

## 圧縮対角格納形式の適用による多相流体コードの高速化

伊奈拓也<sup>†1</sup> 井戸村泰宏<sup>†1</sup> 山田進<sup>†1</sup> 真弓明恵<sup>†1</sup> 山下晋<sup>†1</sup>

日本原子力研究開発機構では過酷事故時の原子炉内熔融物の移行挙動を再現することを目的にした多相成分熱流動解析コード JUPITER[1]の開発を進めている。JUPITER コードは原子炉内熔融物の挙動を解析するために非圧縮性流体のナビエ・ストークス方程式、連続の式を連立して解いている。この過程で圧力のポアソン方程式を解く必要があり数値計算ライブラリ PETSc[2]の反復法ソルバを使用している。反復法ソルバは JUPITER コードのホットスポットとなっており、演算性能とスケーラビリティの向上が必須となっている。また、PETSc はフラット MPI 並列で計算を行うため、メモリ使用量が大きく大規模並列計算時に通信がボトルネックになりスケールしなくなる問題がある。PETSc は疎行列の格納形式として圧縮行格納 (CSR) 形式を使用している。しかし、構造格子における差分法で離散化した連立一次方程式の係数行列は規則的なブロック対角行列であるため間接参照の無い対角行列専用の圧縮対角格納 (DIA) 形式で格納することで効率的に計算することが可能である。ポアソン方程式を高速に計算するために DIA 形式に対応したハイブリッド並列共役勾配法のソルバを独自に開発することで JUPITER コードの演算性能とスケーラビリティを飛躍的に向上した。

共役勾配法は行列ベクトル積とベクトル同士の演算で構成されている。図 1 に CSR 形式の行列ベクトル積の擬似コードを示す。CSR 形式では間接参照を行うため SIMD 演算を行うことが困難である。さらに、JUPITER コードのポアソン方程式は 2 次中心差分法で離散化されているため各行の要素数となる最内ループの反復回数は最大で 7 回と少ないためソフトウェアパイプラインが適用されない問題がある。図 2 に DIA 形式の行列ベクトル積の擬似コードを示す。DIA 形式では間接参照が無いため SIMD 演算を実行できる上、最内ループの反復回数がベクトルの行数であるため行数の多いベクトルの場合にソフトウェアパイプラインが適用される。さらに、各行の 7 要素について図 3 に示すようにフルアンロールした。以上の最適化によって DIA ソルバではルーフラインモデルの 8 割以上の実行性能を達成できた。

開発した DIA 形式ソルバと PETSc のブロックヤコビ前処理 CG 法によるポアソン方程式の「京」における処理性能測定結果を表 1 に示す。コア数 32,768 の場合フラット並列で計算する PETSc では領域分割することができなくなるため性能測定を行っていない。同一コア数で計算時間

を比較すると開発したソルバの計算時間は PETSc の 3 分の 1 である。大規模並列性能を比較すると 8,192 コアで PETSc はスケールしなくなるが開発したソルバでは 32,768 コアでもスケールする。メモリ使用量を比較すると開発したソルバは PETSc の約 3 分の 1 のメモリ使用量である。PETSc では構造格子の直接参照用に用意された DMDA 形式の比較も行ったが、CSR 形式より処理性能が低下した。

今後の課題として、省通信アルゴリズムの導入や通信隠蔽手法の実装によるスケーラビリティのさらなる向上を目指す。

```
for(i=0; i<n; i++){
    q[i] = 0.;
    for(i2=ia[i]; i2<ia[i+1]; i2++){q[i] =q[i] + a[i2] * p[ja[i2]];}
}
```

図 1 CSR 形式の疎行列ベクトル積

```
for(i=0; i<n; i++){q[i]=0.0;}
for(j=0; j<ndia; j++){
    offset=index[j];
    for(i=0; i<n; i++){q[i]=q[i]+a[i+j*n]*p[i+offset];}
}
```

図 2 DIA 形式の疎行列ベクトル積

```
for(i=0; i<n; i++){
    q[i]=
        a[i]*p[i-nxy] +a[i+n]*p[i-nx]
        +a[i+2*n]*p[i-1]+a[i+3*n]*p[i]
        +a[i+4*n]*p[i+1]+a[i+5*n]*p[i+nx]
        +a[i+6*n]*p[i+nxy]}
}
```

図 3 JUPITER コード用の DIA 形式の疎行列ベクトル積

表 1 JUPITER コードにおけるポアソン方程式 (問題サイズ:832x832x1060, 反復回数:1000) の性能測定結果

コア数	DIA 形式 処理時間 [s]	PETSc 処理時間 [s]	DIA 形式 メモリ 使用量 [GB]	PETSc メモリ 使用量 [GB]
512	3.93	10.90	119.5	312.0
1024	1.87	5.66	128.9	328.5
2048	1.00	3.33	143.8	376.5
4096	0.52	1.82	173.6	480.0
8192	0.31	9.58	231.0	740.0
16384	0.20	-	349.4	-
32768	0.13	-	572.8	-

### 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熔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) S. Balay, et al., PETSc 3.6 Users Manual,  
<https://www.mcs.anl.gov/petsc/>, (2015)

<sup>†1</sup> 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構