

M27c

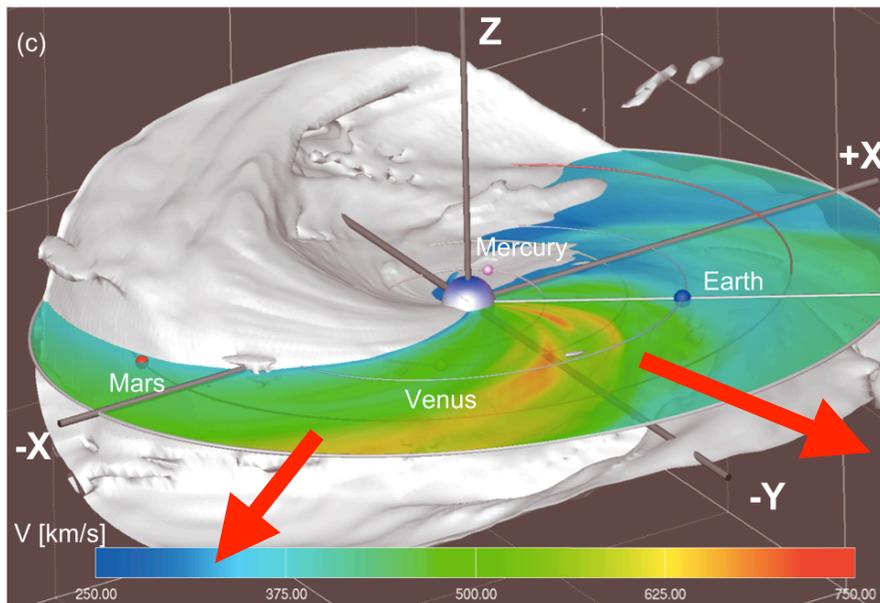
# 超並列磁気流体シミュレーションコード OpenMHD-GPU の開発

銭谷誠司（神戸大学）

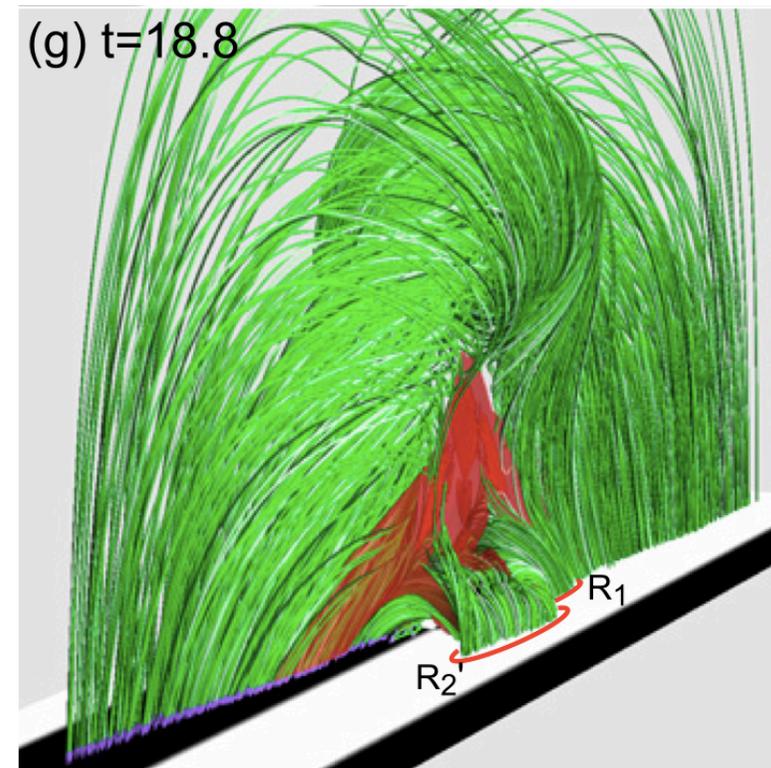
- ・ 1. OpenMHD の概要
- ・ 2. GPU 対応
- ・ 3. クラウド利用
- ・ 4. 利用実績

# 磁気流体 (MHD) シミュレーション

- ・ 太陽・宇宙プラズマ研究の必須ツール
- ・ 高度なシミュレーション技法：日進月歩で改良が進む



Shiota et al. 2014 Space Weather



Kusano et al. 2012 ApJ

# 公開MHDコード

- CANS (2002頃～)

- <https://www.kwasan.kyoto-u.ac.jp/~yokoyama/etc/cans/>
- 東京大学 (現・京都大学) 横山央明先生
- Fortran 77, MPI, IDL可視化

- CANS+ (2014～)

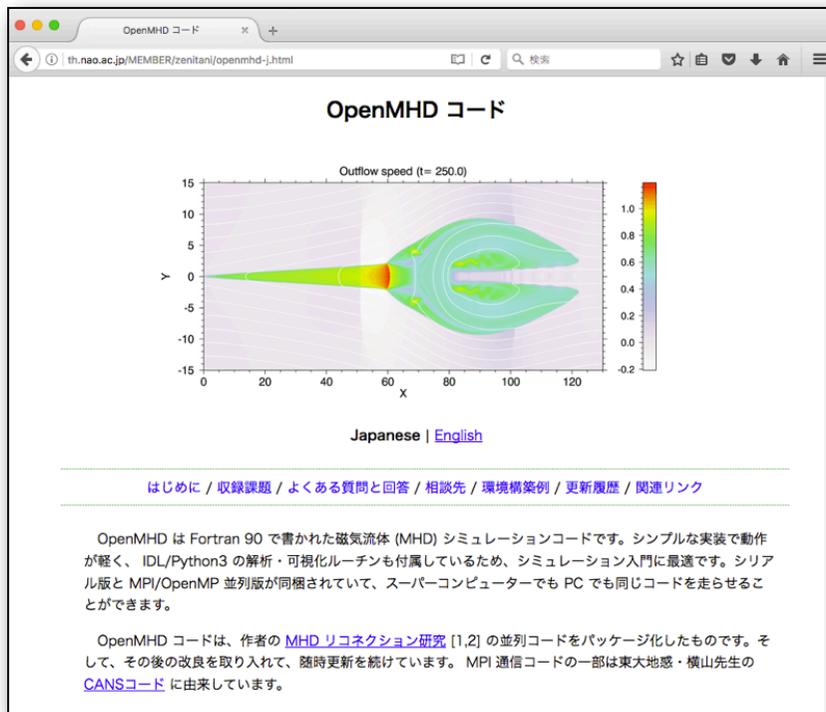
- <http://www.astro.phys.s.chiba-u.ac.jp/cans/doc/>
- 千葉大学 松本洋介さんら
- Fortran 90, MPI+OpenMP, IDL可視化
- 千葉大サマースクール

- OpenMHD (2010～)

- <https://sci.nao.ac.jp/MEMBER/zenitani/openmhd-j.html>
- Fortran 90, MPI+OpenMP & CUDA Fortran, MPI-GPU
- Python, IDL可視化

# OpenMHD

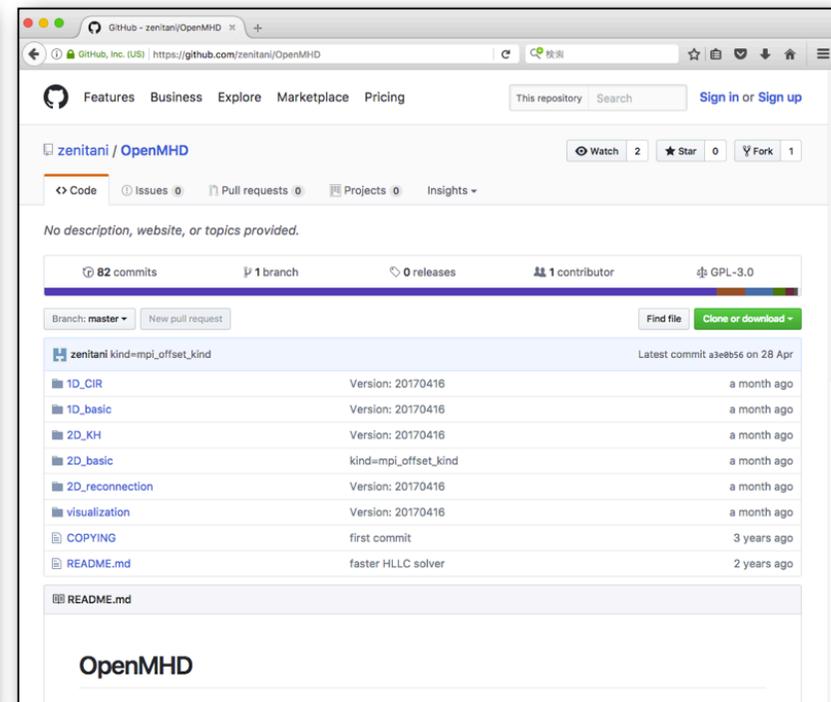
- 2010年から公開、技術詳細→次々頁
- 日本語・英語のオンラインドキュメント
- 開発中のコードも github で公開
- サポートメーリングリスト (41名参加)



The screenshot shows the OpenMHD website. At the top, it says "OpenMHD コード". Below that is a plot titled "Outflow speed (t= 250.0)". The plot shows a velocity field with a color scale from 0.0 to 1.0. The x-axis ranges from 0 to 120, and the y-axis ranges from -15 to 15. Below the plot, there are links for "Japanese" and "English". At the bottom, there is a navigation menu with links: "はじめに / 収録課題 / よくある質問と回答 / 相談先 / 環境構築例 / 更新履歴 / 関連リンク". Below the menu, there is a paragraph of text in Japanese describing the code.

OpenMHD は Fortran 90 で書かれた磁気流体 (MHD) シミュレーションコードです。シンプルな実装で動作が軽く、IDL/Python3 の解析・可視化ルーチンも付属しているため、シミュレーション入門に最適です。シリアル版と MPI/OpenMP 並列版が同梱されていて、スーパーコンピュータでも PC でも同じコードを走らせることができます。

OpenMHD コードは、作者の [MHD リコネクション研究](#) [1,2] の並列コードをパッケージ化したものです。そして、その後の改良を取り入れて、随時更新を続けています。MPI 通信コードの一部は東大地惑・横山先生の [CANSコード](#) に由来しています。



The screenshot shows the GitHub repository page for zenitani/OpenMHD. The repository has 82 commits, 1 branch, 0 releases, 1 contributor, and is licensed under GPL-3.0. The repository contains several files and folders:

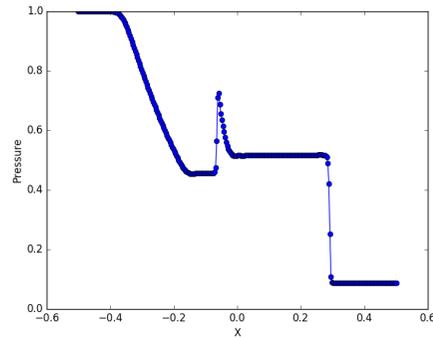
File/Folder	Version	Last Commit
1D_CIR	Version: 20170416	a month ago
1D_basic	Version: 20170416	a month ago
2D_KH	Version: 20170416	a month ago
2D_basic	kind=mpl_offset_kind	a month ago
2D_reconnection	Version: 20170416	a month ago
visualization	Version: 20170416	a month ago
COPYING	first commit	3 years ago
README.md	faster HLLC solver	2 years ago

The repository also has a README.md file. The repository name is "OpenMHD".

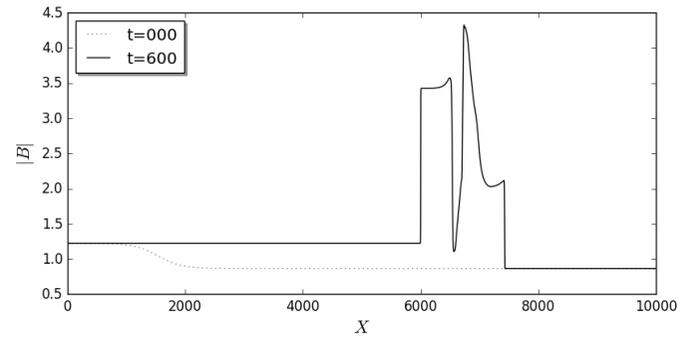
<https://sci.nao.ac.jp/MEMBER/zenitani/openmhd-j.html>

# 収録問題

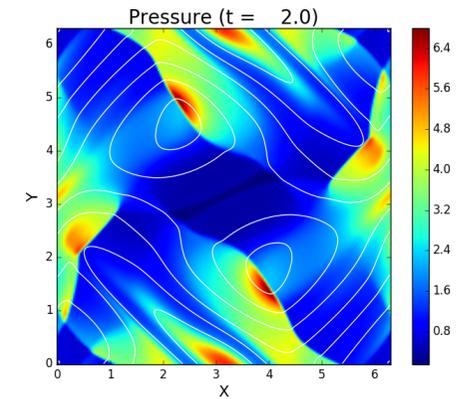
- リーマン問題



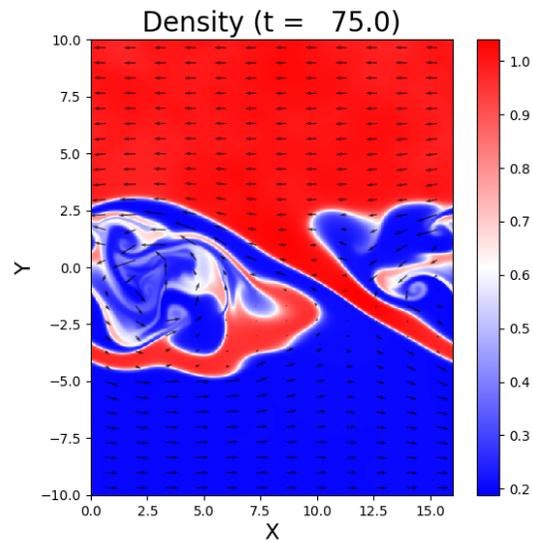
- 太陽風問題



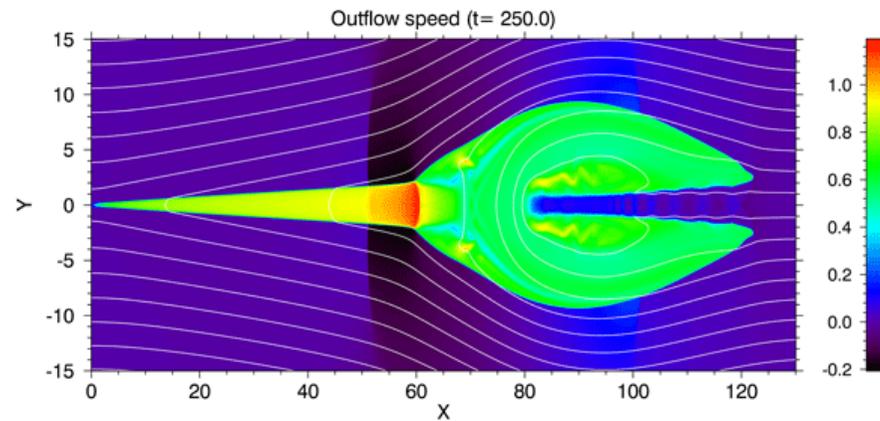
- Orszag-Tang 渦



- Kelvin-Helmholtz 不安定



- 磁気リコネクション



# OpenMHD 技術詳細

## • 数値解法

- 時間： 2次精度SSP-RK法
- 空間： TVD法、2次MUSCL補間
- 数値流束： HLLD法 (HLLC法を併用)
- div-B 補正： Hyperbolic divergence cleaning

現在の標準技術の  
組み合わせ

## • 並列化

- プロセス並列： MPI (MPI通信 or SHM通信)
- スレッド並列： OpenMP or GPU (CUDA)

セールス  
ポイント

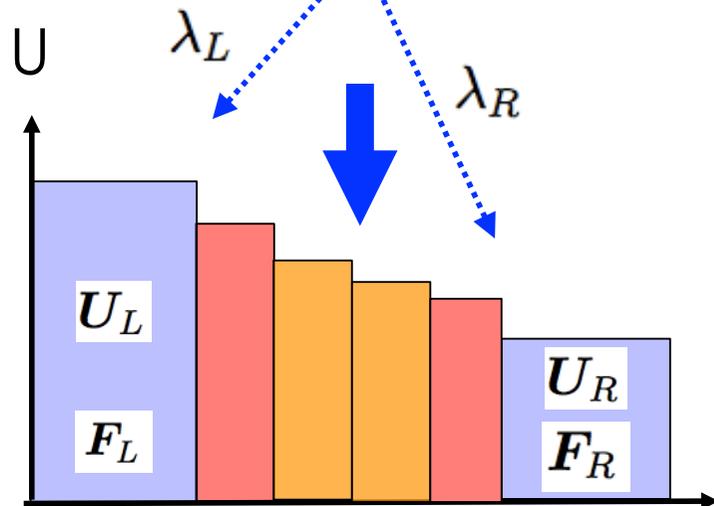
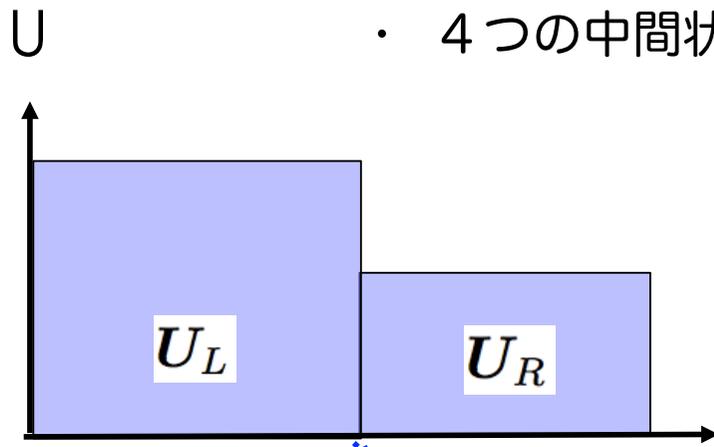
## • 可視化ツール

- Python (matplotlib, Jupyter Notebook対応)
- IDL

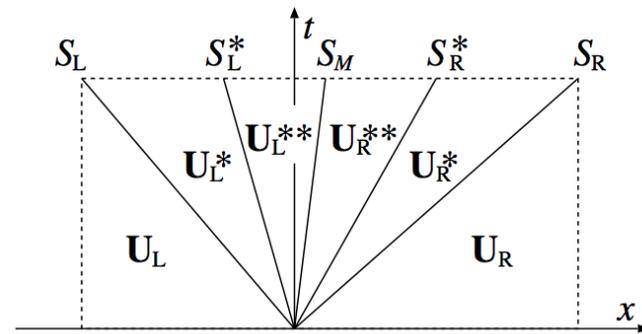
いち早く  
Python 3 を  
取り入れた

# 数値流束計算：HLLD法

- セル間の時間発展をリーマン問題で近似
- 4つの中間状態を想定 (Miyoshi & Kusano 2005)



$$F_{\text{HLLD}} = \begin{cases} F_L & \text{if } S_L > 0, \\ F_L^* & \text{if } S_L \leq 0 \leq S_L^*, \\ F_L^{**} & \text{if } S_L^* \leq 0 \leq S_M, \\ F_R^{**} & \text{if } S_M \leq 0 \leq S_R^*, \\ F_R^* & \text{if } S_R^* \leq 0 \leq S_R, \\ F_R & \text{if } S_R < 0. \end{cases}$$



# 共有メモリ通信 (SHM通信)

- MPI で
  - ノード外 → MPI 通信
  - ノード内 → 共有メモリ経由でデータをやりとり
  - MPI-3 shared memory window
- OpenMHDでの試験実装：
  - MPI 通信の方がやや高速
  - チューニング不足？
- GPU-MPI 時代に役に立つ可能性

Computing (2013) 95:1121–1136  
DOI 10.1007/s00607-013-0324-2

## MPI + MPI: a new hybrid approach to parallel programming with MPI plus shared memory

Torsten Hoefler · James Dinan · Darius Buntinas ·  
Pavan Balaji · Brian Barrett · Ron Brightwell ·  
William Gropp · Vivek Kale · Rajeew Thakur

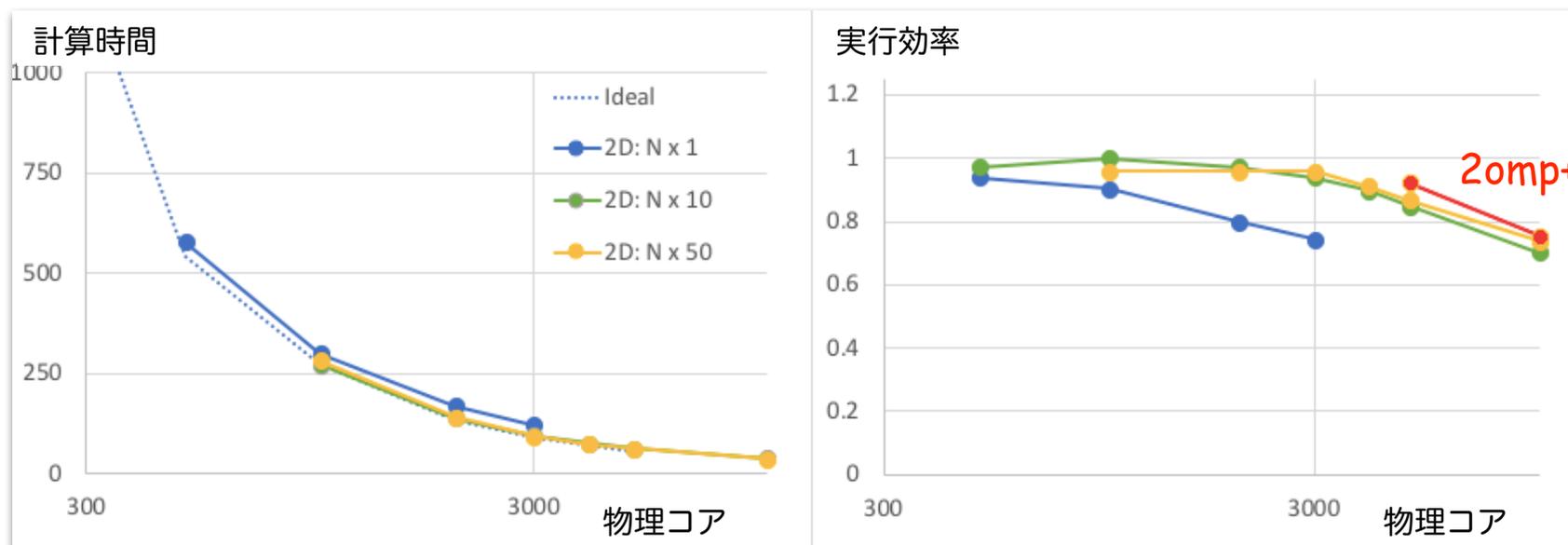
Received: 22 December 2012 / Accepted: 25 April 2013 / Published online: 19 May 2013  
© Springer-Verlag Wien 2013

**Abstract** Hybrid parallel programming with the message passing interface (MPI) for internode communication in conjunction with a shared-memory programming model to manage intranode parallelism has become a dominant approach to scalable parallel programming. While this model provides a great deal of flexibility and performance potential, it saddles programmers with the complexity of utilizing two parallel

T. Hoefler (✉)  
ETH Zurich, Zurich, Switzerland  
e-mail: htor@inf.ethz.ch

# 超並列性能 (Strong scaling)

- 多次元領域分割とノンブロッキング通信を使い  
少なくとも 5000 コアまで良好な並列性能
- ハイパースレッディング ON + OpenMP 2 スレッドで最速  
(京大KDKコンピューターの特殊事情)



- スパコンGPU化の流れ

- 電力性能的にも有利
- TOP 500 スパコンの上位 8/10、全体の 342/500 が GPU を活用

- プラズマシミュレーション分野でのGPU利用

- 2010 杉山さん (JAMSTEC) GPU PICコードの開発
- 2014 齊藤慎司さん (名大) GPU, MIC を利用したPICコード
- 2014 淵田さん・近藤さん (愛媛大) GPU-CPU 連結 MHDコード
- 2020 銭谷ら (神戸大) OpenMHD-GPU を公開

- OpenMHD-GPU

- CUDA Fortran を用いて NVIDIA GPU に完全対応
- GPU-MPI にも対応
- ⇒ OpenMHD (2020) に収録・公開中

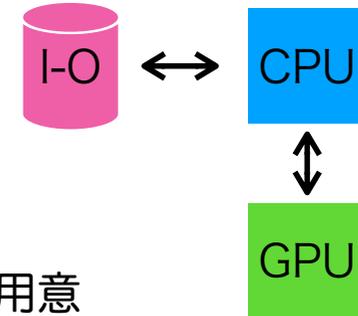
# CUDA Fortran による GPU 移植 (1/3)

- 移植方針

- I-O 以外の主要計算ループを全て GPU 側に移動

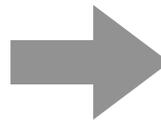
- 移植手順

- 1. **ホスト (PC)** 用・**デバイス (GPU)** 用の変数をそれぞれ用意
- 2. サブルーチンにホスト・デバイス用の修飾子を追加
- 3. デバイス用サブルーチンへの移植。  
ループの中身がデバイスルーチンになると思えば良い



```
call limiter(...)
```

```
subroutine limiter(...)  
    ...  
    do j=1,jx  
        do i=1,ix  
            ...  
        enddo  
    enddo
```



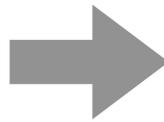
```
call <<<dim3,dim3>>limiter(...)
```

```
attributes(global) &  
subroutine limiter(...)  
    ...  
    j = (blockIdx%y-1)*blockDim%y + threadIdx%y  
    i = (blockIdx%x-1)*blockDim%x + threadIdx%x  
    if( (1<=j).and.(j<=jx) ) then  
        if( (1<=i).and.(i<=ix) ) then  
            ...  
        endif  
    endif
```

# CUDA Fortran による GPU 移植 (2/3)

- 開発上の難点：
  - 1) デバイス配列の部分指定 (:)
    - コンパイルは通るが実行時に異常動作
    - 明示的にループを書いて**ディレクティブ**でGPUカーネル化

```
! left/right
U(ix, :, :) = U(2, :, :)
U(1, :, :) = U(ix-1, :, :)
```



```
!$cuf kernel do(2) <<<*, *>>>
do k=1,var1
  do j=1,jx
    U(ix,j,k) = U(2,j,k)
    U(1,j,k) = U(ix-1,j,k)
  enddo
enddo
```

- 2) 非同期処理の混在
  - デバイス変数のパッキング処理と (ノンブロッキング) MPI 通信など、非同期処理機構が並走すると想定外のデータ混入が起きる
  - cudaDeviceSync, cudaStreamSync で明示的に同期
- 3) 古い情報？
  - デバイス変数・サブルーチンを module にまとめる必要はない
- 4) 開発ツールの変化
  - 新環境で旧ツール (プロファイラ) が利用できない

# CUDA Fortran による GPU 移植 (3/3)

- 参考資料

- NEC/九州大学・筑波大学の GPU講習会資料

- <https://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/doc/users/forum/forum20100929/1.pdf>

- <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/wp-content/uploads/sites/14/2012/12/gpulec4.pdf>

- NVIDIA CUDA Fortran Programming Guide

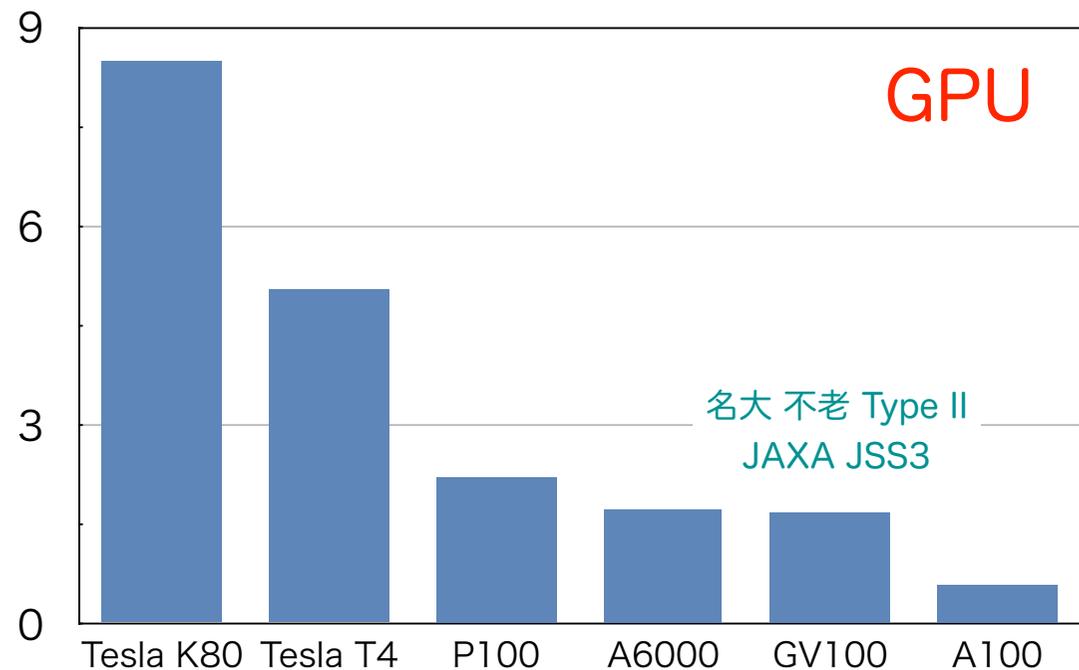
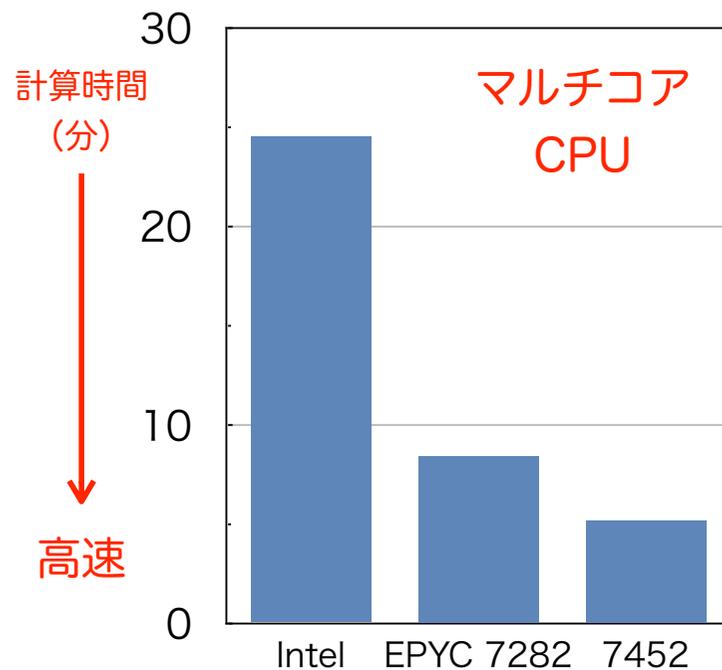
- <https://docs.nvidia.com/hpc-sdk/compiler/cuda-fortran-prog-guide/>

- CUDA Fortran for Scientists and Engineers **【書籍】**

- <https://www.amazon.co.jp/dp/0124169708>

# ベンチマーク: 良好なノード性能

- 基準CPU (Intel i9) 1コアで70-75分の2次元リコネクション計算



名大 不老 Type II  
JAXA JSS3

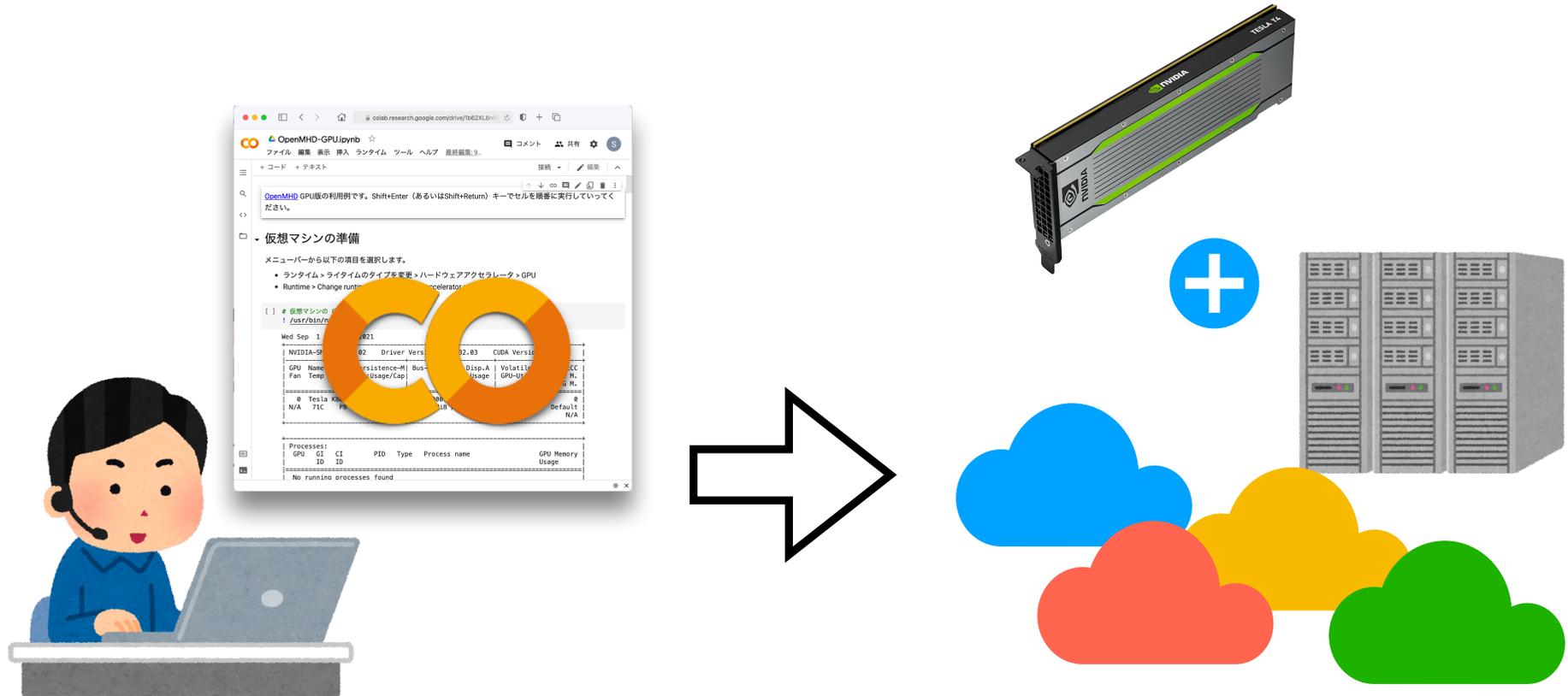


JAMSTEC  
地球シミュレータ



- Intel i9-9900K 8コア
- AMD EPYC 7282 16コア
- AMD EPYC 7452 32コア

# OpenMHDのクラウド利用：Google Colaboratory



- ブラウザで操作
- Jupyter ノートブック

- Googleクラウド上の仮想マシン
- GPUインスタンスも利用可

# Google Colaboratory in action

The screenshot shows a Google Colaboratory notebook interface. At the top, the browser address bar shows the URL `colab.research.google.com/drive/1b62XL8nN...`. The notebook title is `OpenMHD-GPU.ipynb`. The main content area contains a text cell with the following text:

OpenMHD GPU版の利用例です。Shift+Enter (あるいはShift+Return) キーでセルを順番に実行して行ってください。

Below this is a code cell titled "仮想マシンの準備" (Virtual Machine Preparation). The code cell contains the following text:

メニューバーから以下の項目を選択します。

- ランタイム > ライタイムのタイプを変更 > ハードウェアアクセラレータ > GPU
- Runtime > Change runtime type > Hardware accelerator > GPU

The code cell also contains a comment and a command:

```
[ ] # 仮想マシンの GPU を確認します。  
! /usr/bin/nvidia-smi
```

The terminal output shows the following information:

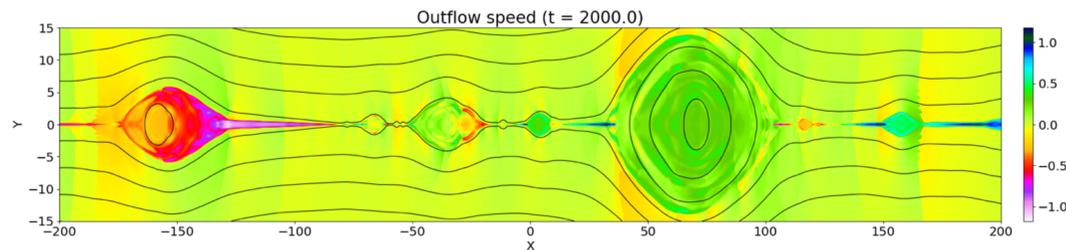
```
Wed Sep 1 16:19:55 2021  
+-----+  
| NVIDIA-SMI 470.57.02    Driver Version: 460.32.03    CUDA Version: 11.2    |  
+-----+  
| GPU   Name           Persistence-M| Bus-Id        Disp.A | Volatile Uncorr. ECC |  
| Fan  Temp  Perf    Pwr:Usage/Cap|      Memory-Usage | GPU-Util  Compute M. |  
|                                           MIG M.         |  
+-----+  
|    0   Tesla K80           Off          | 00000000:00:04:0 Off |                    0 |  
| N/A   71C    P8             31W / 149W |      0MiB / 11441MiB |      0%      Default |  
+-----+  
  
+-----+  
| Processes:                                                       GPU Memory |  
|  GPU   GI    CI          PID    Type    Process name                      Usage    |  
|      ID    ID                                         |          |  
+-----+  
| No running processes found                                     |          |  
+-----+
```

<https://colab.research.google.com/drive/1b62XL8nN5W7oxPTCiYPH8M265JQ5gZla?usp=sharing>

# OpenMHD の利用実績

- 査読論文：12本
  - 銭谷筆頭 (3)、銭谷共著 (5)、独立論文 (4)
- 修士論文・卒業論文：3本
  - 神戸大学 (3)

## 磁気リコネクション問題

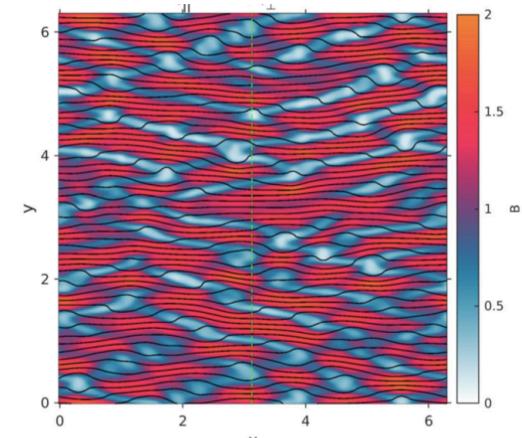


SZ & Miyoshi 2020 ApJL

M21a 山本さん発表

M24b 渡邊さん発表

## Double-polytropicプラズマ中のミラーモード揺らぎ構造



Teh & SZ 2019, 2020 ApJ

# まとめ

- 1. OpenMHD の紹介
- 2. GPU対応
  - CUDA Fortranによるコード移植
  - 良好なノード性能
- 3. クラウド対応
  - Google Colaboratory
- 4. 利用実績
  - 査読論文 12本・卒業論文・修士論文3本
- URL
  - <https://sci.nao.ac.jp/MEMBER/zenitani/openmhd-j.html>