

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

理研における所属研究室名:

計算科学研究センター 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実行性能の指標として重要な浮動小数点演算量・データ移動量などの計算量に関する統計データを集積分類し、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 (HWPC) による暗黙的な自動測定とに対応し、ソースレベル観点での数値計算上の性能と、システム観点でのデータ処理実行性能との両観点における評価実現を目的としている。背景として、数値計算上の計算量とシステムが実際に実行する命令を HWPC で測定した計算量との間ではしばしば大きな乖離があるという事実があり、この事は性能評価において重要な問題点として考慮されなければならない。

2. 具体的な利用内容、計算方法

計算科学アプリケーションの開発者は Fortran 言語や C++ 言語などで記述されたソースプログラム上で計上される数値計算量すなわち演算回数の合計値としての計算量を評価する。優れた計算アルゴリズムを開発あるいは選択することは、この数値計算観点における計算量を削減することに対応つけられる。

一方、アプリケーションを HPC システム上で実行する段階では、ソースプログラムを言語コンパイラを通して生成した実行プログラムの機械語命令列としてスケジューリング処理することになる。ソースで記述された計算式は複数の命令列に分解され、各命令の種類・量・命令に対応する計算量(演算数)は実行する HPC システムのアーキテクチャおよびコンパイラなど言語処理系ソフトウェアの最適化水準に依

存する部分が多い。このように定義されるシステム観点での計算量が、実際に得られる経過時間に対応する。

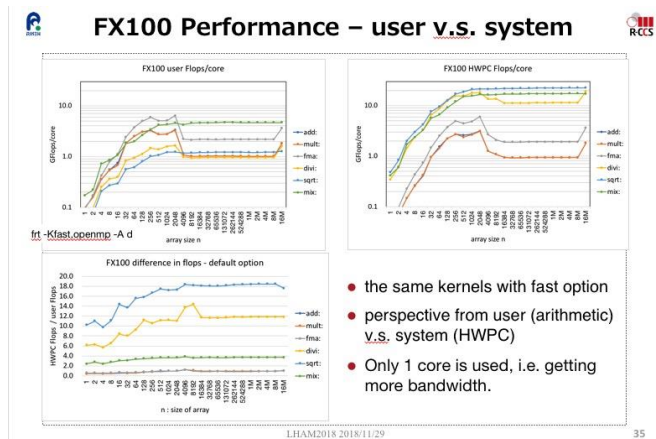
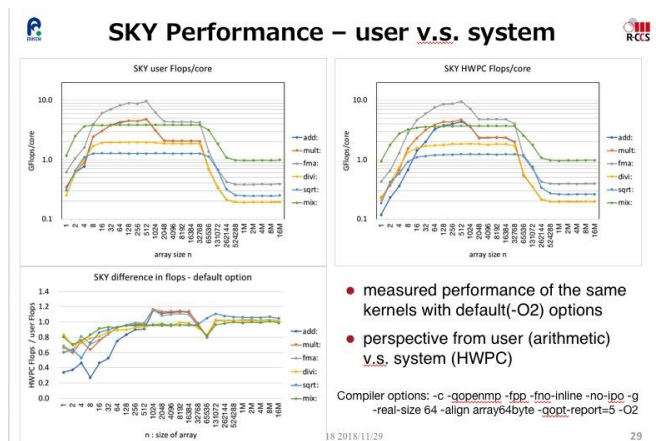
どちらの観点においても計算性能は計算量を計算時間で除した値として定義される。

PMLib で数値計算上の計算性能を測定したい場合は、PMLib API の引数として該当区間の計算量を評価式の形で明示的に指定して積算する。ソースプログラムに記述された計算式の全計算回数を数え上げる事に等しい。その際に計算の種類ごとの「重たさ」の設定を任意に加味することも可能である。HWPC イベント測定値を基準としたシステム評価的観点での計算性能を測定する場合は、該当区間の HWPC イベント統計情報を PMLib に自動的に読み取らせて計算量を積算させる。この場合 HWPC イベントの読み取りには内部で PAPI 低レベル API を利用し、さらにアプリ利用者が評価しやすい情報として自動的に選択ソート後出力する。HOKUSAI BigWaterfall の Skylake 計算ノード上には PAPI ライブラリ 5.2 が存在するが、システム向けに正しくインストールされていないため呼び出し時にエラーが発生し、また 2013 当時に開発されたバージョンであるために Skylake の HPWC のイベントに対応していない。そこで PAPI 公式サイトからより新しいバージョン 5.5.1 および 5.6.0 を入手して個別にインストールし、PMLib の開発バージョン(最新版: 6.4.0)への組み込みを行った。その結果 Skylake 計算ノード上で採取可能な AVX512 命令イベント等を含む VECTOR オプションによる測定機能を改善した。

この統計情報を用いて計算量を算出し、計算性能を得る PMLib の手法を論文別刷(1)に詳しく記載している。

3. 結果

基本的な演算カーネルループを用いて数値計算上の性能(ユーザー性能)と HWPC イベント測定値を基準とした性能(システム性能)とを Intel Xeon Skylake, 富士通 FX100 の各システム上で比較した結果を以下図にて示す。



Intel Xeon Skylake 上では単純な加算・積和算ループのシステム性能が、ループ長によるが、20%程度ユーザー性能よりも高く報告される。富士通 FX100 上では、単純な加算・積和算ループにおけるシステム性能とユーザー性能とはほぼ同等に得られるが、除算性能ループにおいては性能比が 10 倍以上高く報告される。これはソースプログラム上の 1 除算を単精度の逆数近似命令と反復による精度改善の組み合わせにより実現するため、多数の HWPC イベントが発生するためであり、システムの(見かけ上の)性能が実際にユーザーが得る性能よりも著しく高くなる。これは同様に近似命令と反復により実現されている平方根計算においてさらに顕著に高く報告される。

単純な演算カーネルの評価においては、評価軸の選択によって上記のように著しい乖離があらわれる場合がある。実際のアプリケーションにおいては、より複雑に演算を組み合わせた計算が主な負荷となるため、これほど極端な傾向が現れる可能性は低いと考えられるが、計算性能を評価する場合において、ユーザー観点およびシステム観点からの Multi-perspective な取り組みを行うことの重要性が PMLib を用いた評価によって改めてあきらかになった。

4. まとめ

Multi-perspective な性能評価を可能とするオープンソースソフトウェアである PMLib は京コンピュータ、FX100、Intel Xeon (SNB/IVB/HSW/SKL) など動作実績がある性能統計ライブラリである。その最新版は下記公開リポジトリに登録・公開されている。

<http://avr-aics-riken.github.io/PMLib/>

5. 今後の計画・展望

PMLib は開発途上のソフトウェアである。ポスト「京」を含まさらに広範囲なプラットフォームへの移植と、それらプラットフォームが個別に有する特徴的な HWPC イベントの収集機能を充実させる計画である。

6. 利用がなかった場合の理由

平成 30 年度 利用研究成果リスト

【会議の予稿集】

(1) K Mikami, K Ono, J Nonaka

Performance evaluation and visualization of scientific applications using PMLib

2018 Sixth International Symposium on Computing and Networking Workshops (CANDARW)