

課題名 (タイトル) :

計算性能の統計可視化ライブラリ PMlib の開発

利用者氏名 :

○三上 和徳*

理研での所属研究室名 :

*フラッグシップ 2020 プロジェクト アプリケーション開発チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

計算科学アプリケーションプログラムの浮動小数点演算量・データ移動量などの計算性能に関する統計データを集積し可視化することによって、アプリケーションの計算特性を詳細に把握するためのオープンソースライブラリ PMlib の開発を進めている。PMlib はユーザー自身による明示的な計算量の指定測定とハードウェアパフォーマンスカウンターによる暗黙的な自動測定とに対応し、京コンピュータ、FX100、Intel Xeon (SNB/IVB/Haswell) など動作検証が行われている。最新の Xeon プロセッサを装備する HOKUSAI BigWaterfall システムにおいても同様な動作検証を実施し、幅広いプラットフォーム互換性を実現した上で、さらに既存のシステムとの挙動比較を行うための性能評価を実施する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

PMlib を利用するプログラムにおいては、数値計算式に基づいた明示的な計算量の指定と、HWPC のイベント統計量に基づいた自動的な計算量の測定のどちらかを実行時に選択する。本課題における主な開発内容は HOKUSAI BigWaterfall に搭載されている最新の Xeon プロセッサ Gold 6148 がサポートする AVX-512 命令に関係した性能情報を出力する機能を追加開発することである。他のシステムでの動作互換性が保たれたバージョンの PMlib を HOKUSAI BigWaterfall システム上へ移植し、計算ノード上での動作確認を実施した。HPWC のイベント統計量を読み込むためには PAPI (<http://icl.cs.utk.edu/papi/software/index.html>) の低レベル API を利用しているが、HOKUSAI BigWaterfall にインストール済みの PAPI は Xeon Gold に対応しておらず、イベントの認識エ

ラーを起こして正しい統計値が取得できないことが判明したため、PAPI 公式サイトから 2017 年 11 月時点での最新バージョン 5.5.1 を入手して個別にインストール・PMlib への組み込みを行った。

浮動小数点演算システムの AVX-512 命令系列を選択してその発行命令数から算出可能な性能情報をレポートする機能を追加した。具体的には以下の HWPC イベントを選択読み込み・集計し、命令数を基にした演算数カウントおよび全演算中のベクトル化率を自動測定しレポートする関数の更新を行った。

```
fpsp1 : "FP¥_ARITH:SCALAR¥_SINGLE";
fpsp4 : "FP¥_ARITH:128B¥_PACKED¥_SINGLE";
fpsp8 : "FP¥_ARITH:256B¥_PACKED¥_SINGLE";
fpsp16 : "FP¥_ARITH:512B¥_PACKED¥_SINGLE";
fpdp1 : "FP¥_ARITH:SCALAR¥_DOUBLE";
fpdp2 : "FP¥_ARITH:128B¥_PACKED¥_DOUBLE";
fpdp4 : "FP¥_ARITH:256B¥_PACKED¥_DOUBLE";
fpdp8 : "FP¥_ARITH:512B¥_PACKED¥_DOUBLE";
OP {hwpc} = fpsp1 + fpdp1 + 4.0*fpsp4 +
8.0*fpsp8 + 16.0*fpsp16 + 2.0*fpdp2 +
4.0*fpdp4 + 8.0*fpdp8;
```

また PMlib は測定結果をテキストレポート出力する他、計算性能を時刻歴表示する Web ブラウザパッケージと連携する機能を有するが、この時刻歴データは OTF (Open Trace Format) ファイルとして出力する。OTF ファイルを出力する低レベル API として、OTF1 :

https://tu-dresden.de/die_tu_dresden/zentrale_einrichtungen/zih/forschung/projekte/otf/

を HOKUSAI BigWaterfall 上へインストールし、PMlib が指定する測定区間に対応するトレースデータファイルの生成のテストを実施した。

3. 結果

上記 2. で述べた機能開発を完了した。簡単なテストプログラムを用いて、AVX-512 命令の測定が可能となったこと、また HWPC を用いない明示的な計算量も問題なくレポートされること、OTF ファイルの正常出力などの確認を行った。PMLib の最新版は下記公開リポジトリに登録されている。
<http://avr-aics-riken.github.io/PMLib/>

4. 今後の計画・展望

今年度開発を行った PMLib を計算科学アプリケーションに組み込み、計算性能特性の把握、および効率的な実行方法の検索にどのように役立てることができるかのフィージビリティスタディを行う予定である。最初のアプリケーションとしては量子化学プログラムを計画している。