

jh220012

ノードを跨ぐ多数 GPU 環境下でのマルチフィジックス粒子法の高速度化

浅井光輝（九州大学）

概要

SPH 法・MPS 法などの粒子法は、津波遡上現象などの複雑形状内の自由表面流れの問題が容易に解け、さらには防波堤・防潮堤の浸透崩壊や洗掘、あるいは津波荷重による高規格道路・高層建造物と崩壊予測などの固体の破壊を伴うマルチフィジックス現象までが解析できる。これまで CPU ベースのスパコンで開発してきた粒子法コードを GPU スパコンに移植し、またその並列化効率を計測することで、さらなる高速化に向けた検討を行った。具体的には、粒子法の超並列計算においては陰解法を選択させた際の線形ソルバーの高速化が必須であると判明し、マルチグリッド前処理を使った粒子法の開発を行った。また、GPU に適した高速化手法の開発と併行し、粒子法そのものの高精度化を達成することができた。

1. 共同研究に関する情報

共同利用・共同研究を実施している拠点名（該当するものを残す）

東京大学 情報基盤センター

九州大学 情報基盤研究開発センター

(1) 課題分野（該当するものを残す）

大規模計算科学課題分野

(2) 共同研究分野（HPCI 資源を利用している研究課題のみ、該当するものを残す）

超大規模数値計算系応用分野

(3) 参加研究者の役割分担

三木洋平，西浦泰介・・・研究項目 A [空間充填曲線法による粒子リナンバリングの効率化向上（単体 GPU の性能向上）]

GPU のメモリは多階層構造をしており、小容量ではあるが高速な演算が可能なキャッシュメモリのヒット率をあげる必要がある。粒子系の計算を GPU で効率化するために、各時間ステップで背面セルに登録された粒子配置に対し、Morton 曲線あ

るいは Peano-Hilbert 曲線などの空間充填曲線の技術を使って粒子番号をリナンバリングする。

市村強，藤田航平・・・研究項目 B [(半)陰解法ソルバーでの問題点抽出（マルチ GPU 性能向上）]

特に MPI 通信環境下における(半)陰解法の性能低下の計測とその要因を調査する。これは次年度以降の開発項目を正しく把握するために必要不可欠なステップであり、プロファイラを取り、ホットスポット等の改善点を把握する。

浅井光輝，森川ダニエル・・・研究項目 A, B

二人共同で上記の研究者の知見を反映させたコードを実装する。

2. 研究の目的と意義

SPH 法・MPS 法などの粒子法は、差分法や有限要素法などの格子法と比べ、対象とする物体の大変形・分裂・結合を伴う形状変化の激しい問題を効率よく計算できる。たとえば、防災・災害対策分野へ適用すれば、津波遡上現象などの複雑形状内の自由表面流れの問題が容易に解け、さらには防波堤・防潮堤の浸透崩壊や洗掘、あるいは津波荷重による高規格道路・高層建造物と崩壊予測

などの固体の破壊を伴うマルチフィジクス現象までが解析できる。ただし、都市規模の災害解析へと適用すると、対象領域が広域であるのに対して、粒子法は均等な粒子間隔で解かなければいけなく、計算モデルが必然的に大規模になり、スパコンを使った高速解法が必須となる。そこで、これまで CPU ベースのスパコンで開発してきた粒子法コードを GPU スパコンに移植し、またその並列化効率を計測すると共に、今後の課題を明確にする。

3. 当拠点の公募型研究として実施した意義

特に粒子系の多体物理問題における GPU 計算により優れた研究成果をあげている計算科学分野の三木洋平と、計算科学および地震学分野で非構造格子 FEM における陰解法の GPU 計算でゴードンベルファイナリストなども多数の成果をあげている市村強、藤田航平を共同研究者とする新たな体制を構築し、多数 GPU 環境下での世界最速の粒子法マルチフィジクスソルバーの開発を目指す。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

今回は新規の課題であったため、省略

5. 今年度の研究成果の詳細

図 1 には半陰解法による Strong スケーリング計測時のプロファイラを示す。この図からも半陰解法では連立一次方程式ソルバーの計算時間が支配的であることが一目瞭然であり、また使用する GPU の数が 4→8→16 と増加するにつれ、この計算時間が単調に減少している。しかしながら、Weak スケーリングの計測でも顕著となったように、(半)陰解法による粒子法は問題規模が大きくなるにつれて、反復ソルバーの反復回数が多くなることで計算量も増え、一見すると並列化効率が得られていない。しかし、物理的に同じ性質の問題の規模を単調に大きくした問題を解いているため、反復回数を減らす（あるいは問題規模が大きくなっても反復回数が変化しない）ような反復ソルバーの前処理技術が必要であるとの結論に至っ

た。

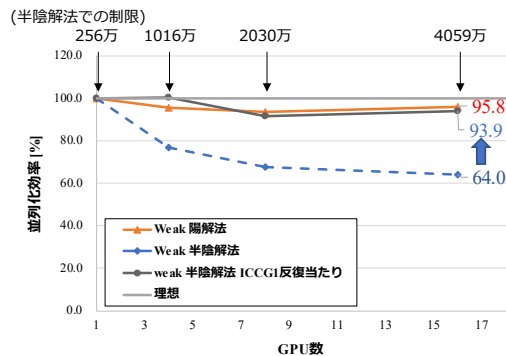


図 1. Weak スケーリング計測結果

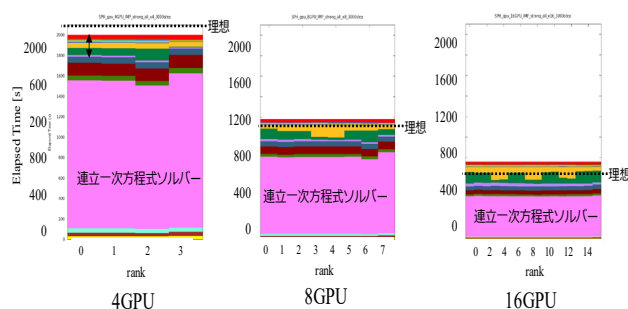


図 2. Strong スケーリング計測時 (256 万粒子) のプロファイラ

研究項目 A については、三木から空間充填曲線のアルゴリズム (Morton 曲線と Piano-Hilbert 曲線) の GPU コードを提供いただき、あとは粒子法コードへと移植する計画であったが、上記の高精度化に時間を費やし、またスケーリング計測により 2022 年度に割り当てられた資源を使い切ってしまったため、以下に示す研究項目 B のアルゴリズムの検討を重点的に実施することにした。

研究項目 B については、下に示すアルゴリズムを確定させ、現在コーディング、性能確認を実施している段階である。

Algorithm 1 Details of MGCG for PPE of ISPH. Solve $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, which is an algebraic equation of $\nabla^2 p^{n+1} = \frac{\rho_0}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}^n$. $(\cdot)_c$ indicates the calculation related to SPH cell model (FDM mesh) model, and the other is the related calculation of the SPH particle model. \mathbf{P} is a mapping matrix, from SPH cell (FDM grid) to SPH particle. On the other hand, \mathbf{P}^{-1} is a mapping matrix, from SPH particle to SPH cell (FDM grid)

```

1:  $\mathbf{b} \leftarrow \frac{\rho_0}{\Delta t} (\nabla \cdot \mathbf{v}^n)^{SPH}$ 
2:  $\mathbf{x} \leftarrow \frac{\rho_0}{\Delta t} (\nabla \cdot \mathbf{v}^n)^{SPH}$ 
3: create coefficient matrix  $\mathbf{A}$  of SPH particle model
4:  $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ 
5:  $\beta \leftarrow 0$ 
6:  $k \leftarrow 1$ 
7: (* outer loop start *)
8: while  $|\mathbf{r}| > \epsilon^{out}$  do
9:
10:  (* inner loop start *)
11:   $\mathbf{z} \leftarrow \mathbf{r}$ 
12:   $\mathbf{r}_c \leftarrow \mathbf{P}^{-1}\mathbf{r}$ 
13:   $\mathbf{z}_c \leftarrow \mathbf{P}^{-1}\mathbf{z}$ 
14:  create coefficient matrix  $\mathbf{A}_c$  of coarse SPH cell (FDM mesh) model
15:   $\mathbf{z}_c \leftarrow (\mathbf{A}_c)^{-1}\mathbf{r}_c$  (* solved by CG method with  $\epsilon^{in}$  and initial solution  $\mathbf{z}_c$  *)
16:   $\mathbf{z} \leftarrow \mathbf{P}\mathbf{z}_c$ 
17:  (* inner loop end *)
18:
19:  if  $k > 1$  then
20:     $\beta \leftarrow \frac{(\mathbf{z}, \mathbf{q})}{\rho^{old}}$ 
21:  end if
22:   $\mathbf{p} = \mathbf{z} + \beta\mathbf{p}$ 
23:   $\mathbf{q} = \mathbf{Ap}$ 
24:   $\rho \leftarrow (\mathbf{z}, \mathbf{r})$ 
25:   $\alpha = \frac{\rho}{(\mathbf{p}, \mathbf{q})}$ 
26:   $\mathbf{r} = \mathbf{r} - \alpha\mathbf{q}$ 
27:   $\mathbf{x} = \mathbf{x} + \alpha\mathbf{p}$ 
28:   $k \leftarrow k + 1$ 
29: end while
30: (* outer loop end *)
    
```

この前処理付き反復法は、粒子法の近傍検索で使用するバックグラウンドセルを疎問題として前処理として使うマルチ解像度ソルバーである。その概念図を図3に示す。

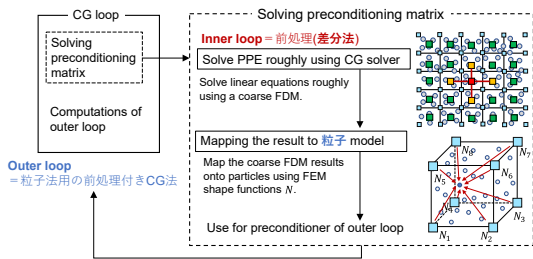


図3. バックグラウンドセル前処理付きマルチ解像度ソルバー

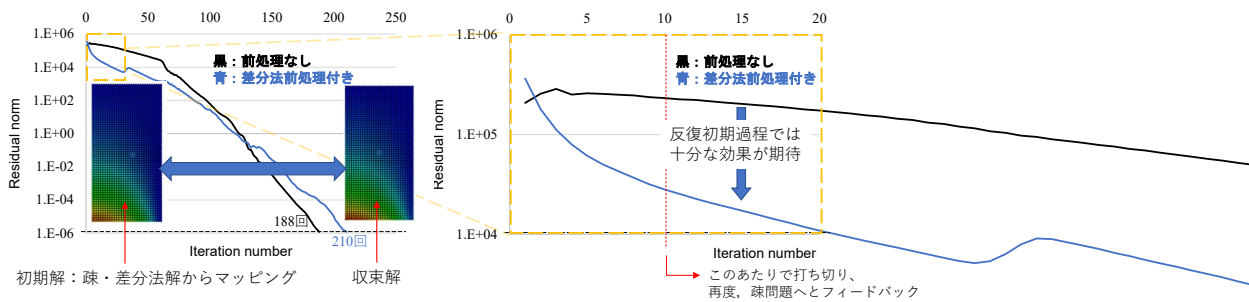


図4. 粒子法におけるバックグラウンドセル前処理によるCG法の誤差収束性改善

このマルチ解像度ソルバーの開発当初は、構造格子状の差分法を前処理として、その解から粒子初期値を推定し、良質な前処理として利用することを想定していた。ただし、このままでは図4に示すように、特に初期段階での収束性に一定の効果が得られるものの、全体としては十分な収束改善が得られなかったため、市村・藤田らの助言を得て、上記に示したマルチグリッド前処理のアルゴリズムへと行きついた。現在は、このアルゴリズムを継続課題として2023年度に実装中である。

方針転換もあり、余裕ができた時間を通して、粒子法の高精度化について成果が得られた。この内容は、国内雑誌^{[1][2]}に掲載されただけでなく、計算力学分野のトップジャーナルである *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*^[5]に投稿し、現在査読修正原稿を提出し、判定結果を待っている段階にある。この概要のみを以下に示す。

図5には、パッチテスト(微分可能な関数の数値微分を理論解と比較して収束性を検証)を行った結果を示す。2階微分項の計算誤差は、従来のSPHによる標準モデルでは1次収束どころか、粒子配置が乱れると発散傾向を示していた。これに対して、提案したSPH(2)は2次に迫る収束率で単調に収束していくことが確認でき、これを図6に示すキャビティ問題に適用し、提案手法(図7中の手法(1)を参照)は既存手法と比べてもかなり良好な収束性を示していることを確認した。

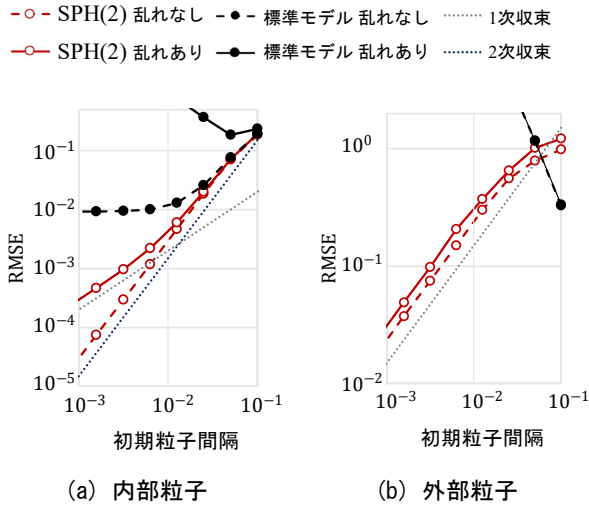


図-5 ラプラシアンのパッチテスト事例(RMSE)

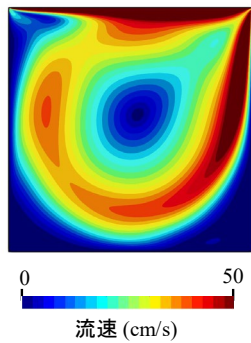


図-5 Cavity 問題の流速分布

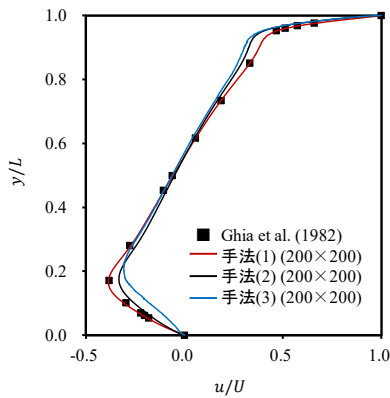


図-6 定常状態での流速値 (Re = 1,000)

別の事例として、粒子法では比較的に高精度な計算が困難とされてきたカルマン渦の問題(図-7 参照)においても、周期だけでなく図 8 に示す抗力までが実験値とほぼ同等の結果が得られており、また粒子間隔を小さくすれば一定値に収束する質の良い結果が得られていることを確認した。

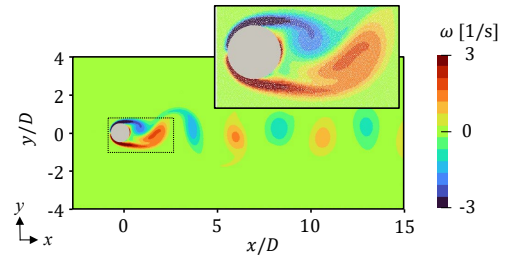


図-7 カルマン渦解析 (渦度)

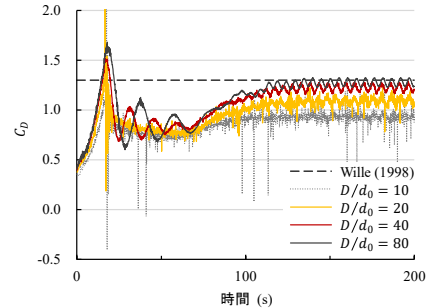


図-8 カルマン渦発生時の円柱抗力係数の評価

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

初年度の課題として、GPU で高性能に機能する粒子法コード多数計算機ノードに搭載された多数 GPU を使って実施できるように MPI 化を行い、スケーリング計測を行えただけでも十分な成果が得られたものとする。これにより、特に陰解法時の線形代数ソルバーの多数 GPU への高速化が必須であると、早い段階で判断ができた。この結果、当初重点的に実施予定であった研究項目 A よりも、研究項目 B を優先すべきと方針を転換した。以上の内容は、2022 年度の前半で決着がついた。一方で、スケーリング計測により、大半の計算機資源を使い切ってしまう、多数 GPU を使う環境が無くなってしまったことから、研究項目 B のアルゴリズムの再検討を入念に実施した。そして、開発の方向性が見つかり、2023 年度の継続課題へとつなげることができた。さらに GPU だけでなく、他の環境においても必要となる粒子法の高精度化に時間を割くことができ当初の予定外の結果が得られたことも特筆すべき成果と考える。その結果、4 編の査読付き論文が受理され、9 件の国際会議発表、9 件の国内会議発表と多数の研究成果を残すことができた。ただし、一部の分担者とは、協議のみにとどまり、共同研究の成果を論文等にまとめる

までには至らなかったため、これは JHPCN の継続課題における達成目標とする。

7. 研究業績

(1) 学術論文 (査読あり)

[1] 藤岡秀二郎, 辻勲平, 浅井光輝, 高精度 SPH 法～空間 2 次精度の勾配・ラプラシアン・混合微分～, 土木学会論文集, Vol.79, No.15, 22-15019

[2] 佐伯勇輔, 辻勲平, 浅井光輝, 負圧を含む非圧縮性流体を対象とした SPH 法の圧力勾配モデルの原点帰帰, 土木学会論文集, Vol.79, No.15, 22-15023

[3] Daniel S. Morikawa, Kumpei Tsuji, Mitsuteru Asai, Corrected ALE-SPH with novel Neumann boundary condition and density-based particle shifting technique, *Journal of Computational Physics: X*, Vol. 17, 100125, 2023.

[4] Kumpei Tsuji, Mitsuteru Asai, Kiyonobu Kasama, Seepage failure prediction of breakwater using an unresolved ISPH-DEM coupling method enriched with Terzaghi's critical hydraulic gradient, *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, Vol. 10, Article 1, 2023.

[5] Mitsuteru Asai, Shujiro Fujioka, Yusuke Saeki, Daniel S. Morikawa and Kumpei Tsuji, A class of second derivatives in the Smoothed Particle Hydrodynamics with 2nd-order accuracy and its application to incompressible flow simulations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (査読回答中)

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり) 該当なし

(3) 国際会議発表 (査読なし)

- 1) Yusuke Saeki, Shujiro Fujioka, Kumpei Tsuji, Mitsuteru Asai, A Class of Higher Order Derivative Models in the Smoothed Particle Hydrodynamics, MFEM2022, Berkeley, USA, September 2022.
- 2) Mitsuteru Asai, Shujiro Fujioka, A class of Laplacian and mixed derivative models in the SPH framework, WCCM-APCOM2022, Yokohama, Japan, August 2022, [\[Keynote lecture\]](#)
- 3) Kumpei Tsuji, Yusuke Saeki, Mitsuteru Asai, A

Hybrid seepage failure analysis between two-phase mixture flow techniques using an ISPH-DEM coupling method, WCCM-APCOM2022, Yokohama, Japan, August 2022

- 4) Haruki Osaki, Daniel Morikawa, Mitsuteru Asai, Boosting a large-scale SPH particle methods using many GPUs, including inter-node communications, ICCCI2022, Yamanashi, 2022
- 5) Yusuke Saeki, Kumpei Tsuji, Mitsuteru Asai, Modified gradient and Laplacian models in the SPH method to improve accuracy including negative pressure regions, ICCCI2022, Yamanashi, 2022
- 6) Shujiro Fujioka, Kumpei Tsuji, [Mitsuteru Asai](#) High-order SPH method with spatial second-order accuracy for derivative operator, ICCCI2022, Yamanashi, 2022
- 7) [Mitsuteru Asai](#), Kumpei Tsuji, ISPH-DEM coupling simulation for estimating internal erosion in soil, ICCCI2022, Yamanashi, 2022, [【Invited Lecture】](#)
- 8) Daniel Morikawa, [Mitsuteru Asai](#), Haruki Osaki, A phase-change approach to landslide simulations: coupling finite strain elastoplastic TLSPH with non-Newtonian IISPH, ICCCI2022, Yamanashi, 2022, [【Best presentation award】](#)
- 9) Mitsuteru Asai, Multi-scale and -physics particle simulations for natural hazard, The 41st JSST Annual International Conference on Simulation Technology, 2022, [【Invited Talk】](#)

(4) 国内会議発表 (査読なし)

- 1) 辻勲平, 浅井光輝, 地盤の内部侵食解析に向けた ISPH-DEM 解像・非解像型ハイブリッド連成手法の開発, 令和 4 年度土木学会全国大会第 77 回年次学術講演会, 2022.09.
- 2) 大崎春輝, 森川ダニエル茂夫, 浅井光輝, 複数 GPU を用いた SPH 法による大規模流体解析の高速化, 令和 4 年度土木学会全国大会第 77 回年次学術講演会, 2022.09.
- 3) 佐伯勇輔, 辻勲平, 浅井光輝, SPH 法の圧力勾配モデルの再検討 -負圧領域の取り扱いとカルマン渦の再現-, 令和 4 年度土木学会全国大会第 77 回年次学術講演会, 2022.09
- 4) 藤岡秀二郎, 辻勲平, 浅井光輝, SPH 法における高精度 2 階微分モデルの検討, 令和 4 年度土木学会全国大会第 77 回年次学術講演会, 2022.09.
- 5) 辻勲平, 浅井光輝, 地盤の内部侵食解析に向け

た SPH-DEM 解像・非解像型ハイブリッド連成
解析, 日本混相流学会混相流シンポジウム
2022, 2022.08.

- 6) Morikawa Daniel Shiguo, 浅井光輝, 大崎春輝,
一色正晴, A phase-change approach to landslide
simulations: coupling finite strain elastoplastic
TLSPH with nonNewtonian IISPH, 第 27 回計算
工学講演会, 2022.06
- 7) 辻勲平, 浅井光輝, ISPH-DEM による粒度分布
を考慮した防波堤マウンド崩壊シミュレーシ
ョン, 第 27 回計算工学講演会, 2022.06.
- 8) 藤岡秀二郎, 辻勲平, 浅井光輝, SPH の高精度
ラプラスアン・混合微分に関する考察, 第 27
回計算工学講演会, 2022.06.
- 9) 大崎春輝, 森川ダニエル茂夫, 浅井光輝, ノー
ド間通信を含む多数 GPU を用いた大規模 SPH
粒子法的高速化, 第 27 回計算工学講演会,
2022.06.

(5) 公開したライブラリなど
該当なし

(6) その他 (特許, プレスリリース, 著書等)
該当なし