

jh240038

プラズマ核融合シミュレーションコードを用いた Fortran の最新拡張機能のベンチマーク

岡部 寿男 (京都大学)

概要

プラズマ・核融合分野の実用的なシミュレーションコードを対象に Fortran 2003 以降の最新の拡張機能 (モダン拡張機能) のベンチマークを行い、拡張機能の仕様が性能に与える影響を明らかにする。まず、プラズマ核融合シミュレーションのベンチマークコードによる Fortran 現代拡張機能の性能評価として、プラズマ核融合シミュレーションのベンチマークコードである PAS+ をベースに、Fortran の現代拡張機能について、制限なくコンパイルが通るかやその機能を使用することで性能低下がないかなどを調査する。PAS+ に含まれるコードのうち、まずは流体 MHD の分散並列コードである impact-3d と、粒子シミュレーションの共有並列コードである espic3d について、現代拡張機能と性能評価を試みる。次いで、CoArray 拡張機能の性能評価として、Fortran2008 標準で追加された CoArray 拡張機能について、京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータシステム Camphor 3 において、Intel Fortran (ifort) ならびに GNU Fortran+CoarrayLib を用いて実測して性能を評価する。

1. 共同研究に関する情報

- (1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名
京都大学 学術情報メディアセンター

- (2) 課題分野
大規模計算科学課題分野

- (3) 参加研究者一覧と役割分担
岡部 寿男 (京都大学): (代表者) 全体の統括、
GNU FORTRAN+COARRAYLIB 処理系の現代拡張
機能の評価
岩下 武史 (京都大学): (副代表者) INTEL
FORTRAN の現代拡張機能の評価
坂上 仁志 (東海大学, 核融合科学研究所):
プラズマシミュレーションコードによる性能

評価

石黒 静児 (核融合科学研究所): 核融合シミュレーションコードによる性能評価
岩下 英俊 (京都大学, 情報処理学会情報規格
調査会 SC22/WG5 FORTRAN WG 小委員会):
COARRAY 機能の評価, FORTRAN 標準化への対応

2. 研究の目的と意義

Fortran は、スーパーコンピュータ用のプログラミング言語として長い歴史を持ち、現在も少なからぬソフトウェア資産が継承されている。1990 年代以降スーパーコンピュータの性能向上が分散メモリ型の massively parallel へと移行する中で、Fortran も Fortran90 以降オブジェクト指向や型の抽象

表 1 ベンチマークコード

分野	共有並列	分散並列	ハイブリッド
流体 MHD		impact-3d	gkvl
粒子	espic3d	cyl-r1	
モンテカルロ		dcom	fortec3d
MD		md3	
平衡計算			hint2
FFT		nsfft3d	

化などの近代的なプログラミングパラダイムを取り入れるための拡張がなされてきた。特に Fortran 2008 では PGAS (Partitioned Global Address Space)モデルによる配列アクセスである CoArray がサポートされるという大きな仕様拡張がなされた。しかし、現時点で最新の仕様である Fortran 2018 のすべての機能をサポートする処理系は稀であり、かつサポートしていても性能上大きな問題があり当該処理系ではその機能が事実上使い物にならないような例も少なくない。

本共同研究では、京都大学学術情報メディアセンターの新スーパーコンピュータシステム Camphor3 において、処理系としては標準の Intel Fortran ならびに OSS (Open Source Software) の GNU Fortran と CoarrayLib

(<https://gcc.gnu.org/wiki/CoarrayLib>)

を用いて、プラズマ・核融合分野の実用的なシミュレーションコードを中心に、Fortran 2003 以降の最新の拡張機能（以下「現代拡張機能」と呼ぶ）の性能面での評価、特に MPI + OpenMP または自動並列化により分散・共有メモリ向けにハイブリッド並列化したものと CoArray を用いた PGAS モデルによる分散・並列されたものについての性能比較を行い、Fortran の現代的な拡張機能の使用が性能に与える影響を可能な限り網羅的に調べる。成果として汎用的なベンチマークコードとベンチマーク結果を公表することに加え、それ

に基づく現代的な拡張機能を駆使した Fortran Programming のチュートリアル教材を作成し、高性能 Fortran 推進協議会 (<http://www.hpfp.org>) を通じて公開することで、レガシーなコードを書き直し保守性が高くかつ性能的にも安定したものとしようとする初級・中級 Fortran プログラマの拠り所として資することを目指す。

3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

本共同研究は、プラズマ・核融合分野の研究者と計算機科学の研究者のコラボレーションによる学際的なものであり、かつその成果は広くシミュレーション科学の全領域に資するものである。ベンチマークにおいては、最新の Fortran 2018 規格に準拠しかつ近代な拡張機能への対応が最も優れている Fortran 処理系である Intel Fortran を使うことができ、かつ分散メモリで十分な並列度で性能測定が行える、京都大学学術情報メディアセンターの Camphor3 が秀でている。

Camphor3 は、最新の Intel Xeon CPU を採用し 1 ノード当たりのコア数が多く HBM を備え主記憶アクセスが高速な点が特徴的である。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要 (該当なし)

5. 今年度の研究成果の詳細

(1) プラズマ核融合シミュレーションのベンチマーク

コードによる Fortran 現代拡張機能の性能評価
共同研究者の坂上が開発したプラズマ核融合シミュレーションのベンチマークコードである PAS+[1] をベースに、Fortran の現代拡張機能について、制限なくコンパイルが通るかやその機能を使用することで性能低下がないかなどを調査した。PAS+には表 1 のベンチマークコードが含まれるが、まずは流体 MHD の分散並列コードである impact-3d と、粒子シミュレーションの共有並列コードである espic3d について、現代拡張機能対応と性能評価を試みた。

各社の Fortran 処理系における機能のサポート状況については ACM Fortran Forum が定期的にレポートを出しているが (<https://doi.org/10.1145/3432987.3432991>)、これは各社の自己申告に基づくチェックリストであり、性能低下については示されていない。本共同研究では、各機能について性能上の評価を行えるよう、PAS+に含まれる実用レベルのプログラムに基づいてベンチマーク評価するためのコードを作成した。

(2) CoArray 拡張機能の性能評価

CoArray 拡張機能の性能評価については同機能が Fortran 2008 標準で追加され Intel を始めいくつかの処理系でサポートされるようになった約 10 年前に少なからぬ評価が行われたが、その後 OSS のコンパイラでの対応も含め処理系側の対応の進化には追従できていない。京都大学学術情報メディアセンターの Camphor3 ではノード間通信のためのハードウェアとして InfiniBand を備えており、これを IntelMPI を経由して用いることでどれくらいの性能が得られるかは、コンパイラだけでなく通信ミドルウェアの性能にも依存する。このことから、Intel Fortran (ifort) ならびに GNU Fortran+CoarraLib を用いて実測してどれくらいの性能が得られるのか評価した。ベンチマークコードとしては共同研究者の坂

上が開発したプラズマ核融合シミュレーションのベンチマークコードを CoArray 対応にしたものに加え、他のベンチマークで用いられている EPCC CAF Micro-benchmark suite (Edinburgh University) や CAF Himeno (Prof. R. Himeno - Bill Long - Dan Nagle) などを用いた。

[1] 坂上仁志: プラズマ核融合シミュレーションのベンチマークコード開発, 平成 20 年度国立天文台天文シミュレーションプロジェクト成果報告書, 2009. https://www.cfca.nao.ac.jp/~cfca/hpc/report/annual/report2008/upload_files/2009_0603165711hpc-report-2008-sjis.pdf

(3) Fortran の現代拡張機能の普及啓発への取り組み

Fortran 言語は、科学技術計算における利便性、高性能なコンパイラおよび過去の膨大な資産の存在による根強い支持があるため、その地位を保ちつつも、知名度や人気は低下していることは、否定できない。特にレガシーな FORTRAN で書かれたプログラムは、モダンなプログラミング言語から見ると不可解な記述を多用しており、アンチ Fortran 派からの絶好の攻撃材料になってきた。そこで、なぜこのような不可解な記述になったのか、その理由を示し、現在のモダンな Fortran では、どのように記述できるのかを示しながら、よりモダンな Fortran プログラムが書けるノウハウ的な指針を検討した。具体的には、野蛮と呼ばれる原因となっているプログラムの記述法について整理するとともに、最新の Fortran 規格から削除された／廃止予定の項目について検討し、それらに対する最新の Fortran による代替手段を示した。

このような取り組みについて広く議論する場として、長年 Numerical Algorithms Group が開催してきた Fortran Modernisation Workshop を参考に、高性能 Fortran 推進協議会主催、京都大学学術情報メディアセンタ

一共催で、PC クラスタコンソーシアムの協賛も得て、「第 1 回モダンな Fortran ワークショップ」を企画し、2024 年 8 月 30 日（金）・31 日（土）の 2 日に互って開催した。当初は京都大学学術情報メディアセンターをオンサイト会場とするハイブリッド開催を予定していたところ、台風 10 号の接近に伴い完全オンラインとなったが、90 名の参加を得て活発な議論によりフィードバックを得た。発表資料は[高性能 Fortran 推進協議会のホームページ](#)で公開している（図 1）。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

レガシーなコードを現代拡張機能を駆使したコードに書き換える基本指針は得られたので、これに基づいてプラズマ核融合シミュレーションシミュレーションのベンチマークコードへの書き換えを進めてきたが、実際のコードの書き換えにあたってはどのような書き方が Modern Fortran として相応しいのかについて、性能の追求とコードの読みやすさのトレードオフにおいて共同研究者の間で議論が分かれるところも少なくなく、ベンチマークコードの公開には至っていない。今回は京都大学学術情報メディアセンターの Camphor 3 を対象としたが、富岳を含む他の計算機システムと言語処理系でも評価して、可能な限り汎用的なベンチマークとしていく必要がある。また、さらに処理系に合わせたチューニングも必要である。

※7. 研究業績はウェブ入力です

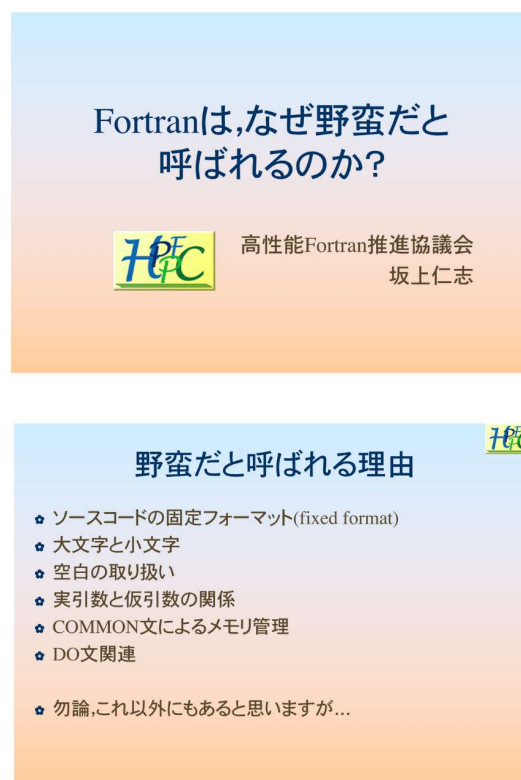


図 1 第 1 回モダンな Fortran ワークショップでの発表スライド