

jh230021

## バックグラウンドセル前処理付きマルチ解像度粒子法ソルバーの開発

浅井光輝（九州大学）

**概要** 粒子法では、ラグランジュ記述に伴い、毎時間ステップにおいて近傍粒子を実施するなど、計算コストが膨大となる。時間積分法として陰解法を選択すると、線形方程式解法に費やす時間が支配的になることから、陽解法を選択することが多い。計算高速化のために GPU 計算機を使うと、その傾向がより顕著となる。そこで、近傍粒子探索に用いるバックグラウンドセルを有効活用し、陰解法選択時の計算時間短縮に向けた前処理技術(MGCG)を開発した。提案した MGCG 法では、A100 の GPU を使い当初の期待値以上の高速化（現時点で 4 倍程度）が達成でき、使用メモリの増加も抑えられているため、1 枚の GPU で 1000 万粒子まで扱えることを確認した。また、複雑な地形を有する津波氾濫解析においてもその有効性を実証した。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名

東京大学 情報基盤センター

#### (2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

#### (3) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

#### (4) 参加研究者の役割分担

市村強, 藤田航平・・・研究項目 A [バックグラウンドセル前処理付き粒子法用のマルチ解像度反復ソルバー]の開発補助

三木洋平, 西浦泰介・・・研究項目 B [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 (GPU 単体の性能向上)]の開発補助

浅井光輝, 森川ダニエル・・・研究項目 A, B

二人共同で、上記共同研究者の知見を反映させた粒子法コードを実装し、その性能検証を行う。

### 2. 研究の目的・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。この利点を活かし、災害時のマルチフィジックス計算による被害予測解析等が試みられている。しかし、粒子法は

計算精度の観点から均等な粒子間隔で解くことが求められるため、都市規模の広域な災害解析へと適用すると計算モデルが必然的に大規模になる。

昨今、GPU などのアクセラレータの性能向上は目まぐるしく、申請者らもこれまで CPU による高並列計算で培った技術をマルチ GPU 環境へ移行してきた。特に、連立一次方程式ソルバーを要しない陽的粒子法においては、GPU 1 枚で CPU 計算ノードの 5 ノード (10CPU) 程度以上の性能が得られることを確認した。また 2022 年度の課題を通して、粒子法の近傍粒子探索用に設定するバックグラウンドセルを基本単位としたスライスグリッドによる領域分割法を使用し、多数計算ノードに跨いだ多数 GPU でも高効率に計算できる MPI 並列版コードを実装した。陽解法の粒子法では優れた弱スケーリング性能を示すことを示したものの、連立一次方程式ソルバーを必要とする陰解法では GPU による高速化の恩恵が少なくなることを確認してきた。特に問題規模の増大に伴い、共役勾配法などの反復ソルバーの反復回数の増加が一番の原因であったため、近傍粒子探索のためのバックグラウンドセルを使ったマルチ解像度ソルバーの可能性を模索してきた。

2023 年度の申請課題では、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盤石な研究体制を継続し、バックグラウンドセルで定義する疎問題の差分法による解を前処理とする粒子法用の新たなマルチ解像度ソルバーを確立させ、多数 GPU 環境下でも高い並列計算性能を示す世界最速粒子法の実現を目指す。

### 3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

本研究課題は、近年頻発する自然災害被害を受け、広域の被害予測に求められる大規模数値解析の高速化のため、計算科学分野との共同研究をにより、早期実現を目指して実施した内容である。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

2022 年度までに、上記の GPU コードに MPI を実装することで、マルチ GPU に関する Weak および Strong スケーリングの計測を行い、それぞれ図 1 に示す結果を得た。図 1 に示す Weak スケーリング計測では、半陰解法のメモリ制約から 1GPU あたりの粒子数を 256 万粒子に固定し、16GPU では 4059 万粒子まで増加させた。陽解法では 95.8%、陰解法では 64.0%と良好なスケールを示した。また陰解法では、問題規模の増加に伴い、計算時間の大半を占める共役勾配法（以降、CG 法）による連立一次方程式ソルバーの反復回数が増加しており、演算数に関してスケールを計測すれば、64%(時間)→93.9%(演算数)と良好なスケールを示していることになる。つまり、自由度増加に対して反復回数が増加しない前処理方法の開発が避けられないとの結論に至り、主に開発項目 A を実施する計画となった。

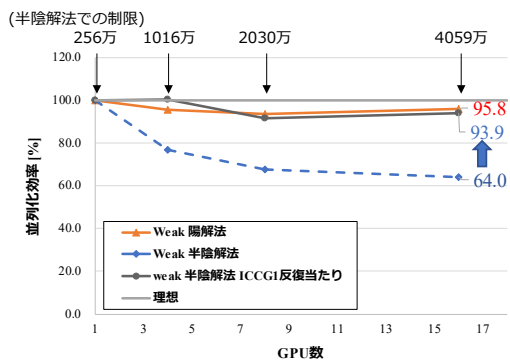


図 1 前処理付き共役勾配法

## 5. 今年度の研究成果の詳細

研究計画時の予定では、以下に示す 2 つの開発項目をあげていた。中間報告までには、特に重要度の高い研究項目 A の開発を行い、想定以上の成果が出始めたこともあり、2023 年度はこの課題に注力し、性能改善に注力した。

**研究項目 A.** バックグラウンドセル前処理付き粒子法用のマルチ解像度反復ソルバー

**研究項目 B.** 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 (GPU 単体の性能向上)

半陰的粒子法では、圧力ポアソン方程式のソルバーの計算時間の割合が高く、また問題の規模が大きくなるほど、その傾向が顕著となる。ソルバーとして、図 2 に示す前処理付き共役勾配法を使用し、図中の赤の枠線内の前処理技術として、図 3 に示す幾何マルチグリッド法（以降、MG 法と略記）を採用した。

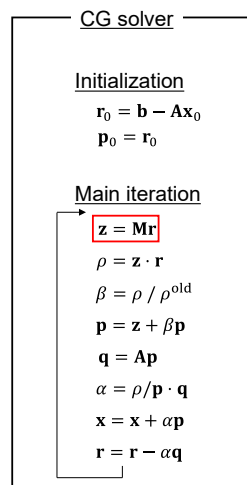


図 2 前処理付き共役勾配法

図3には、粒子法において近傍粒子探索に用いる固定のバックグラウンドセルを示す。本研究では、このセルを用いて粒子問題を段階的に疎視化し、粗く類似した問題を設定することでそれを前処理とするMG法を提案した。応用する方法をまたMG法の主な計算スキームは図4に示す。まず、細かい格子上である程度解くスムージング (Pre-smoothing) を行い、減衰できなかった残差を細かい格子へ制限する (Restriction)。それを基に粗い格子上で解を修正し (Coarse grid correction), 細かい格子へ延長し (Prolongation), 最後にまた細かい格子上でスムージングを行う (Post-smoothing)。また、各 Grid 階層で数回の反復を行う V サイクルにより計算を行い、スムーサーとしては Jacobi 法を採用した。

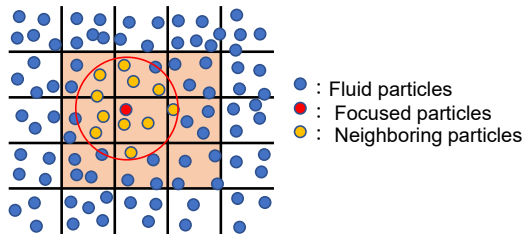


図3 バックグラウンドセルとMG法のセル

提案手法の多解像度セル前処理の効果を確認するため、ダムブレイク問題と津波遡上問題に対してMG前処理付CG法 (MGCG法) の反復回数および計算時間の比較を行った。この数値実験には NVIDIA A100 (80GB) の GPU を使用した。図5に示すダムブレイクにより、MG前処理付きCG法の効率評価した。ここでは、前処理なしCG法 (Level 0), セルを1段階のみ使った前処理 (Level 1), セルをさらに段階的に粗視化した (Level 2), (Level3)の4者を比較した。その結果を図6にまとめて示す。図6に示す結果の通り、階層を上げることで明確に収束性が向上しており (反復回数は1/8程度まで減少), これまで差分法等で実績のあるマルチグリッド前処理が非均質な配置となるラグランジュ表記の粒子法でも十分な効率が得られることを確認した。また図7にはスケーリング性能を示すため、粒子数を58621から最大で10213291まで増やした際の計算の実時間を比較した。ダムブレイクは前処理なしに比べ最大で4倍程度以上の高速化を達成できた。

Geometric multigrid preconditioning ( $M = D^{-1} + PL_1^{-1}R$ )

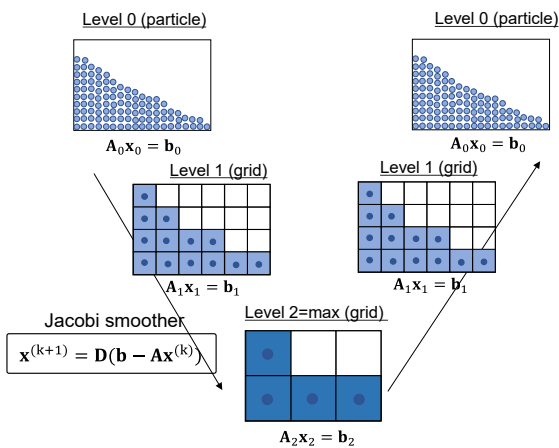


図4 幾何マルチグリッド法による前処理

なお、図4に示すLevel1のセルは、粒子法のバックグラウンドセルをそのままを使用し、Level2以降は各軸方向の2つセルを1つに縮約した補助格子を使う多段階のMG法となっている。

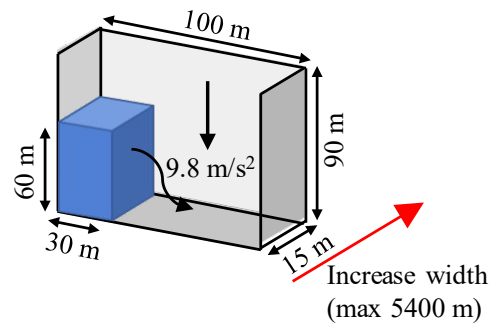


図5 MGCG法の検証例題

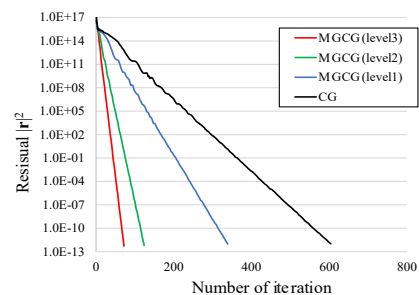


図6 MGCG法による収束性向上

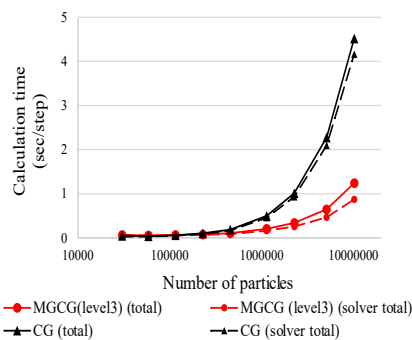


図 7 MGCG 法と前処理なし CG 法の計算時間の比較

続いて、実用的な問題を用いた検証として、福島第一原発付近の地形への津波遡上問題による検証を行った。計算条件は粒子間隔 0.5 m、流体粒子の総数は 8 151 282、実時間 30s 間の計算を総ステップ数は 30000 で実施した。図 8 に遡上の様子と流速分布を示す。以上の計算を前処理無し CG 法を用いた場合で 45.1 時間、MGCG 法を用いた場合では 23.1 時間と、約 2 倍の高速化を実現できた。

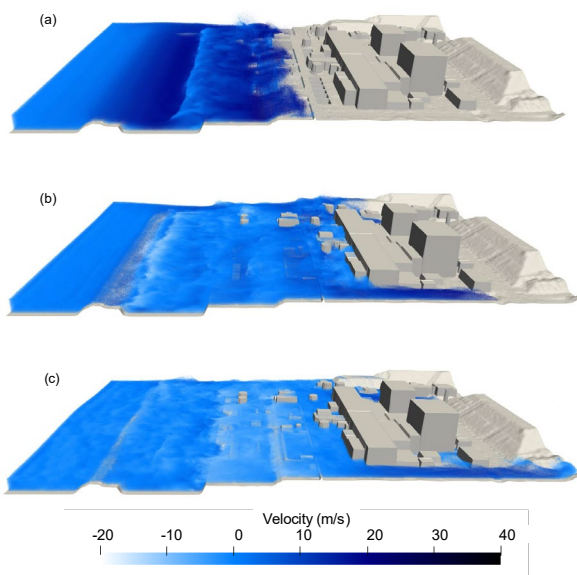


図 8 福島原発周辺の津波遡上解析への応用

## 6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

2023 年度開始時には、陰解法の計算効率が上がらず、提案した MGCG 法の効果がどの程度得られるかを懸念していたが、当初の期待値以上の高速

化（現時点で 4 倍程度）が達成できた。また使用メモリの増加を抑えているため、メモリ 80G を搭載した A100 の GPU により、1 枚で 1000 万粒子まで扱えることを確認した。また、この GPU コードを使った研究内容により、論文賞を受賞し、高精度化を実施した論文は計算力学のトップジャーナルである CMAME (TOP10%) に掲載された。また国内外で多数の研究発表を実施してきた。以上から、当初の計画以上の成果が得られたと判断する。

今後は複数 GPU を使ったコードへと反映させるため、MPI 化した前処理なしのコードと統合させることで、並列性能の優れた高速な粒子法を提案できるものと確信している。

## 7. 研究業績

### (1) 学術論文（査読あり）

1) 藤岡秀二郎, 辻勲平, 三目直登, 浅井光輝, 空間 2 次精度を有する粒子法 SPH(2)を用いた座標変換による底面境界適合型粒子法, 土木学会論文集, Vol.80, 2024.

2) 岡野翔大, 森川ダニエル, 大崎春輝, 浅井光輝,  $\mu(I)$  レオロジーを用いた流動化地盤解析の陰的 SPH 法による効率化, 土木学会論文集, Vol.80, 2024. (応用力学論文賞受賞)

3) Daniel S. Morikawa, Mitsuteru Asai, Surface tension simulation with corrected ALE-ISPH and density-based shifting technique, Journal of Computational Particle Mechanics, <https://doi.org/10.1007/s40571-023-00666-y>, 2023.

4) Mitsuteru Asai, Shujiro Fujioka, Yusuke Saeki, Daniel Morikawa Shiguo, Kumpei Tsuji, A class of second derivatives in the Smoothed Particle Hydrodynamics with 2nd-order accuracy and its application to incompressible flow simulations, Computer Method in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 415, 2023. (Top10%)

### (2) 国際会議プロシーディングス（査読あり）

1) Daniel Morikawa, Mitsuteru Asai, Finite strain elastoplastic and solid-solid contact problems with the

Smoothed Particle Hydrodynamics, PARTICLES 2023, Milan, Italy, October 2023.

2) Kumpei Tsuji, Mitsuteru Asai, Kiyonobu Kasama, Particle-based Semi-resolved Coupling Model for the Simulation of Internal Erosion in soil structures, PARTICLES 2023, Milan, Italy, October 2023

3) Shujiro Fujioka, Kumpei Tsuji, Naoto Mitsume, Mitsuteru Asai, Bottom Boundary-Fitted Free Surface Flow Simulation with Coordinate Transformation Using SPH(2), PARTICLES 2023, Milan, Italy, October 2023.

4) Yangfan Ma, Mitsuteru Asai, Zheng Han, Guangqi Chen, Physical Process-Based Entrainment Behaviour Modelling of Diluted Debris Flow Using SPH Incorporated with HBP-DP Approach, PARTICLES 2023, Milan, Italy, October 2023.

5) Haruki Osaki, Daniel Morikawa, Mitsuteru Asai, ISPH with a Geometric Multigrid Preconditioning Solver using Background Cells in GPU environment, PARTICLES 2023, Milan, Italy, October 2023.

### (3) 国際会議発表（査読なし）

該当なし

### (4) 国内会議発表（査読なし）

1) 藤岡秀二郎, 辻勲平, 三目直登, 浅井光輝 SPH(2)による境界適合型粒子法の高精度化, 令和 5 年度全国大会第 78 回年次学術講演会, 2023.09. (優秀講演者賞)

2) 大崎春輝, 森川ダニエル, 浅井光輝, GPU を用いたマルチグリッド前処理を導入した ISPH 法の高速度化, 令和 5 年度全国大会第 78 回年次学術講演会, 2023.09. (優秀講演者賞)

3) 佐伯勇輔, 辻勲平, 浅井光輝, 粒子法に基づく流体-地盤-構造連成解析の浸食対策工への適用, 令和 5 年度全国大会第 78 回年次学術講演会, 2023.09.

4) 白神嘉也, 藤岡秀二郎, 浅井光輝, 空間 2 次精度を有する I-SPH(2)による孤立波解析, 令和 5 年度全国大会第 78 回年次学術講演会, 2023.09.

5) Daniel Morikawa, Kumpei Tsuji, Mitsuteru Asai, Corrected ALE-ISPH with novel Neumann boundary condition and density-based particle shifting technique, 第 28 回計算工学講演会, 2023.06.

6) 藤岡秀二郎, 佐伯勇輔, 森川ダニエル, 辻勲平, 浅井光輝, 空間 2 次精度を有する SPH の開発と流体解析への適用 ～定式化と V&V～, 第 28 回計算工学講演会, 2023.06.

7) 白神嘉也, 藤岡秀二郎, 浅井光輝, 空間 2 次精

度を有する SPH の開発と流体解析への適用 ～自由表面流れ解析への適用～, 第 28 回計算工学講演会, 2023.06.

8) 岡野翔大, 森川ダニエル, 大崎春輝, 浅井光輝,  $\mu(I)$ レオロジーモデルを用いた粒状流の完全陰解法型 SPH 解析, 第 28 回計算工学講演会, 2023.05.

9) 藤岡秀二郎, 辻勲平, 三目直登, 浅井光輝, 座標変換を有する底面境界適合型粒子法の SPH(2)による高精度化, 第 26 回応用力学シンポジウム, 2023.05.

10) 岡野翔大, 森川ダニエル, 大崎春輝, 浅井光輝 斜面崩壊被害の数値予測に向けた陰的 SPH による非ニュートン流体解析の効率化, 第 26 回応用力学シンポジウム, 2023.05.

### (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