

初代星・初代銀河研究会 2024

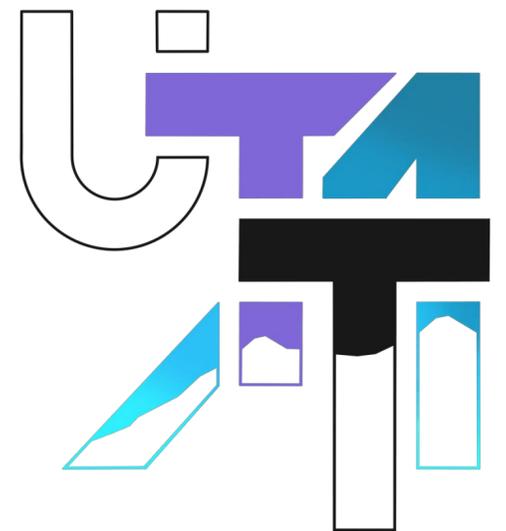
GPU上で動くAMR流体計算コード の開発と現状について

(筑波大学)



筑波大学
計算科学研究センター
Center for Computational Sciences

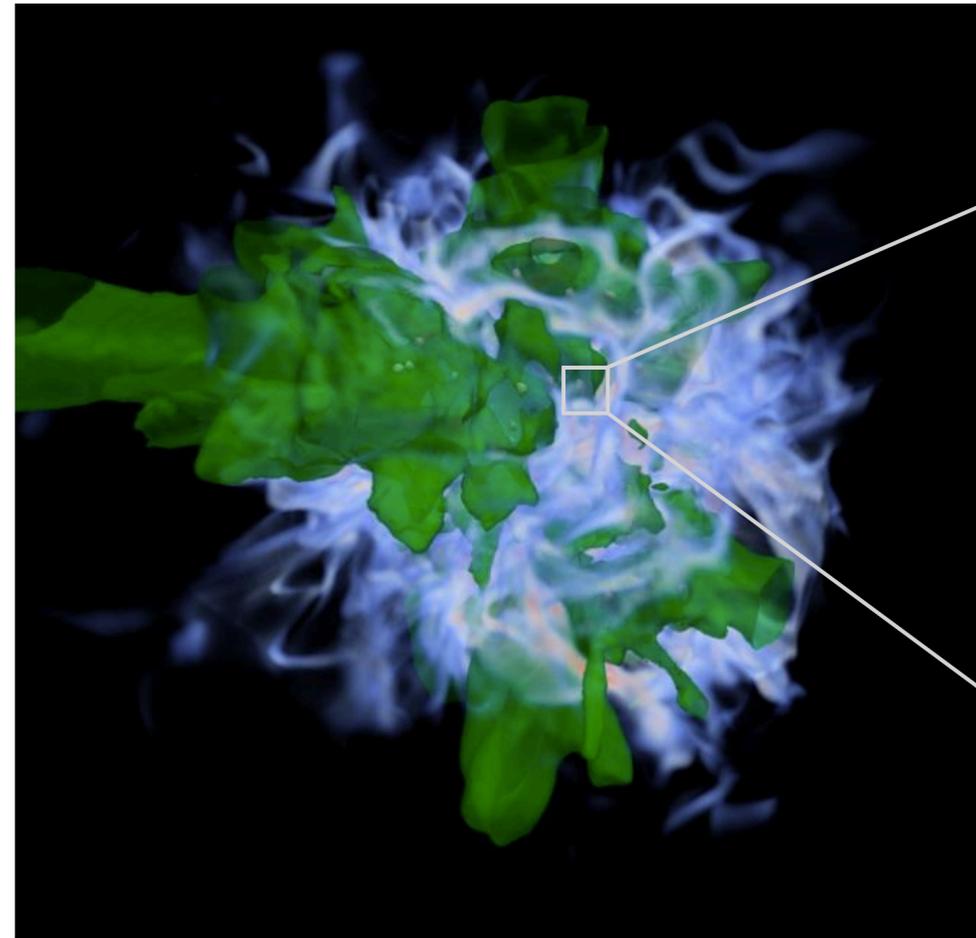
共同研究者: 松本倫明(法政大学)



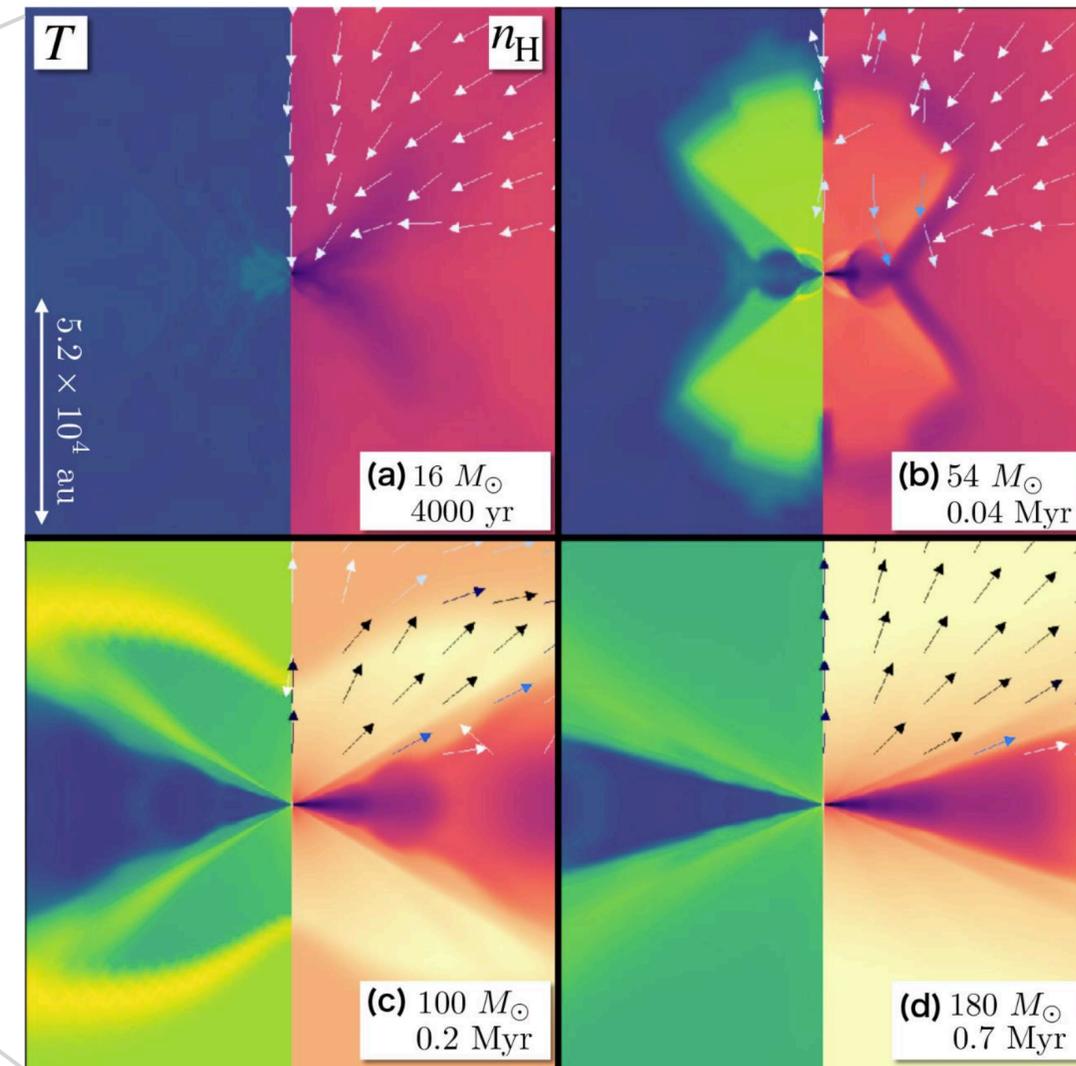
開発の動機: 星・星団形成

星団: 数~100pc

降着円盤: 10auくらい?



(HF+2020)



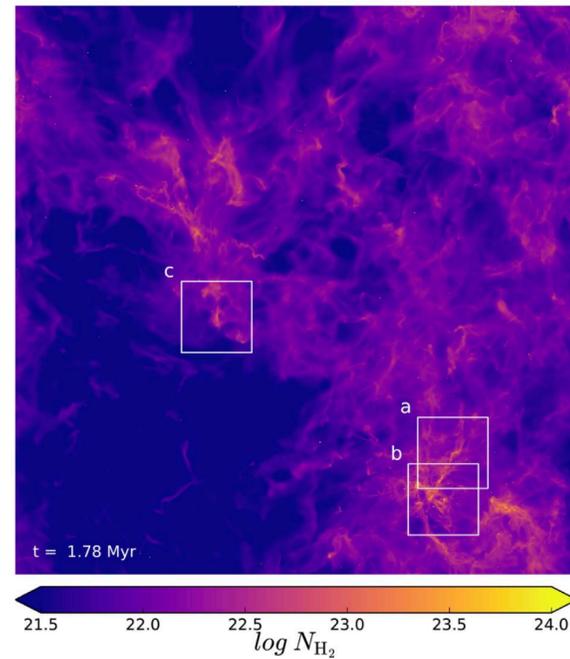
(HF+2020)

星団スケールと星へのガス降着を同時に計算したい

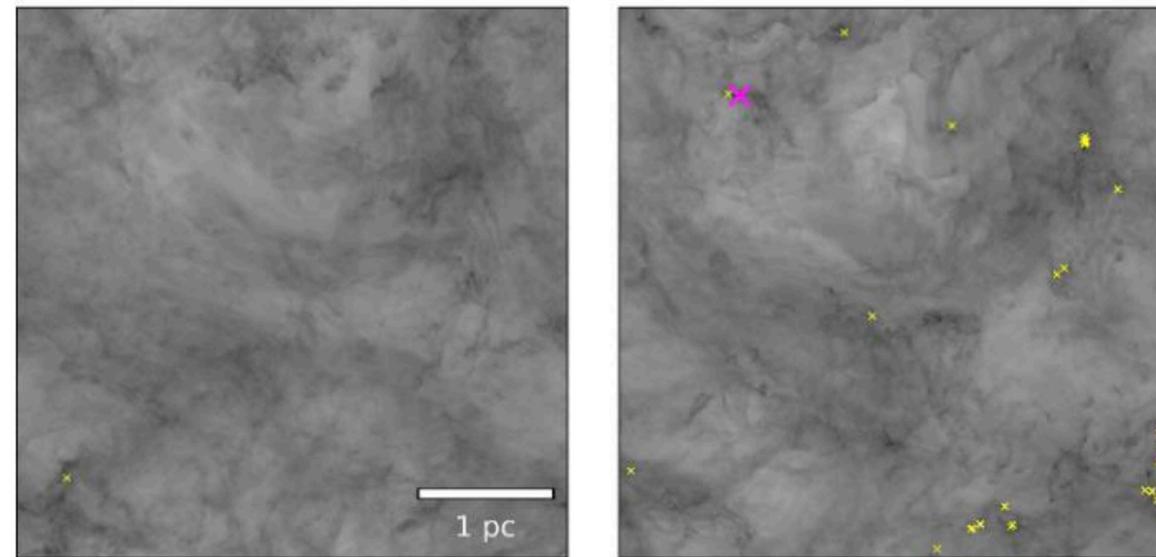
円盤の性質などより議論できるようになるはず

格子法

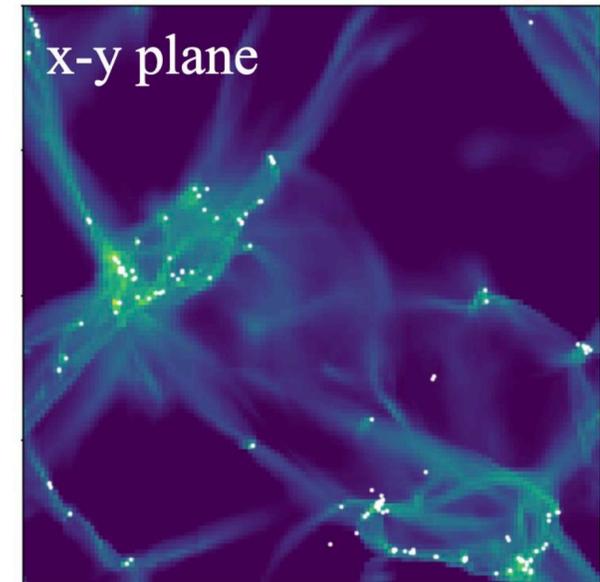
Pelkonen+21



Kuffmeier+23



Nozaki+24 (submitted to ApJ)



code RAMSES

Sink半径 100 au

Max level 8

RAMSES

200 au

9

SFUMATO

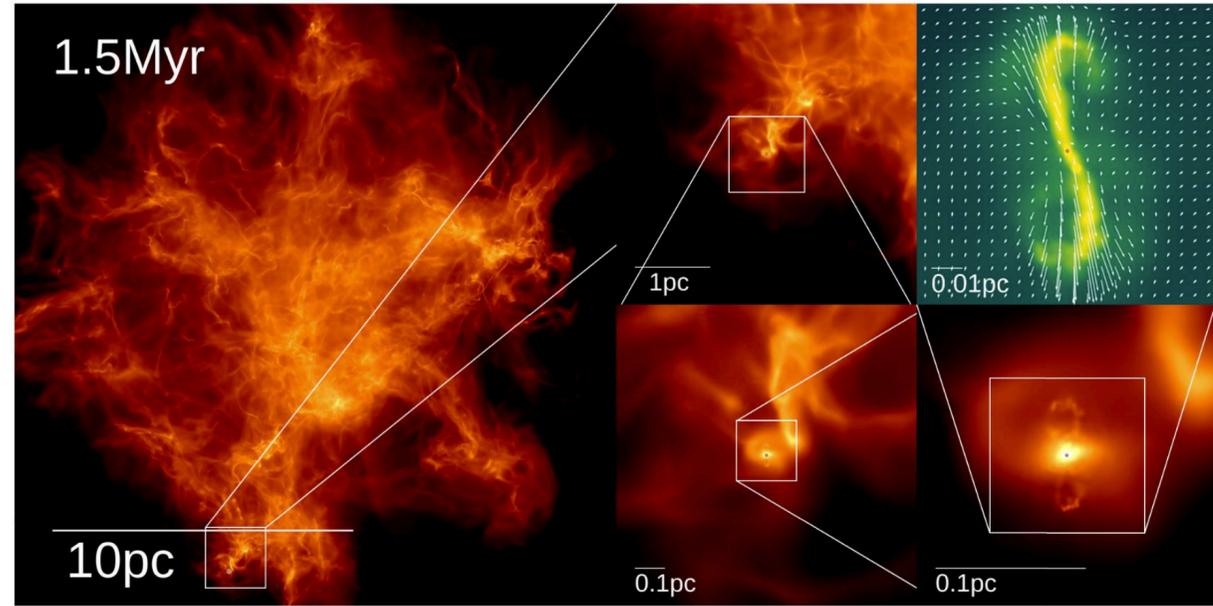
10^3 au

5

(九大野崎くん調べ)

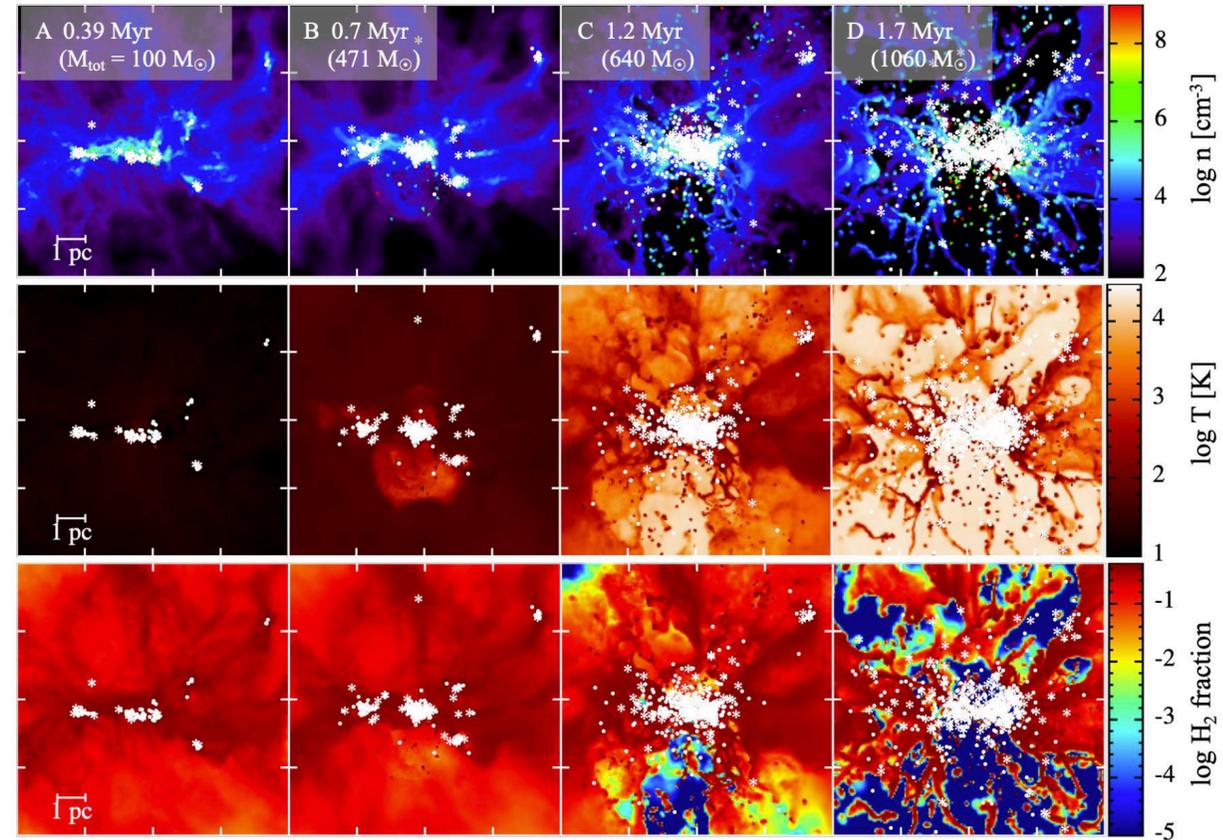
粒子法

Guszejnov+21



質量解像度: $10^{-3} M_{\odot}$

Chon+24



質量解像度: 数 $10^{-3} M_{\odot}$

どちらも星質量分布関数を導出

円盤は解像できている? > 大向さん, 細川さん

最近のHPC分野の動向

Top 500 (November 2024)

Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	Rpeak (PFlop/s)	Power (kW)
1	Frontier - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	8,699,904	1,206.00	1,714.81	22,786
		GPU搭載			
2	Aurora - HPE Cray EX - Intel Exascale Compute Blade, Xeon CPU Max 9470 52C 2.4GHz, Intel Data Center GPU Max, Slingshot-11, Intel DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	9,264,128	1,012.00	1,980.01	38,698
		GPU搭載			
3	Eagle - Microsoft NDv5, Xeon Platinum 8480C 48C 2GHz, NVIDIA H100, NVIDIA Infiniband NDR, Microsoft Azure Microsoft Azure United States	2,073,600	561.20	846.84	
		GPU搭載			
4	Supercomputer Fugaku - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442.01	537.21	29,899
5	LUMI - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE EuroHPC/CSC Finland	2,752,704	379.70	531.51	7,107
		GPU搭載			
6	Alps - HPE Cray EX254n, NVIDIA Grace 72C 3.1GHz, NVIDIA GH200 Superchip, Slingshot-11, HPE Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	1,305,600	270.00	353.75	5,194
		GPU搭載			
7	Leonardo - BullSequana XH2000, Xeon Platinum 8358 32C 2.6GHz, NVIDIA A100 SXM4 64 GB, Quad-rail NVIDIA HDR100 Infiniband, EVIDEN EuroHPC/CINECA Italy	1,824,768	241.20	306.31	7,494
		GPU搭載			
8	MareNostrum 5 ACC - BullSequana XH3000, Xeon Platinum 8460Y+ 32C 2.3GHz, NVIDIA H100 64GB, Infiniband NDR, EVIDEN EuroHPC/BSC Spain	663,040	175.30	249.44	4,159
		GPU搭載			
9	Summit - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148.60	200.79	10,096
		GPU搭載			
10	Eos NVIDIA DGX SuperPOD - NVIDIA DGX H100, Xeon Platinum 8480C 56C 3.8GHz, NVIDIA H100, Infiniband NDR400, Nvidia NVIDIA Corporation United States	485,888	121.40	188.65	
		GPU搭載			

GPU (Graphics Processing Units)搭載のものが大部分



(H100)

利点: 多数のコアを搭載した並列計算機

例) NVIDIA A100: 6912 cores

NVIDIA H100(PCIe): 14592 cores (三木さんのスライドより)

演算性能: 26Tflops(H100 PCIe, FP64)

参考)HPE Cray XD2000

システムM		システムP	
Intel Xeon CPU Max 9480		Intel Xeon Platinum 8480+	
理論ピーク性能	3.4 Tflops	理論ピーク性能	3.6 Tflops
コア数	56	コア数	56
メモリバンド幅	1600 GB/s	メモリバンド幅	614 GB/s
メモリ量	64 GB	メモリ量	256 GB
	2 CPU/ 1node		2 CPU/ 1node
ノード間インターコネクト		ノード間インターコネクト	
	InfiniBand NDR400		InfiniBand NDR200
	208 node		80 node
理論ピーク性能	1.4 Pflops	理論ピーク性能	0.57 Pflops
総コア数	23296	総コア数	8960
メモリバンド幅	665 TB/s	メモリバンド幅	98.24 TB/s
メモリ量	26.6 TB	メモリ量	40.96 TB

(cfcaのサイトより)

欠点: 計算コードの全体的な書き直し

自分視点

筑波大学計算科学研究センター

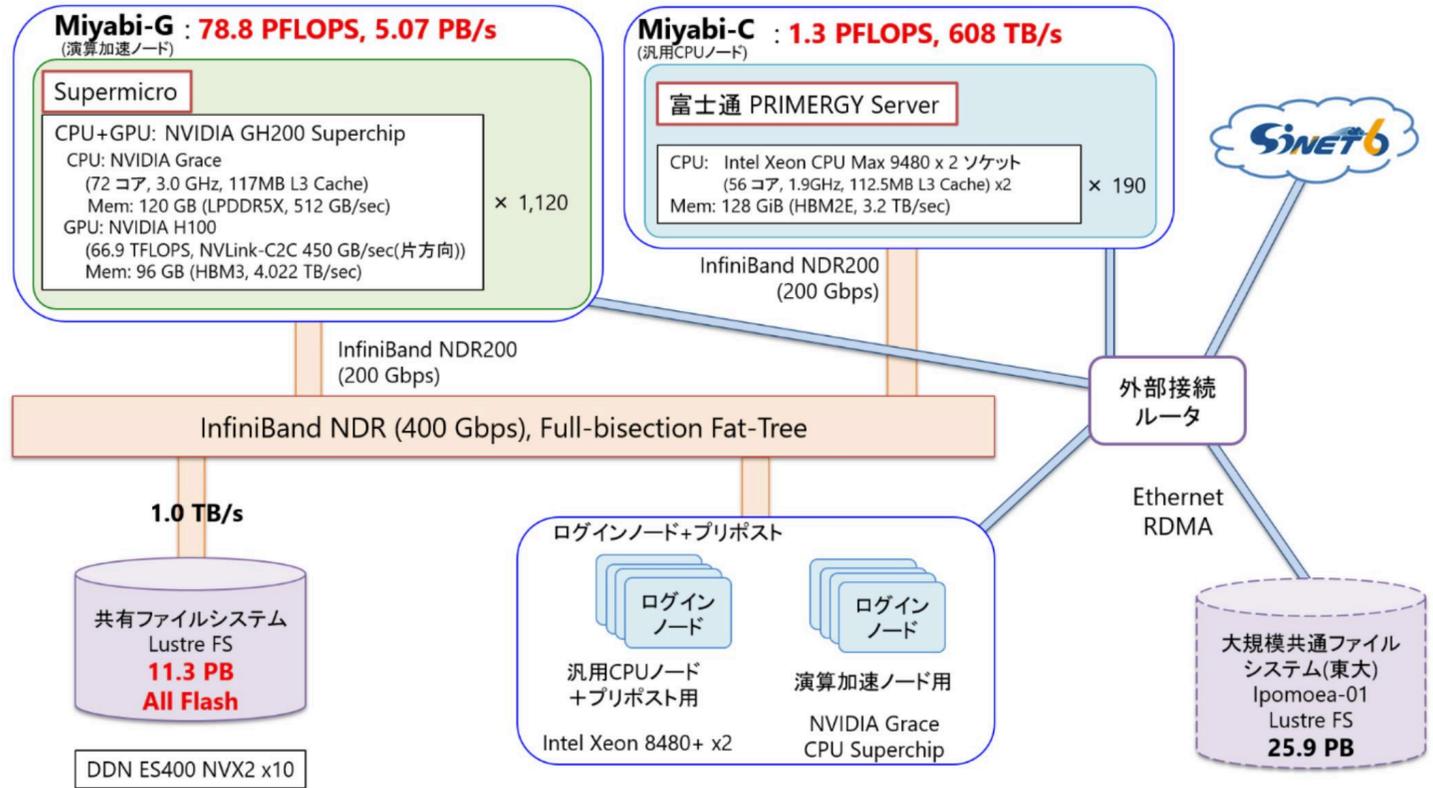


2025年3月運用終了

H100搭載

これらの計算資源を活用したい

Miyabi (全国共同利用, 2025年1月運用開始)



SFUMATOのGPU化



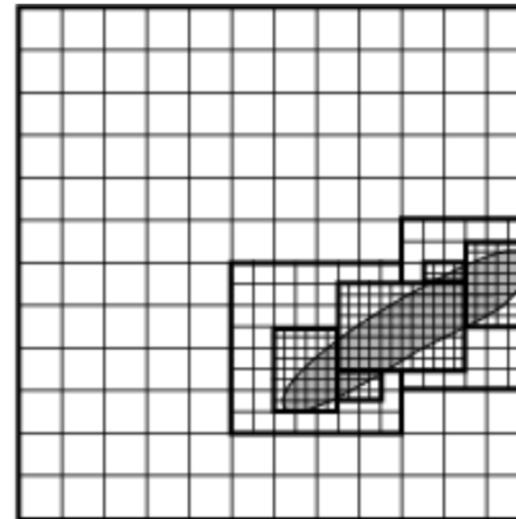
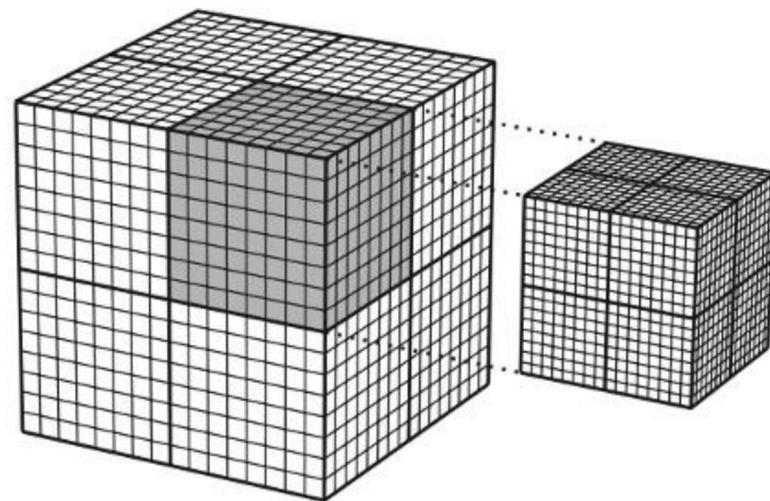
(Matsumoto 2007)

適合格子細分化法の流体コード

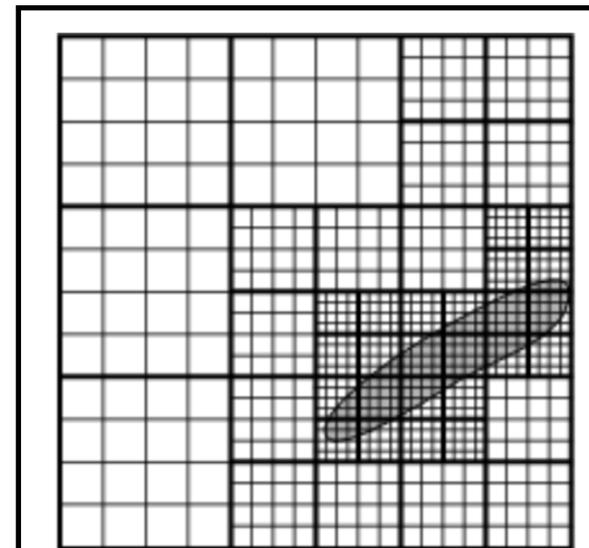
+ 自己重力(Multigrid 法)

+ シンク粒子

+ 他

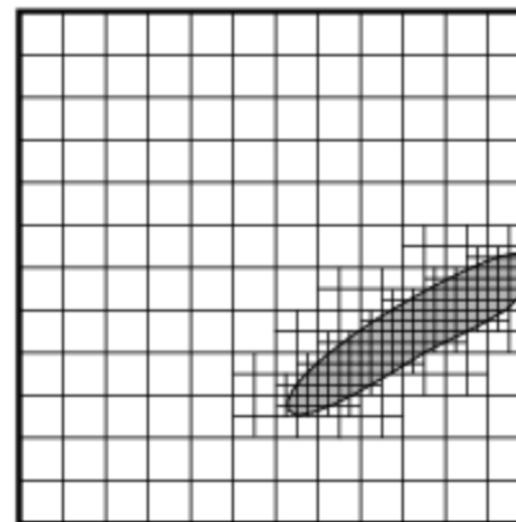


(A) パッチ型
ブロック構造格子

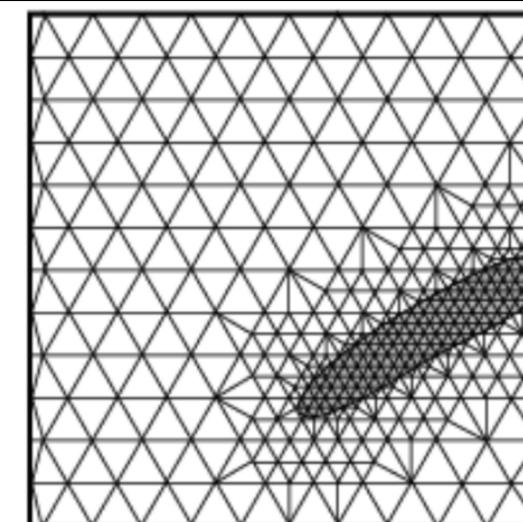


(B) 八分木型
ブロック構造格子

(GPU化に適している)



(C) セル分割型格子



(D) 三角形非構造格子

(松本さんのスライドより)

SFUMATOのGPU化



(Matsumoto 2007)

言語: Fortran90

並列化: MPI

CPUのみ



(ChatGPTで作成)

言語: CUDA (今後HIP対応も目指す)

並列化: MPI (+openmp or threads?)

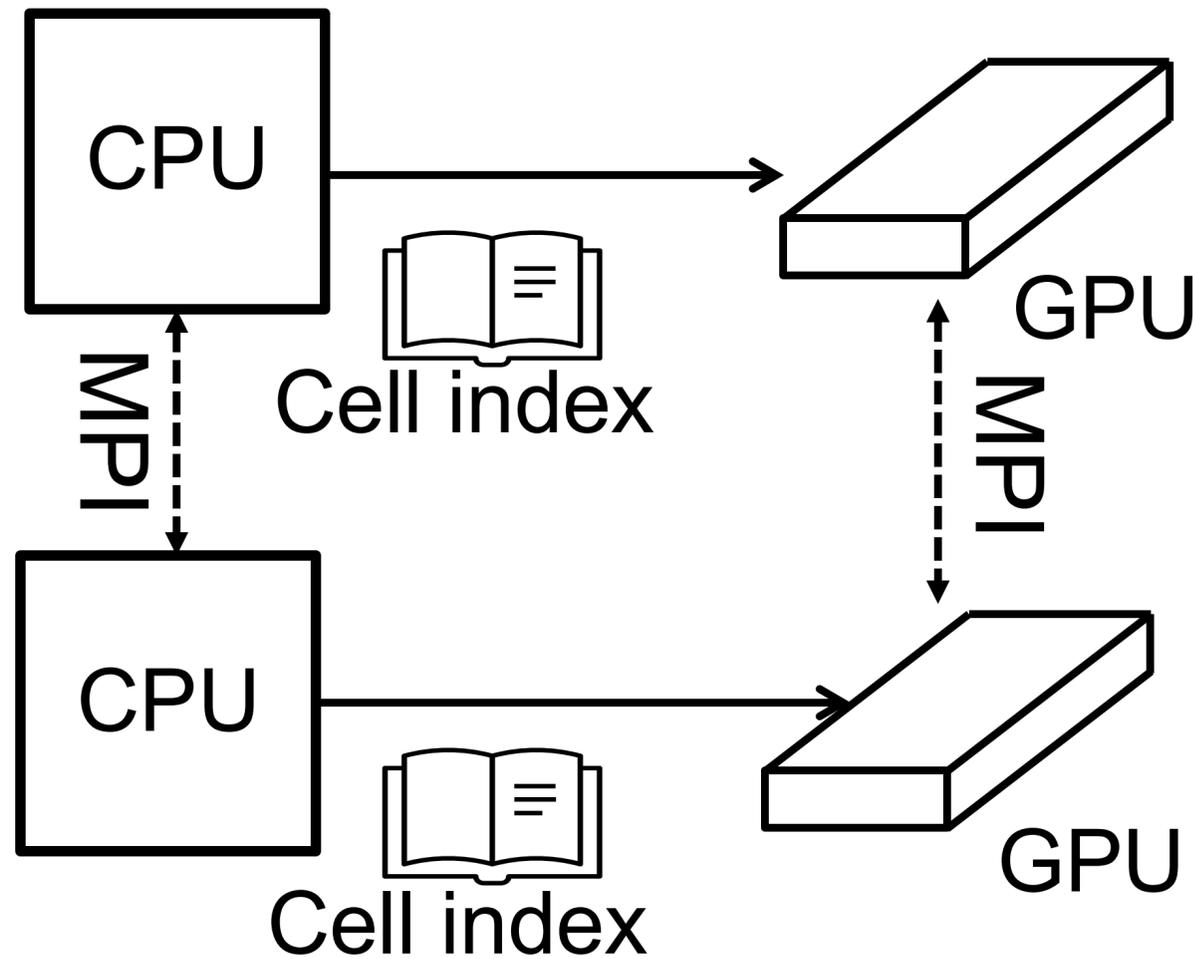
CPU + GPU (現状NVIDIAのみ)

SFUMATO GPUの開発状況

AMR格子生成	<- 完了
流体計算	<- 完了
自己重力	<- 完了 (? , 早くしたいが)
シンク粒子	<- 完了
非平衡化学 + 輻射輸送	<- 開発中

GPU化において面倒なところ(初心者の視点)

- FortranのコードをC/C++に書き換えたいくなる(あまりサポートされていない気がする)
- CPU・GPUと2つメモリがあるので、よりコードが複雑に



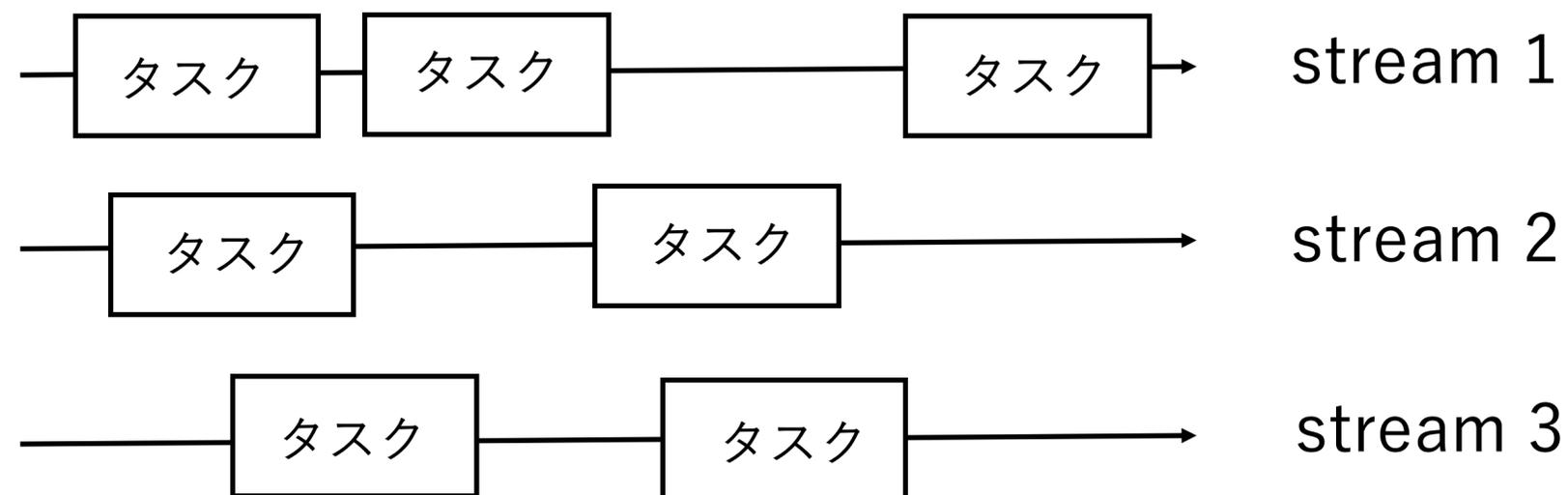
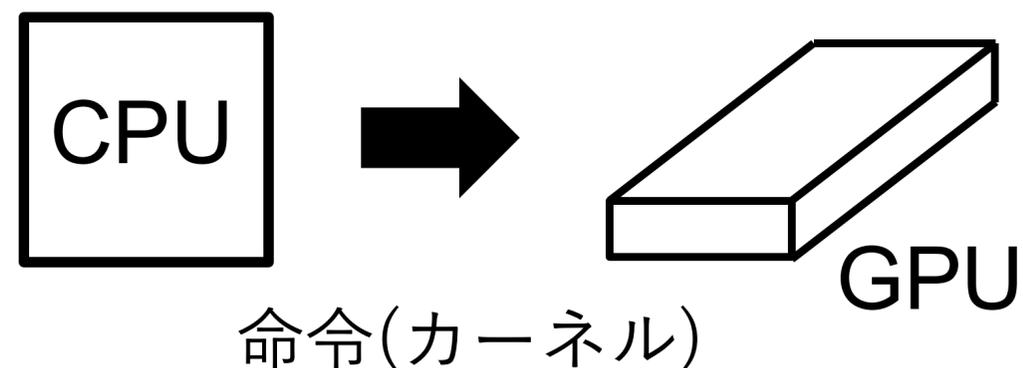
Cell情報はGPU上に(Unified memoryとしてホスト上に確保することも可能)

CPUはポインターとセルのインデックスを保持し、計算を制御

MPI 通信による複数GPUの使用も行う(後述するストリームを含む管理も必要)

GPU化において面倒なところ(初心者の視点)

- Streamの管理等



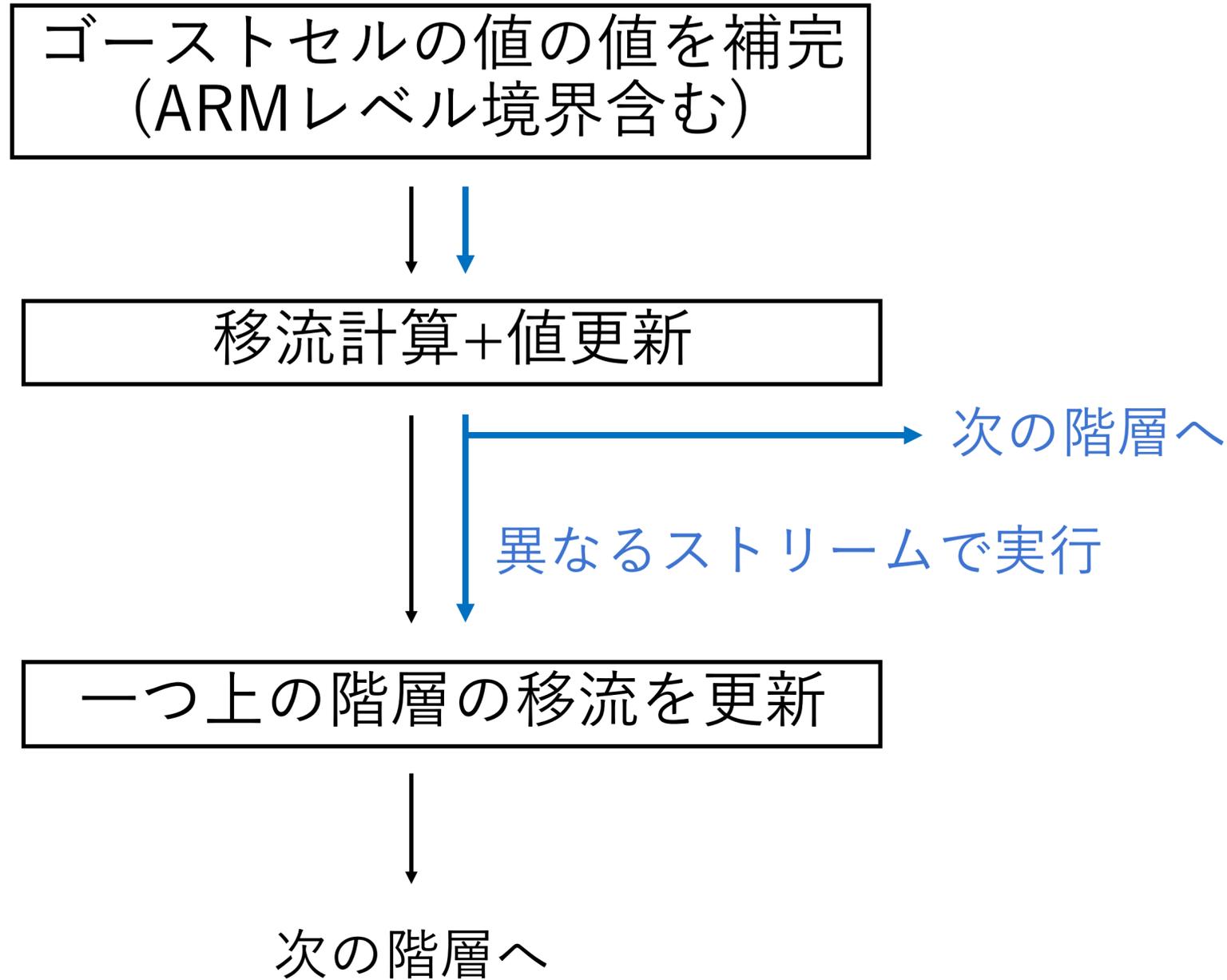
- StreamとMPI通信の併用

Stream上でのタスクの終了を確認しつつ、MPI通信を行う。

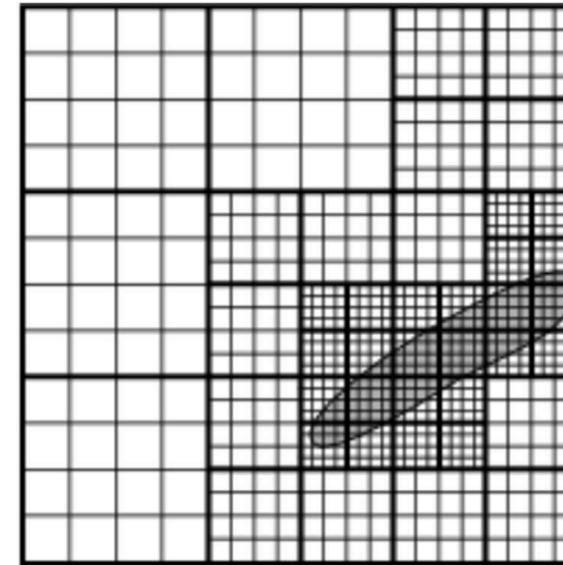
- カーネル中でif文を(あまり)使えない

計算の工夫

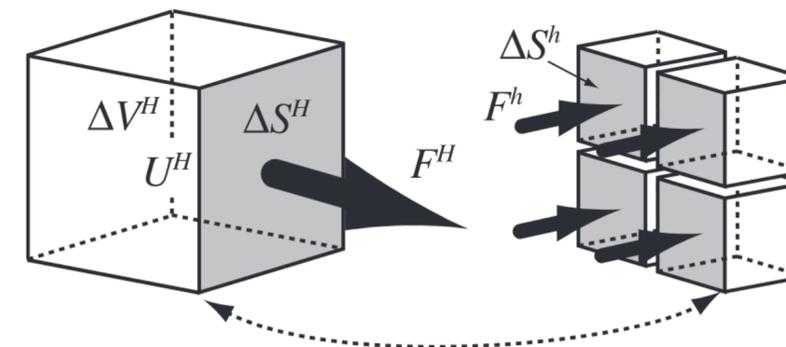
例) 流体移流の手順



格子構造



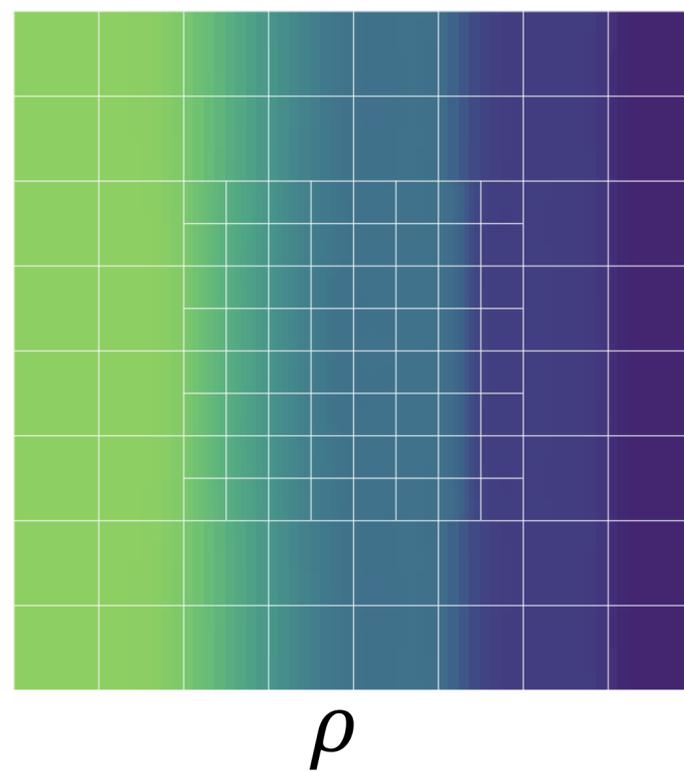
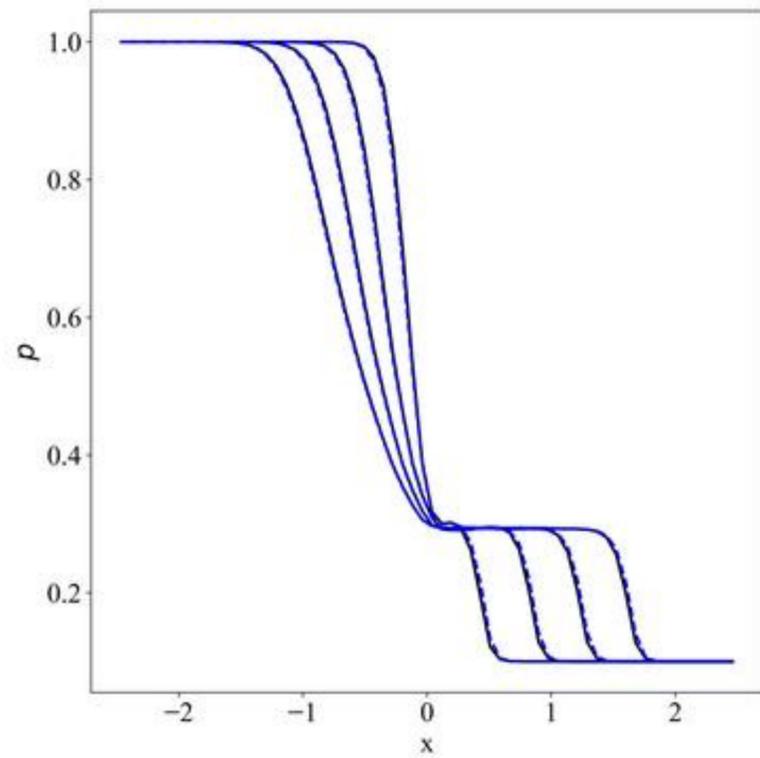
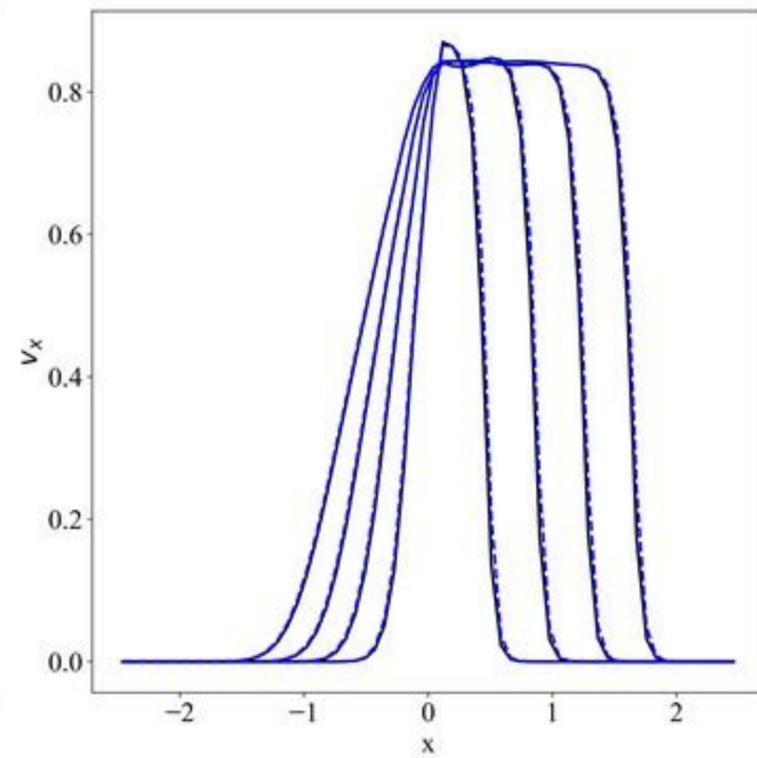
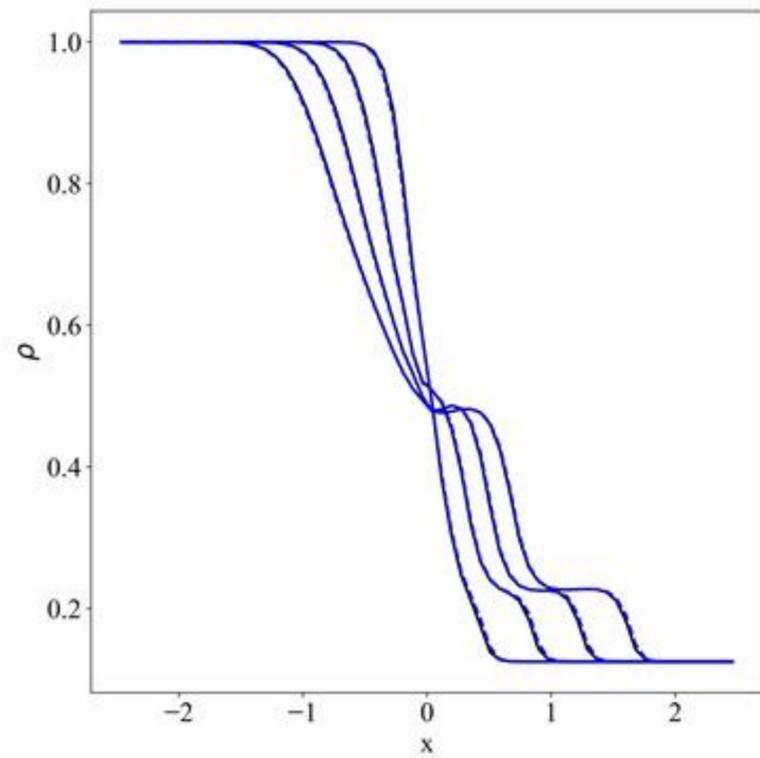
流束補正の様子



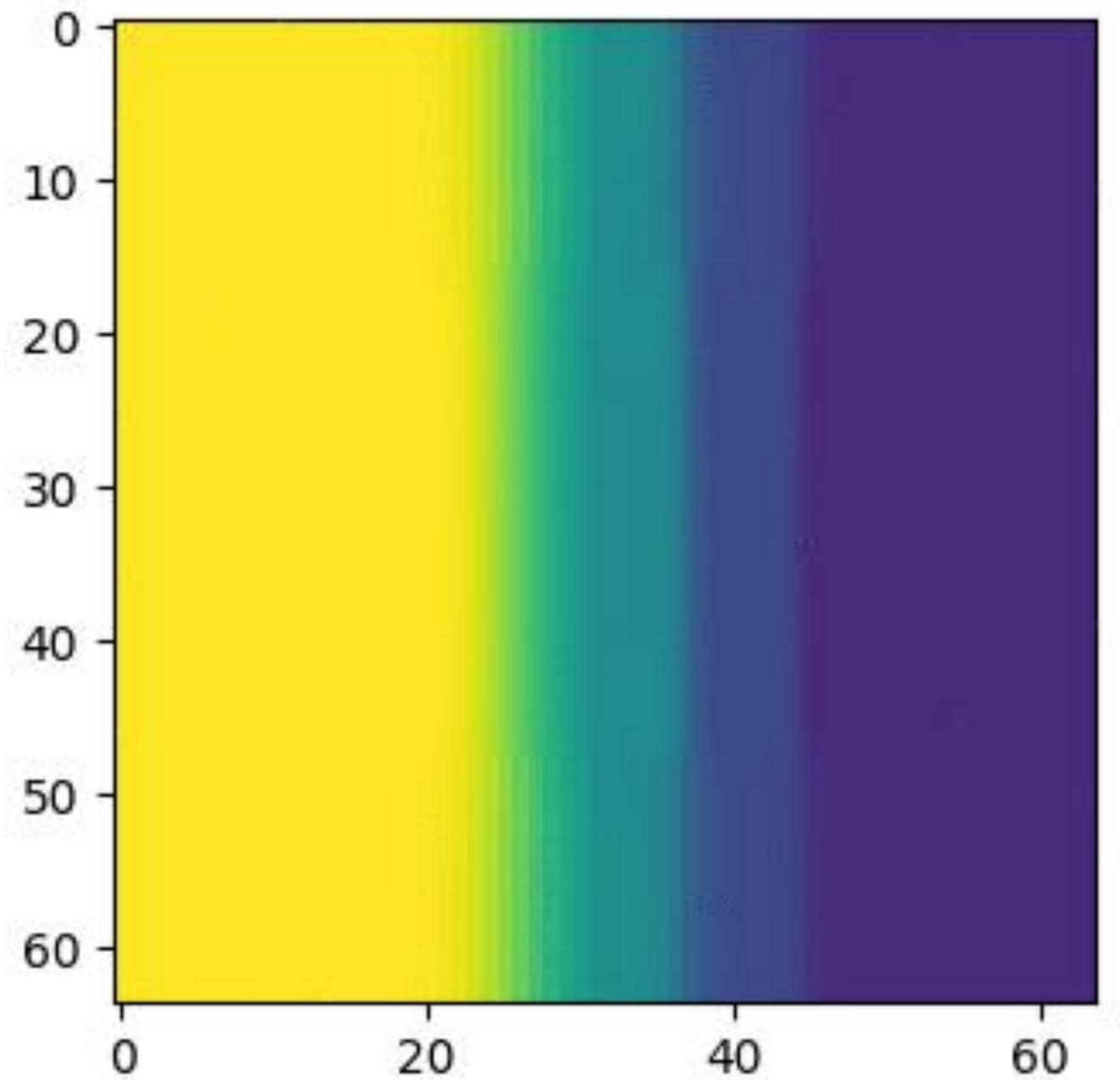
(Matsumoto 2007)

計算の様子

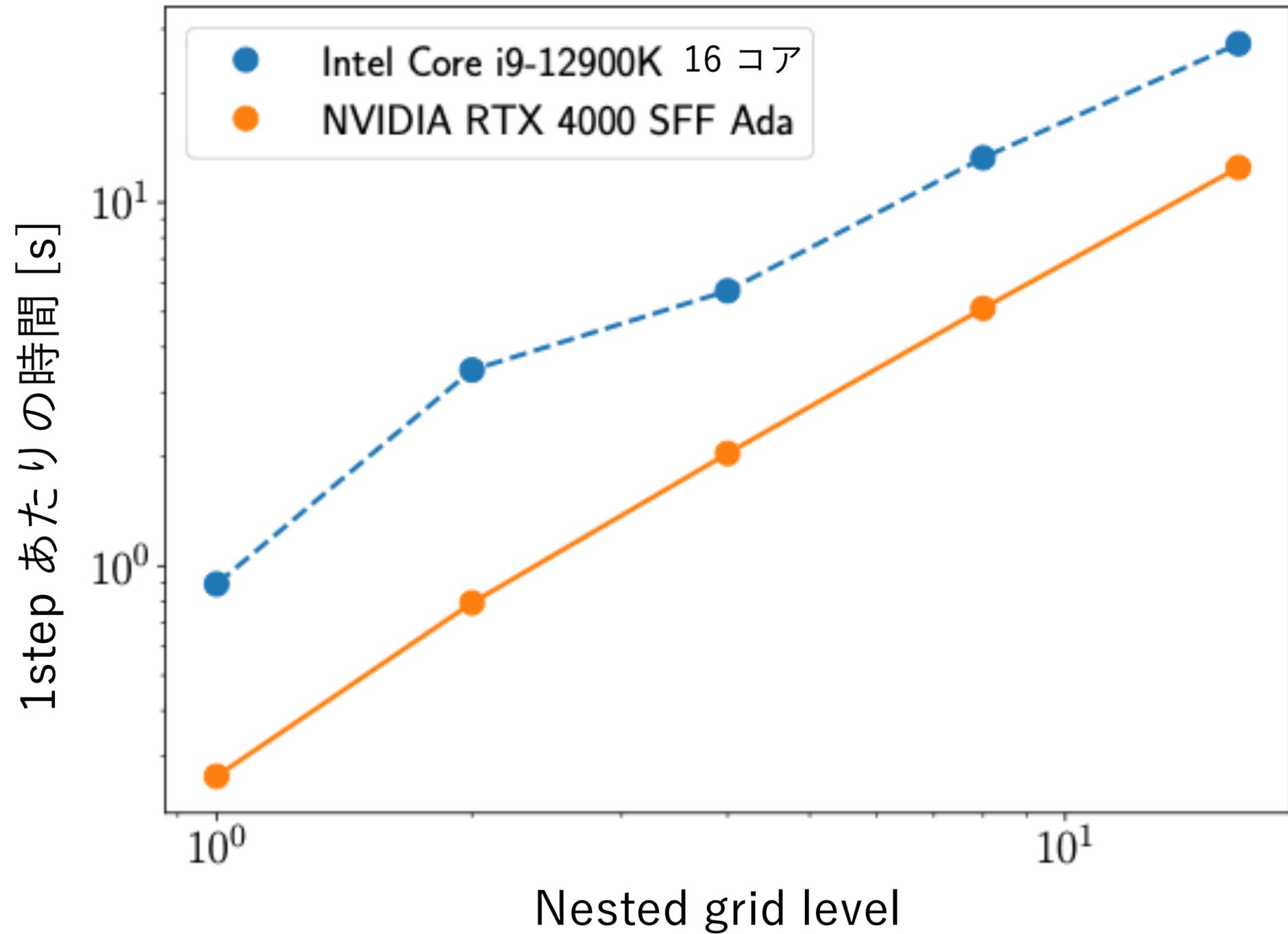
衝撃波管問題



密度



計算スピードの比較

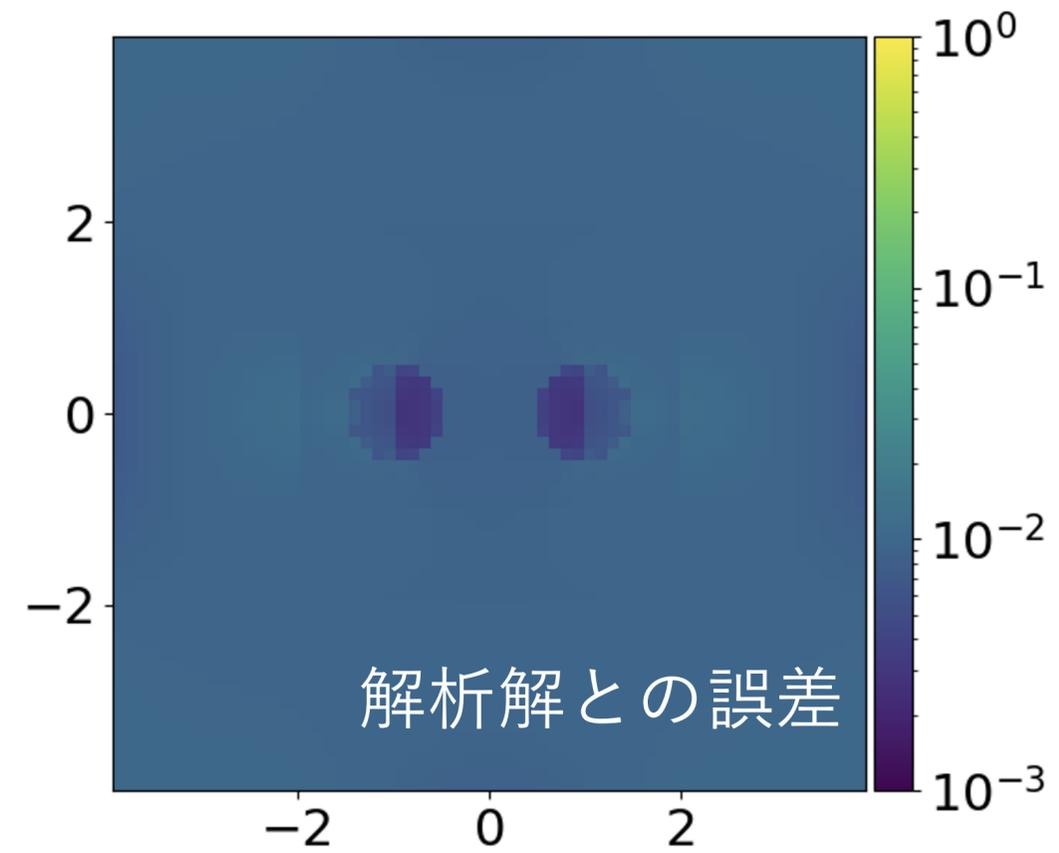
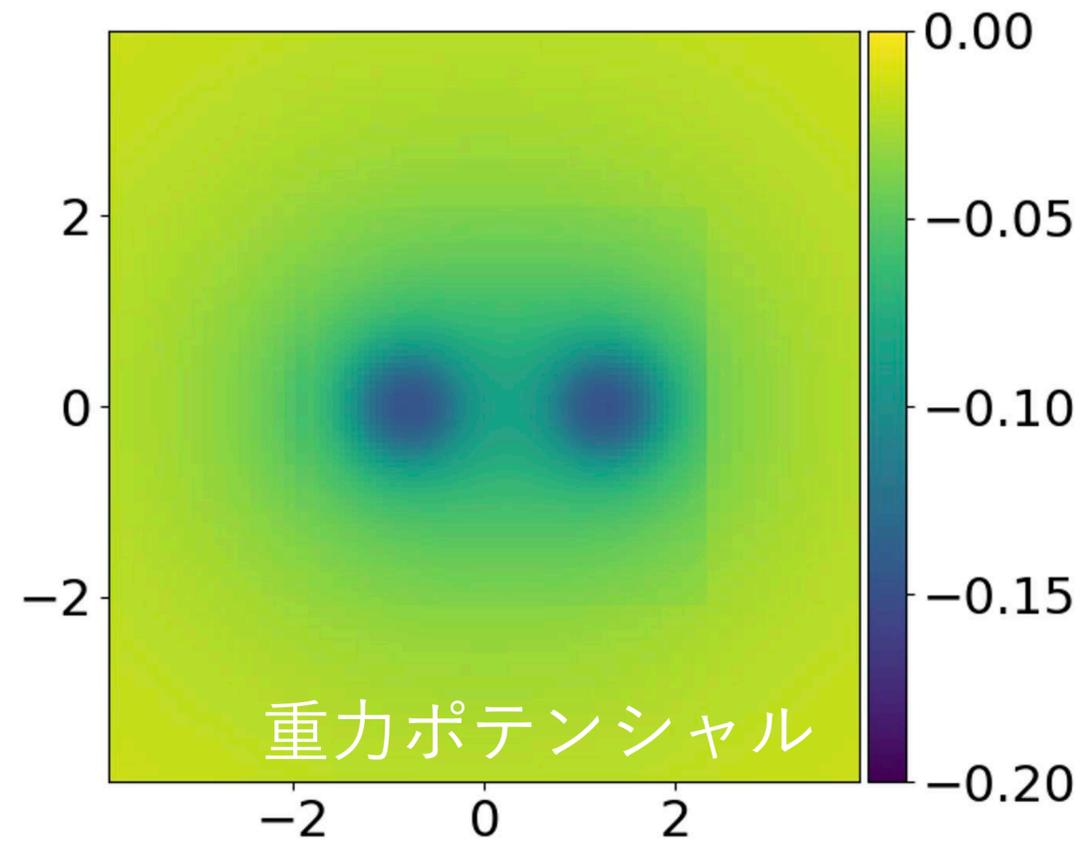
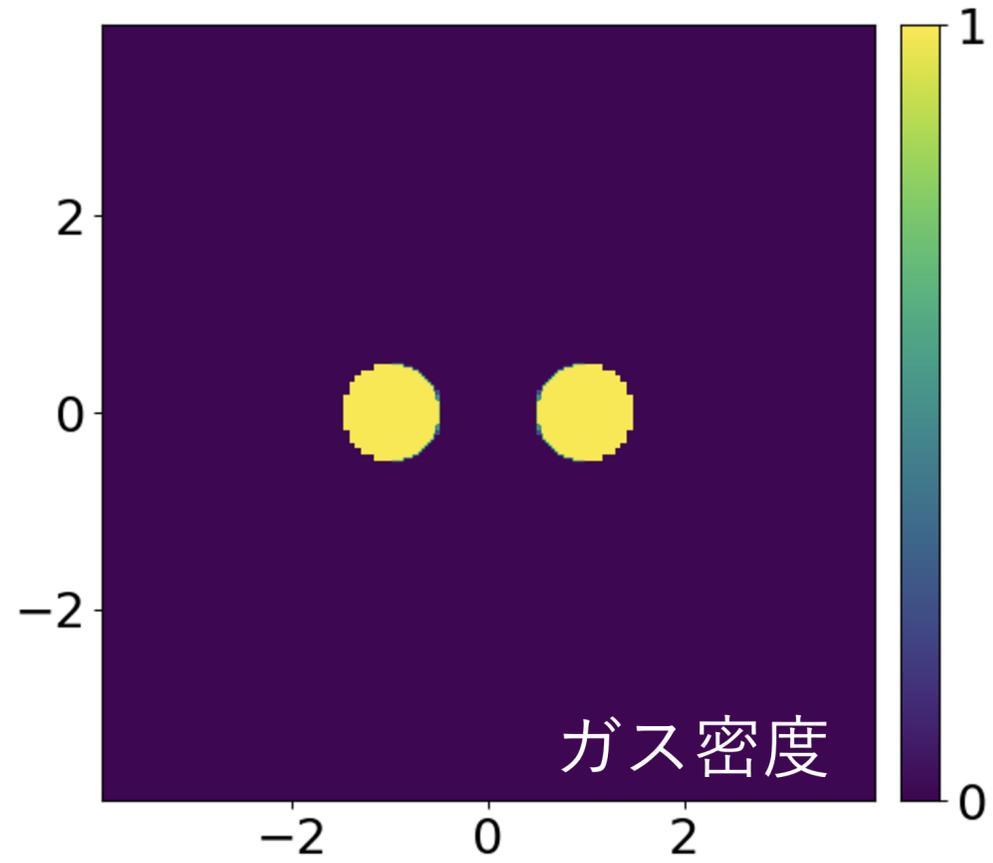


Shocktube 問題
セル数: 128^3

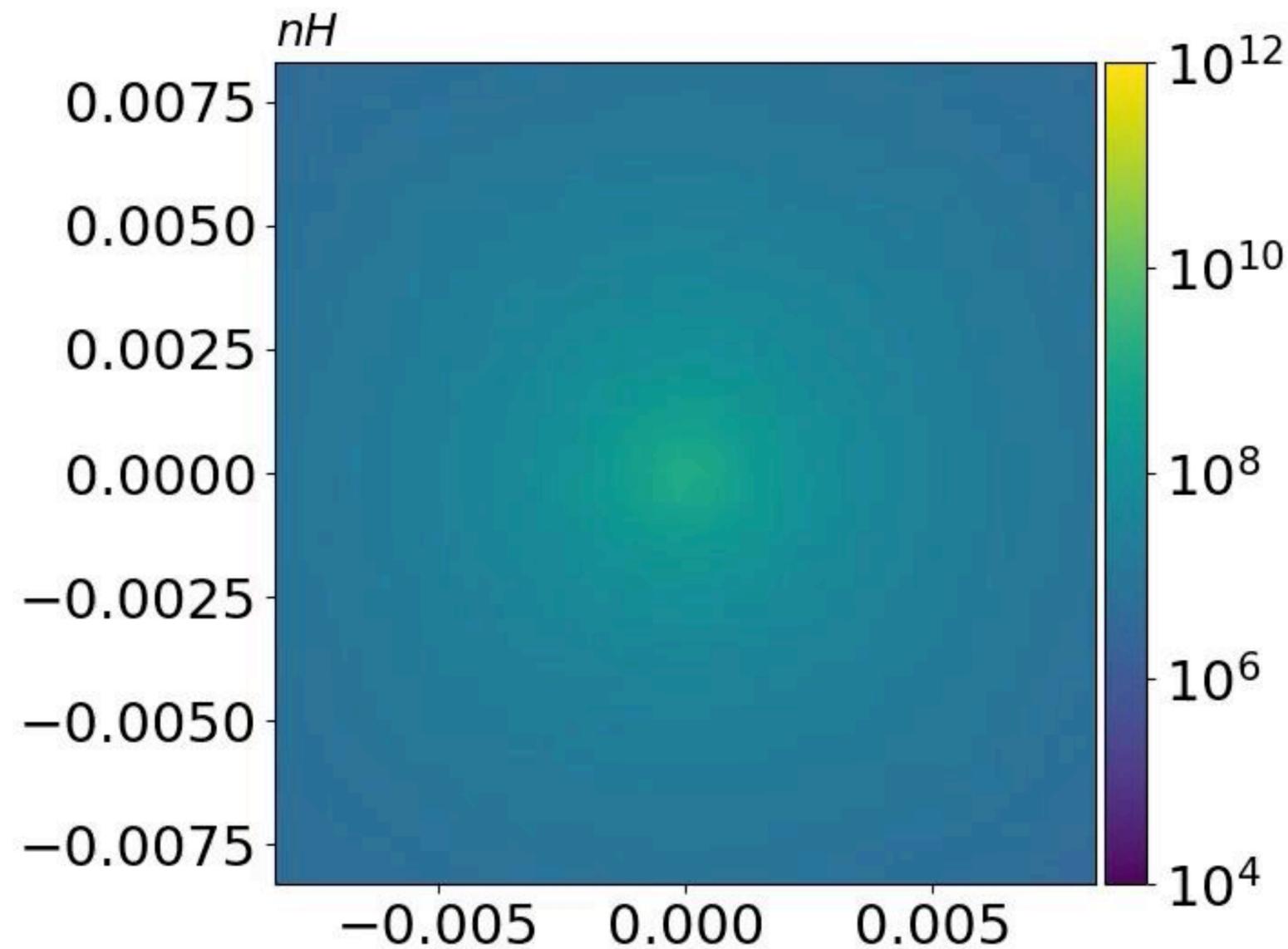
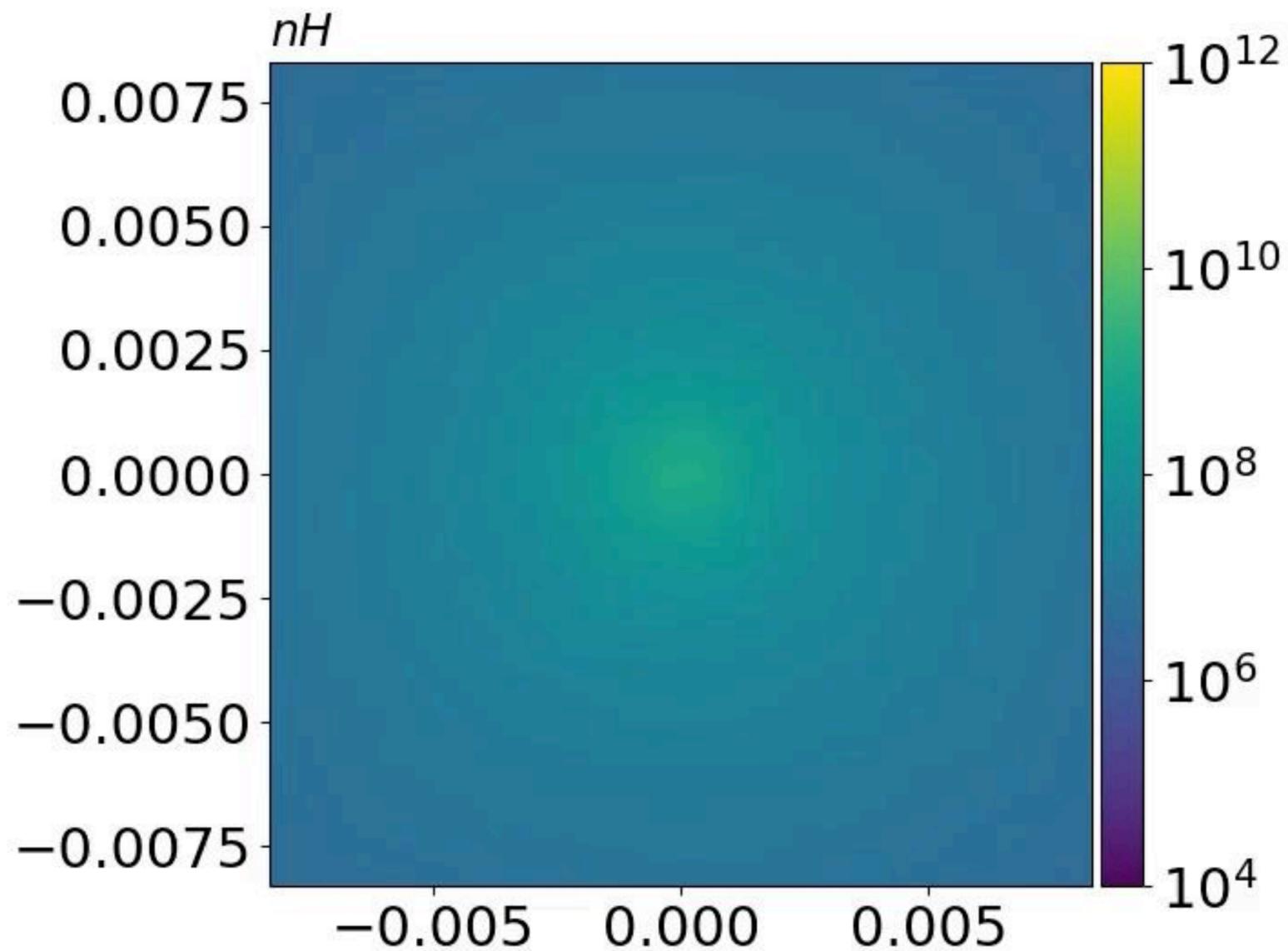
Nested gridで段数を
伸ばしてみる

計算の様子

自己重力計算



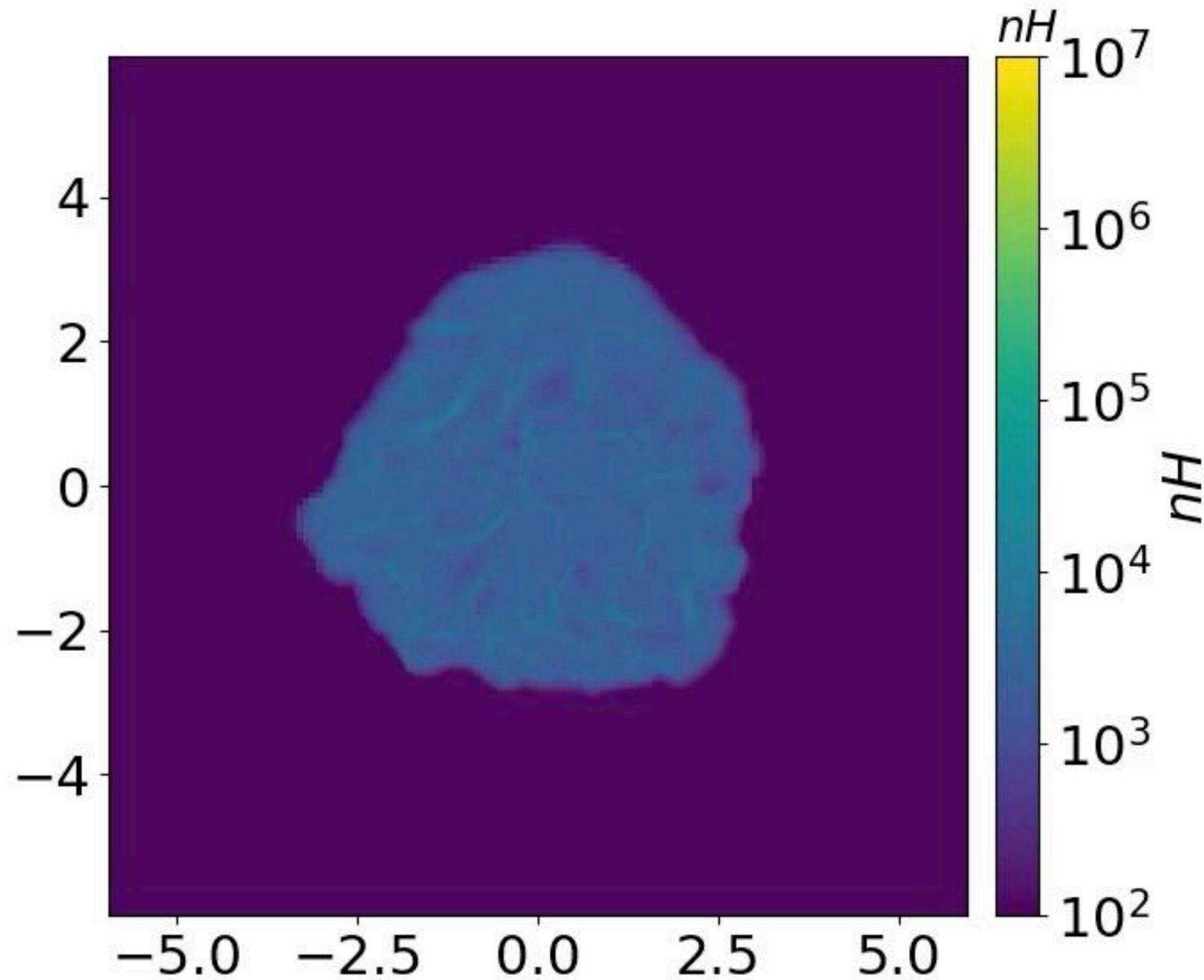
計算の様子: BE球 (自己重力 + 流体)



密度進化の様子

計算の様子

GMC (自己重力 + 流体)



質量: $1.e4$ Msun

半径: 3pc

最大解像度: 302 au

最大レベル9

1コア+1GPU計算 (H100, Pegasus)
(終了まで1-2ヶ月くらい?)

今はこの計算をテストモデルに高速化を図っている (malloc重い)

(計算途中)

まとめ

GPU上で稼働するAMR流体コードの開発を行っている

現状はテスト計算を実施しており、来年度での科学的成果の創出を目指して、コード開発を続けていきたい。

現状, SFUMATO GPUの開発チームは実質1人なので、**仲間を募集中**です。