

OpenACCによる大域的ジャイロ運動論コードのGPU高速化 GPU acceleration of global gyrokinetic code by OpenACC directives

元古 修平¹⁾, 今寺 賢志¹⁾
GENKO Shuhei¹⁾, IMADERA Kenji¹⁾

1) 京都大学大学院 エネルギー科学研究科
1) Graduate School of Energy Science, Kyoto University

核融合エネルギーの実用化に向けた課題の1つに、微視的不安定性によって駆動される乱流輸送現象の理解が挙げられる。一般に乱流輸送を取り扱うためにはジャイロ運動を粗視化したジャイロ運動論モデルが用いられるが、位相空間5次元を取り扱うことからその計算量は膨大であり、特に平衡分布関数とその揺動成分を自己無撞着に解くグローバルシミュレーションを行う場合には、10,000コア程度のノード並列やスレッド並列を用いたとしても、中規模のITERサイズ、あるいは大規模な原型炉サイズを解くためには、更なるシミュレーションの高速化が必要不可欠である。

そこで本研究では、グローバルシミュレーションの更なる高速化を目的として、グローバルジャイロ運動論コードGKNET [1]に対してOpenACCディレクティブによるGPU高速化を行った。一般に、OpenACCのみでは原則ノード当たり1機のGPUしか利用できないが、本研究ではMPIによるCPU並列とOpenACCによるGPU並列を併用することで、各CPUの高速化を担当するGPUに割り当て、ノード内の複数のGPUを活用できるようにした。加えて、GKNETで行っている離散フーリエ変換に対しても、cuFFT [2]と呼ばれるライブラリを用いることでGPU高速化を試みた。

OpenACCを用いてGPU高速化をするにあたり、まず2次元移流シミュレーションにおける高速化率を検証した。計算機はPlasma Simulator (NIFS) とMARCONI 100 (CINECA, Italy) を用いた (表1)。この検証では、Plasma Simulatorで最大2ノード、各ノード4コア2GPUを、MARCONI 100で最大4ノード、各ノード4コア4GPUを用いた。

	Plasma Simulator	MARCONI 100
GPU	NVIDIA Volta(Pcie) V100 x2	NVIDIA Volta(NVLink v2.0) V100×4
プロセッサ	Intel Xeon Gold 6252 (2.1GHz, 24[core]) x2	IBM POWER9 AC922 (3.1[GHz], 16[core]) × 2
メモリ構成	192 GB (16GB DDR4-2933 RDIMM x12)	256[GB] (16GB DDR4 DIMM × 16)

表1: 用いた計算機の構成

その結果、従来のMPIによるCPU並列のみを

用いた場合と比べ、Plasma Simulatorでは8~18倍、MARCONI 100では15~69倍に高速化された。特に、GPU数に反比例して実行時間は減少し、マルチGPUを用いることで理想的なスケールリングが得られることがわかった。

次にGKNETによる乱流シミュレーションにおける高速化率を、Vlasov計算パートと準中性条件を解くNEUTRAL計算パートに分けて検証した。ただし、NEUTRAL計算パートでは通信時間は外しており、MARCONI 100で最大16ノード、各ノード16コア4GPUを用いた。

その結果、表2に示すように、Vlasov計算パートでは5.5~26倍、NEUTRAL計算パートでは4.2~5.6倍に高速化された。Vlasovパートの計算時間に関しては、2次元移流シミュレーションの場合と同様に、GPU数に反比例し実行時間は減少された一方、使用ノード数、GPU数を増やし、計算時間が短縮されたことにより、通信時間がボトルネックとなることがわかった。NEUTRAL計算パートに関しては、各方向100メッシュ程度の今回の問題サイズに対してはcuFFTの実行効率が低いため、Vlasov計算パートと比較して低い高速化率になったものと考えられ、問題サイズが大きくなるにつれて改善されることが期待される。

		16CPU		16CPU + 1GPU		16CPU + 4GPU	
Vlasov	計算時間	203	196	31.3	26.4	9.52	7.47
	通信時間		7.47		4.93		2.05
NEUTRAL		236				40.8	
Vlasov	計算時間	105	98.5	19.8	15.0	8.18	4.21
	通信時間		6.6		6.6		3.98
NEUTRAL		120		28.3		21.3	

表2: Vlasov/NEUTRAL計算パートのGPU高速化の結果

[1] K. Imadera *et al.*, Proc. 25th FEC, TH/P5-8 (2014).

[2] <https://docs.nvidia.com/cuda/cuffit/>