

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ということは、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の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。

## 3. 結果

今年度は開発済みの PMLib バージョン 6.4 をテストプログラム内部から呼び出し、特にベクター命令系の浮動小数点演算量の測定値が妥当であることの確認と、他の Intel Xeon 機種で測定された同じプログラムの計算特性とを命令ミックスと性能の評価の観点から比較する目的で主に HOKUSAI GWMPC (FX100) システムを利用した。命令ミックスは対象とするソースプログラムおよび採用するコンパイラオプションによって様相が異なるが、特に良好なベクトル命令を発行することができるはずの区間では、期待通りの命令列が生成されていることを PMLib の出力レポートで確認することができる。末尾に FX100 システムと Skylake システ

## 2019年度 利用報告書

ムからの出力の一部を示す。また今年度は PMLib を第一原理量子化学計算プログラム NTChem/RI-MP2 へ組み込みその有効性について観察をはじめたところである。

### 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)などで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。富岳を含む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。

図. SIMD 命令が効果的な区間における、FX100 および Skylake で得られる PMLib 出力レポートの一部

FX100:

# PMLib hardware performance counter (HWPC) Report -----

Label	Kernel-Fast										
Header	ID :	1FP_INS	2FP_INS	4FP_INS	8FP_INS	16FP_INS	Total_FPs	FLOPS	VECTOR(%)		
Rank	0 :	3.006e+06	3.015e+06	1.722e+09	6.510e+08	0.000e+00	2.252e+10	9.625e+10	9.996e+01		
Rank	1 :	3.006e+06	3.015e+06	1.722e+09	6.510e+08	0.000e+00	2.252e+10	9.650e+10	9.996e+01		
Rank	2 :	3.006e+06	3.015e+06	1.722e+09	6.510e+08	0.000e+00	2.252e+10	9.655e+10	9.996e+01		
Rank	3 :	3.006e+06	3.015e+06	1.722e+09	6.510e+08	0.000e+00	2.252e+10	9.620e+10	9.996e+01		

Skylake:

# PMLib hardware performance counter (HWPC) Report -----

Label	Kernel-Fast											
Header	ID :	SP_SINGLE	SP_SSE	SP_AVX	SP_AVXW	DP_SINGLE	DP_SSE	DP_AVX	DP_AVXW	Total_FPs	FLOPS	VECTOR(%)
Rank	0 :	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	1.200e+07	3.000e+06	3.003e+09	0.000e+00	1.203e+10	2.984e+10	9.990e+01
Rank	1 :	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	1.200e+07	3.000e+06	3.003e+09	0.000e+00	1.203e+10	3.420e+10	9.990e+01
Rank	2 :	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	1.200e+07	3.000e+06	3.003e+09	0.000e+00	1.203e+10	3.003e+10	9.990e+01
Rank	3 :	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	1.200e+07	3.000e+06	3.003e+09	0.000e+00	1.203e+10	3.481e+10	9.990e+01