

GPU による多相流解析コード JUPITER の Poisson 方程式の高速化 A GPU-accelerated Poisson equation solver for multiphase CFD code JUPITER

- 小野寺 直幸, 原子力機構, 千葉県柏市若柴 178-4 柏の葉キャンパス 148 街区 4,
onodera.naoyuki@jaea.go.jp
井戸村 泰宏, 原子力機構, 千葉県柏市若柴 178-4 柏の葉キャンパス 148 街区 4,
idomura.yasuhiro@jaea.go.jp
アリ ユスフ, 原子力機構, 千葉県柏市若柴 178-4 柏の葉キャンパス 148 街区 4,
ali.yussuf@jaea.go.jp
山下 晋, 原子力機構, 茨城県那珂郡東海村大字舟石川 765 番地 1,
yamashita.susumu@jaea.go.jp
伊奈 拓也, 理化学研究所, 兵庫県神戸市中央区港島南町 7 丁目 1-2 6,
takuya.ina@riken.jp
今村 俊幸, 理化学研究所, 兵庫県神戸市中央区港島南町 7 丁目 1-2 6,
imamura.toshiyuki@riken.jp
Naoyuki Onodera, Japan Atomic Energy Agency, 178-4 Wakashiba, Kashiwa, Chiba, JAPAN
Yasuhiro Idomura, Japan Atomic Energy Agency, 178-4 Wakashiba, Kashiwa, Chiba, JAPAN
Ali Yussuf, Japan Atomic Energy Agency, 178-4 Wakashiba, Kashiwa, Chiba, JAPAN
Susumu Yamashita, Japan Atomic Energy Agency, 765-1 Funaiishikawa, Tokai, Naka, Ibaraki, JAPAN
Takuya Ina, Riken Center for Computational Science, Kobe, JAPAN,
Toshiyuki Imamura, Riken Center for Computational Science, Kobe, JAPAN,

Transient heat flow analysis of nuclear reactors is very important from the view point of efficient design and safety. We have developed the stencil-based CFD code JUPITER for simulating three-dimensional multiphase flows. We extended the JUPITER with GPU-accelerated Poisson solvers based on the P-CG and P-CBCG methods. All main kernels were implemented using CUDA, and the GPU kernel function is well tuned to achieve high performance on the latest Volta-core GPUs. The developed solvers showed good strong scaling up to 2,048 GPUs/CPUs on the Summit (NVIDIA TESLA V100), the ABCI (NVIDIA TESLA V100), the Oakforest-PACS (Intel Knights Landing). Finally, the performance gain from the Oakforest-PACS ranges from 1.2 ~ 1.6× on the Summit and 1.4 ~ 1.7× on the ABCI, respectively.

1. 緒言

過酷事故 (SA) 時における原子炉内溶融物の移行挙動の解明は、事故時の炉内状況把握および廃炉作業の効率化の観点から非常に重要である。しかしながら、既存の SA 解析コードは事前進展シナリオが予め与えられているなど多くの不確かさが含まれており、複雑な構造物で構成される原子炉内での現象把握が困難である。その課題に対して日本原子力研究開発機構 (JAEA) では、多相多成分熱流動解析コード JUPITER [参考文献 1] の開発を進めている。JUPITER は多種金属および炉内構造物を含んだ溶融物解析が可能であり、炉内簡略模擬体系において SA を模擬した原子炉圧力容器および下部ベデスタルにおける溶融物の移行挙動解析が行われてきた。しかしながら、多相流体解析では圧力 Poisson 方程式がボトルネックとなり、実機体系の解析が必要となる計算の大規模化や高速化が困難である。

上記課題に対して、Poisson 方程式の GPU 化を行うことで、計算の高速化を目指す。GPU は画像処理用の演算機であったが、近年これを汎用計算に適用する研究が盛んに行われている。GPU は従来の演算機である CPU と比べて消費電力あたりの演算性能が極めて高いため、将来のエクサスケールの計算機の有望なアーキテクチャと考えられている。

Poisson 方程式の並列 GPU 計算において、GPU のノード間通信及び共役勾配法での集団通信のオーバーヘッドが問題となる。本研究では、それらの課題に対して、隣接通信と GPU 計算のオーバーラップ手法及び集団通信回数が削減可能なチェビシェフ基底共

役勾配 (P-CBCG) 法の導入を行った。高速化した JUPITER の性能測定として Summit [参考文献 2] 及び ABCI [参考文献 3] を用いて強スケーリング性能測定を実施した。

2. GPU スーパーコンピュータにおける強スケーリング性能測定

多相多成分熱流動解析コード JUPITER は、Staggered 格子配置を採用しており、以下の非圧縮性 Poisson 方程式に対して、2次精度の中心差分を用いて離散化手法している。

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_i}$$

ここで、P は圧力、 ρ は VOF 関数から求められる密度、 Δt は時間ステップ幅、 u_i^* はフラクショナルステップでの速度、添字 i はアインシュタインの縮約表での各軸方向を表す。2次精度の離散化では、左辺は 7 重ブロック対角行列となる。

圧力 Poisson 方程式の反復解法として、前処理付き共役勾配 (P-CG) 法、及び、集団通信回数の削減が可能な前処理付きチェビシェフ基底共役勾配 (P-CBCG) 法を実装した。前処理手法として、ブロックヤコビ法を適用した不完全 LU 法を採用した。前処理手法を GPU にて効率的に実施するために、ブロック領域を $1 \times 8 \times 8$ に設定した。計算カーネルは CUDA を用いて実装され、また、計算の高速化として、隣接通信と GPU 計算のオーバーラップ手法を導入した。

GPU スーパーコンピュータである Summit (NVIDIA TESLA V100)、ABCI (NVIDIA TESLA V100)、Oakforest-PACS (Intel

Knights Landing)[参考文献 4]にて、強スケーリングの性能測定を実施した。図 1 に解析結果を示す。青色が計算及び隣接通信時間、橙色が集団通信時間となる。計算結果より、CPU/GPU の解析において良いスケーリングが得られていることが確認できる。また、P-CBCG 法の解析では、P-CG 法と比較して、橙色の集団通信時間が削減できていることが確認できる。最終的には、P-CBCG 法の 512 並列から 2048 並列の計算において同数の CPU/GPU 性能を比較すると、Summit にて 1.2-1.6 倍の高速化、ABCI にて 1.4-1.7 倍の高速化が達成された[参考文献 5]。

3. まとめ

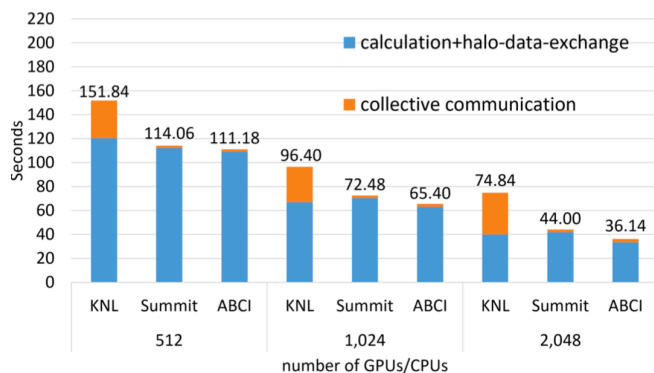
多相多成分熱流動解析コード JUPITER の Poisson 方程式に対して、CUDA を用いた GPU 対応による高速化を行った。GPU スーパーコンピュータである Summit 及び ABCI にて強スケーリング性能測定を実施した結果、Oakforest PACS と比較して、2048 並列の P-CBCG 法の計算にて 1.6 倍程度の高速化が達成された。

4. 謝辞

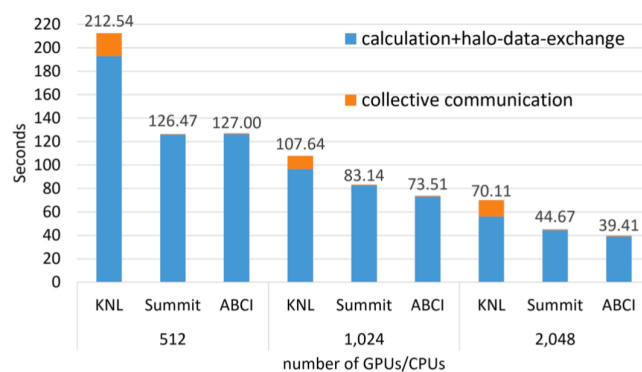
本研究の一部は、科学研究費補助金・基盤研究 (C) 課題番号 19K11992、17K06570、科学研究費補助金・基盤研究 (B) 課題番号 17H03493、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点課題番号:jh190049-NAH、jh190050-NAH から支援を頂いた。本計算コード開発には東京工業大学クラウド型ビッグデータグリーンスーパーコンピュータ「TSUBAME3.0」、産業技術総合研究所 AI 橋渡しクラウド「ABCI」、日本原子力研究開発機構の大型計算機「ICEX」を使用した。記して謝意を表す。

参考文献

1. S. Yamashita, T. Ina, Y. Idomura, and H. Yoshida, “A numerical simulation method for molten material behavior in nuclear reactors,” Nuclear Eng. and Design, vol.322, pp.301–312, 2017. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0029549317303035>
2. Oak Ridge National Laboratory, “SUMMIT”, <https://www.olcf.ornl.gov/olcf-resources/compute-systems/summit>
3. National Institute of Advanced Industrial Science and Technology(AIST), “AI Bridging Cloud Infrastructure (ABCI)”, <https://abci.ai>
4. Joint Center for Advanced High Performance Computing (JCAHPC), “Oakforest-PACS”, <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp/service>
5. Y.Ali, N.Onodera, Y.Idomura, et al., “GPU Acceleration of Communication Avoiding Chebyshev Basis Conjugate Gradient Solver for Multiphase CFD Simulations”, 10th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (ScalA) held in conjunction with SC19, (Nov. 2019)



(a) P-CG cross platform results



(b) P-CBCG cross platform results

Fig. 1: Strong scaling results of (a)P-CG and (b)P-CBCG methods using the ABCI, the Summit, and the Oakforest-PACS.

(Number of grid points = $1,280 \times 1,280 \times 4,608$)