

GPU クラスタにおける核融合シミュレーションコードの実装

藤田 典久[†] 奴賀 秀男^{††} 朴 泰祐^{†,††} 井戸村 泰宏[‡]

1 はじめに

本研究では、核融合シミュレーション用プログラム GT5D (conservative global gyrokinetic toroidal full-*f* five-dimensional Vlasov simulation) [1] の大規模 GPU クラスタでの実行のための事前評価と実装後の性能評価を行う。GT5D は日本原子力研究開発機構で開発されたトカマクプラズマ中の乱流現象を記述するプログラムである。また、GPU クラスタを効率よく利用するために、1 ノード複数 GPU を利用する。以上の実装を、筑波大学で稼働中の高密度 GPU クラスタ HA-PACS[2] 上で行い、GPU を用いた高速化についての性能評価を行う。

2 GT5D の GPU 化と性能評価

オリジナルの GT5D コードは Fortran により OpenMP と MPI のハイブリッドコードとして記述されている。GPU 化に先立って CPU のみを使用するプログラムでプロファイルを取り、時間発展部の主要部分を GPU 化することにした。今回 GPU 化する範囲は 14dx_s, 14dx_r, 14dx_l, 14dx_nl, timedev_1~timedev_9 の 13 個のカーネル関数で、CPU での実行時間換算で全体の 75% に相当する。

HA-PACS において 1 ノードで CPU 4 コア、GPU 1 台を使用時のカーネル関数毎の性能比較では、最大で 3.37 倍、平均で 2.27 倍の高速化が得られた。また、16 ノードを使用した場合の時間発展全体の比較を表 1 に示す。ただし、5 次元のメッシュ分割数は $128 \times 128 \times 128 \times 4$ (最初の 3 次元は空間次元、残りは粒子の速度空間を示す)、MPI 分割数は $4 \times 4 \times 4$ の 3 次元 (空間分割に対応) として、1 つの MPI プロセスが 1 つの GPU の制御を行う。GPU (オーバーラップあり) は袖領域の通信と前後の計算をオーバーラップした場合の計算時間であり GPU (オーバーラップなし) は通信と計算のオーバーラップを行わない場合の計算時間である。GPU 化によってオーバーラップなしの場合は 1.29 倍の高速化が得られ、オーバーラップありの場合は 1.85 倍の高速化が得られた。

表 1: 時間発展 1 回あたりの計算時間

	計算時間 [s]	CPU 比
CPU	15.7	
GPU (オーバーラップなし)	12.2	1.29
GPU (オーバーラップあり)	8.5	1.85

3 まとめと今後の課題

本研究では核融合シミュレーションコード GT5D の GPU 化を行なった。カーネル関数単位では CPU と比較して最大で 3.37 倍の高速化が得られたものの、CPU よりも遅い関数もあり、最適化が不十分である。

1 ノードあたり 4GPU を利用して時間発展部全体を実行した場合、1 ノードあたり 16 コアの CPU を用いた場合と比べて 1.85 倍の高速化が達成できた。また、通信と計算のオーバーラップを行うことで、時間発展 1 回あたり約 1.44 倍の高速化が得られた。

現時点では、時間発展部の計算時間の約 75% しか GPU 化できておらず、時間発展全体の GPU 化と、各カーネル関数の最適化が今後の課題である。

謝辞

本研究の一部は日本学術振興会・多国間国際研究協力事業 (G8 Research Councils Initiative) プログラム研究課題「エクサスケール規模の核融合シミュレーション」による。また、本研究の遂行に当たり、HA-PACS を利用させて頂いた筑波大学計算科学研究センターに謝意を表す。

参考文献

- [1] Y.Idomura, M.Ida, T.Kano, N.Aiba, S.Tokuda, Conservative global gyrokinetic toroidal full-*f* five-dimensional Vlasov simulation, Computer Physics Communications, 179, 391-403, 2008
- [2] HA-PACS ベースクラスタ — 筑波大学 計算科学研究センター. <http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/CCS/research/project/ha-pacs/cluster>
- [3] 藤田 典久, 奴賀 秀男, 朴 泰祐, 井戸村 泰宏, 核融合シミュレーションコードの GPU クラスタ向け最適化, 並列/分散/協調処理に関するサマー・ワークショップ, 2012

[†] 筑波大学大学院システム情報工学研究科
^{††} 筑波大学計算科学研究センター
[‡] 日本原子力研究開発機構