary_1
    ) __summary_2
WHERE rank = 1;
```

最近傍クラスタの選択

クラスタ中心点の導出

パフォーマンス (3/3) – GPU版 vs CPU版実装



● 測定環境

- HW) CPU: Xeon E5-2670v3, GPU: GTX1080, RAM: 384GB
- SW) CentOS7, CUDA8.0, PostgreSQL v9.5 + PG-Strom v1.0, MADLib 1.9
- CPU版は、同等のロジックをC言語によるバイナリ版で実装して比較計測

まとめ



PL/CUDAとは？

- PG-Stromのオリジナルのコンセプトは自動最適化／自動コード生成
- 手動最適化と引換えに、PL/CUDAはGPU性能を最大限引き出すための手段。
→ たぶん、高度なアルゴリズムをSQLで書いている人はいないので正しい選択

利点

- TFLOPS級の計算エンジンをIn-Database Analyticsで使用できる。
- 外部アプリケーションを使用する場合と異なり、データセット全体をDBからエクスポートする必要がなくなる。
→ 取り出す必要があるのは“処理結果”だけ
- 解析アルゴリズムの前処理/後処理で、SQLによる柔軟なデータ操作が可能
 - ✓ JOIN、GROUP BY、Window関数、etc...

まとめ (2/3) – 適用領域

■ 実証実験① – 創薬領域における類似化合物検索

- 化合物の特徴を fingerprint (= 特徴ベクトル)として表現。
GPUで類似度スコアを計算しスコア上位の組合せを抽出。

■ 実証実験② – センサデータを用いた教師なし学習

- センサが生成した情報を用いてGPUで要素間距離を計算。
道路の特徴を抽出して数個のカテゴリへと自動分類。

■ 考えられる適用領域

- ✓ 化合物探索 ... 医薬、化学品、素材系
- ✓ レコメンデーションエンジン ... e-コマース領域
- ✓ アノマリー検知 ... セキュリティ分野
- ✓ データマイニング ... マーケティング
- ✓ ...など...

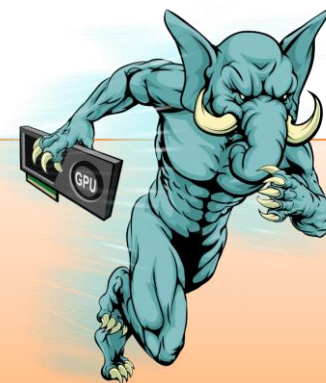
技術面

- 1GBを越えるサイズのArray-Matrixの取り扱い
 - ✓ PostgreSQL可変長データ型の制約により、SQL関数の個々の引数が1GBより大きなサイズを持つ事ができない。
 - ✓ (↑ 12/1のdeveloper meetingでも議論する)
- 繰り返し何度も同じArray-Matrixを使用する場合の処理コスト
 - ✓ GPU側に静的なArray-Matrixを置いたままにできれば嬉しいかも。

運用面

- SQLとCUDAを両方書ける人はなかなか多くない。
 - ✓ “定番の” アルゴリズムをパッケージ化
 - ✓ 専門エンジニアによるコンサルティング、構築サービス

実証実験のお誘い、お待ちしております。



リソース

リポジトリ

<https://github.com/pg-strom/devel>

本日のスライド

<http://www.slideshare.net/kaigai/pgconfasia2016-plcuda>

コンタクト

- e-mail: kaigai@ak.jp.nec.com
- Tw: [@kkaigai](https://twitter.com/kkaigai)

一緒に開発しようぜ！って人もお待ちしております。



Question?