

多相流体問題への省通信 GMRES 法の適用性評価

真弓明恵^{†1} 井戸村泰宏^{†1} 山田進^{†1} 伊奈拓也^{†1} 山下晋^{†1}

1. はじめに

日本原子力研究開発機構では東京電力福島第一原子力発電所事故で溶融した燃料の挙動を解析するために、多相多成分熱流動解析コード JUPITER[1] の開発を進めている。現状の計算規模では炉内構造物単体の燃料溶融シミュレーションは可能であるが、炉心全体のシミュレーションを実行するためにはエクサスケールマシンが必要となる。非圧縮流体モデルに基づく JUPITER コードでは圧力の Poisson 方程式の反復法ソルバが主要な計算コストを占めるが、スケーラビリティを向上する上でデータ通信コストがボトルネックとなるため、ソルバの省通信化が重要な課題である。

本研究ではこのデータ通信コストを削減するアルゴリズムとして省通信 (CA) -GMRES[2] を実装し、実問題における収束特性を調査することで、その有用性を評価する。

2. CA-GMRES

本研究で実装する CA-GMRES は、通常の GMRES 法をベースに、通信削減手法を加えることで高速化を図った手法である。この手法は s-step (Arnoldi(s)) 法をベースにしており、初めに s 本の Krylov 部分空間の基底を計算し、その基底を用いて通常の GMRES 法の s ステップの反復を一度に行うことにより、通信を削減している。

この手法は通常の GMRES と比較すると基底の直交性が厳密でなくなるため収束性が悪化するという問題があるが、CA-GMRES では一度に計算する基底の本数及びリスタートの回数を独立させることと、採用する基底を変更することにより、問題を回避する。

3. 実問題への適用

本研究では MATLAB R2015a (8.5.0.197613) を用い、MATLAB 関数として実装されている通常の GMRES と今回実装を行った CA-GMRES の残差履歴を比較した。CA-GMRES の基底は monomial basis 及び Newton basis を採用した。前処理は ILU 分解を適用し、左前処理で実装した。

3.1 対象とする実問題

本研究では、炉内構造物を模擬した体系における溶融物移行挙動解析[1] の行列データ (問題サイズ:104x104x265) に CA-GMRES を適用する。

3.2 適用結果

図 1 はリスタート数を 40 回に設定した通常の GMRES と、一度に計算する基底の本数 s=8 にしてリスタートまで

に計算する基底の本数を通常の GMRES と同様に 40 回に設定した CA-GMRES の収束特性を比較したものである。設定条件下では CA-GMRES の基底として monomial basis を採用した場合は残差が発散したが、Newton basis を採用した場合は通常の GMRES と同等の収束が示されている。

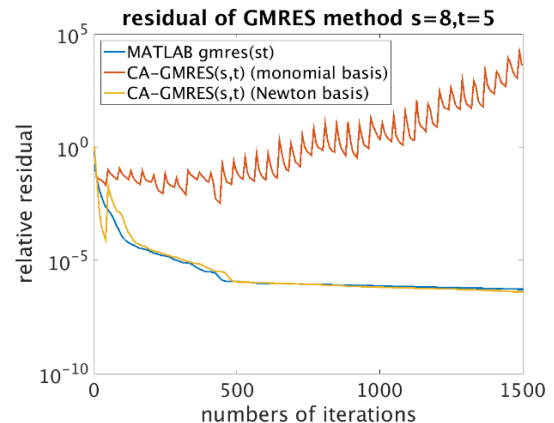


図 1 GMRES と CA-GMRES の残差履歴比較

4. 今後の課題

本研究では実問題に対しても CA-GMRES を適用可能であることは分かったが、CA-CG 等、他の省通信手法に関しても収束特性を調査することが今後の課題である。

また、本研究では Krylov 部分空間の基底として monomial basis と Newton basis を実装したが、s を増やした際に安定な基底として Chebyshev basis も挙げられているため、この基底の調査、実装も課題である。

現在行った実装では計算される残差と実際の残差に差がある問題が指摘されているため、それを解消する Residual Replacement[3] の実装も今後の課題である。

参考文献

- 1) 山下 晋, 徳島 二之, 倉田 正輝, 高瀬 和之, 吉田 啓之: JUPITER コードによる過酷時炉内構造物内の溶融物移行挙動に関する数値的検討, 日本機械学会第 28 回計算力学講演会論文集 (CD-ROM), p.3 (2015)
- 2) Mark Hoemmen, Communication-Avoiding Krylov Subspace Methods, A dissertation submitted in partial satisfaction of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy in Computer Science in the Graduate Division of the University of California, Berkeley (2010)
- 3) Erin Carson, Communication-Avoiding Krylov Subspace Methods in Theory and Practice, EECS Department, University of California, Berkeley, Technical Report No. UCB/EECS-2015-179 (2015) <http://www.eecs.berkeley.edu/Pubs/TechRpts/2015/EECS-2015-179.html>

^{†1} 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構
Japan Atomic Energy Agency