

2022年7月
2022年度新規採択課題 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

九州大学大学院

東京大学 情報基盤センター

海洋研究開発機構

東京大学 地震研究所

東京大学 地震研究所

海洋研究開発機構

浅井光輝

三木洋平

西浦泰介

市村強

藤田航平

森川ダニエル



九州大学
KYUSHU UNIVERSITY

研究目的

これまで

Morikawa et al. (2020)

大変形問題やマルチフィジクスの解析に適した
SPH法 (Smoothed Particle Hydrodynamics)



高並列計算により高速演算を可能とする
GPU (Graphic Processing Unit)

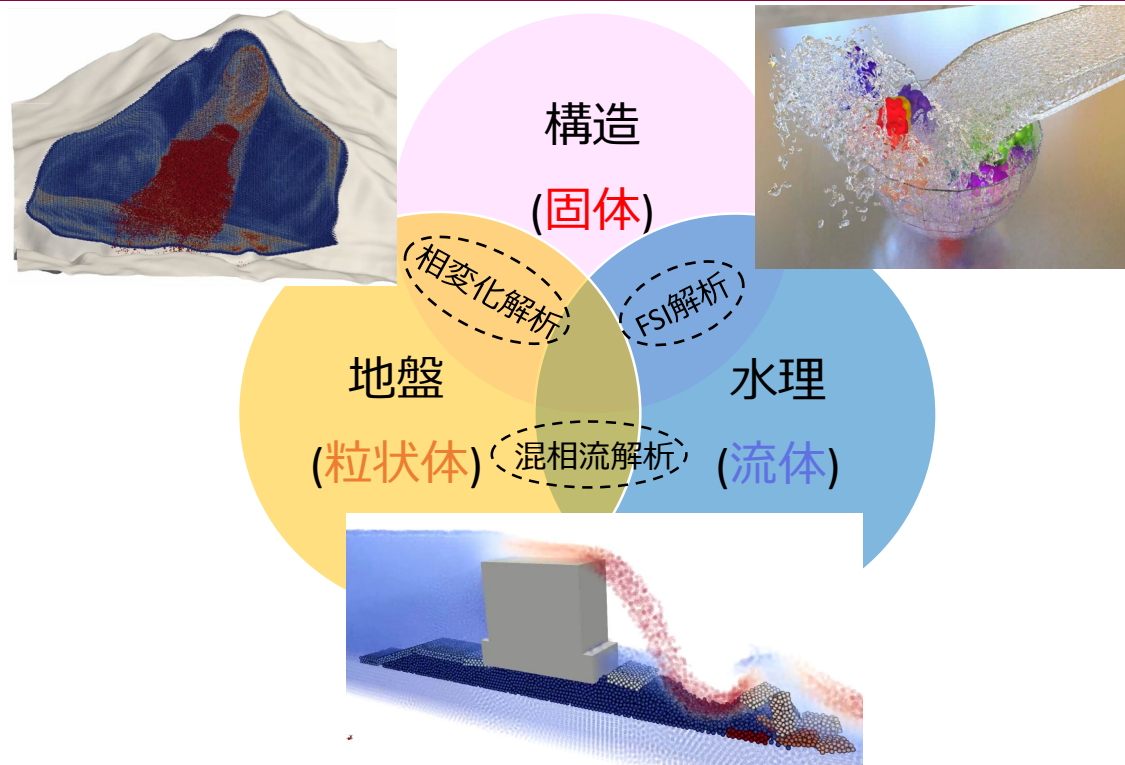
➡ GPUはメモリがCPUと比較して小さい

本研究

MPI (Message Passing Interface)

➡ 複数のコンピュータを通信
→ **大規模**な計算が可能

➡ **多数のGPU**により大規模な問題を高速に解くことが可能なSPHの開発。



ISPH法 (Incompressible SPH)

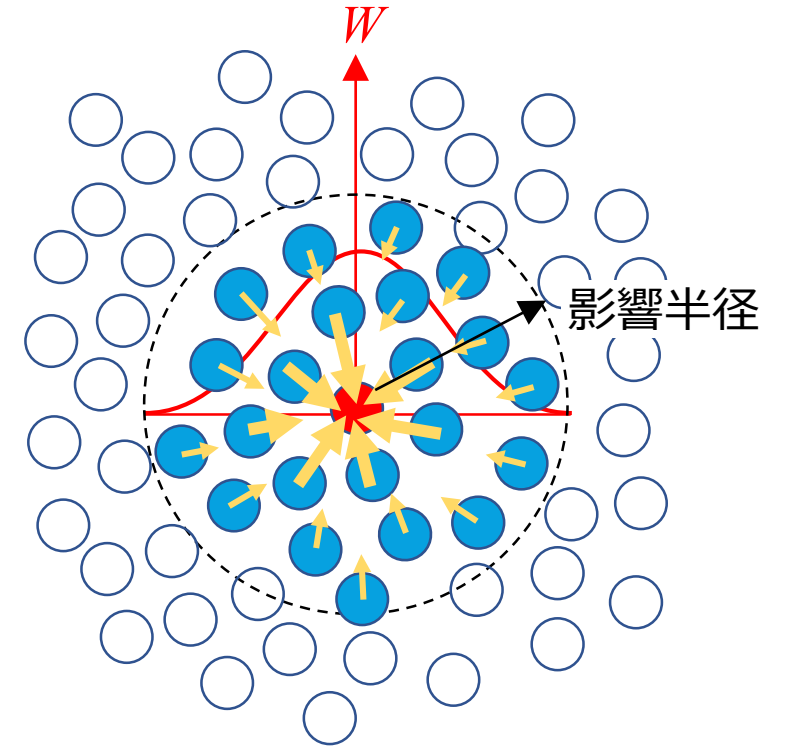
- 非圧縮性流体向けのSPH法
- 空間を有限個の粒子に離散化
- 近傍粒子の物理量を重み付けした平均として対象粒子の物理量を算出
- 速度と圧力を分離して解く射影法を採用

関数 $\langle f \rangle_i \cong \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} f_j W(\mathbf{r}_{ij})$

1 階微分 $\langle \nabla f \rangle_i \cong \frac{1}{\rho_i} \sum_j m_j (f_j - f_i) \nabla W(\mathbf{r}_{ij})$

$$\langle \nabla f \rangle_i \cong \rho_i \sum_j m_j \left(\frac{f_i}{\rho_i^2} + \frac{f_j}{\rho_j^2} \right) \nabla W(\mathbf{r}_{ij})$$

ラプラシアン $\langle \nabla^2 f \rangle_i \cong \frac{2}{\rho_i} \sum_j m_j \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot \nabla W(\mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} (f_i - f_j)$



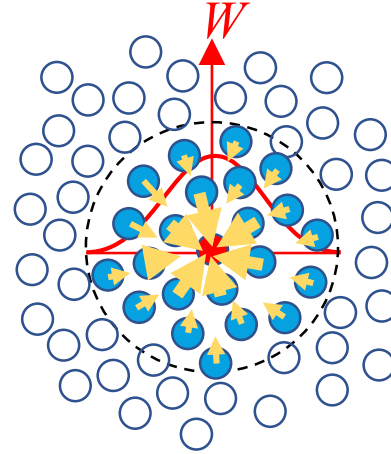
- 対象粒子*i* ● 近傍粒子*j*
- ↗ *j*が*i*に及ぼす影響の大きさ
: 矢印の大きさ

解析手法 - 陽的・半陰的・陰的ISPH法 -

ISPH法 (Incompressible SPH)

支配方程式：非圧縮性 Navier - Stokes 方程式

$$\frac{D\vec{v}}{Dt} = \vec{g} + \nu \nabla^2 \vec{v} - \frac{\nabla p}{\rho}, \quad \nabla \cdot \vec{v} = 0$$



・ 予測ステップ

$$\vec{v}^* = \vec{v}^n + \Delta t (\vec{g} + \nu \nabla^2 \vec{v}^n)$$

(仮)速度 \vec{v}^*

・ 圧力ポアソン方程式 (PPE)

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{\rho_0}{\Delta t} \nabla \cdot \vec{v}^* + \alpha \frac{\rho_0 - \langle \rho \rangle^n}{\Delta t^2}$$

圧力 p

・ 修正ステップ

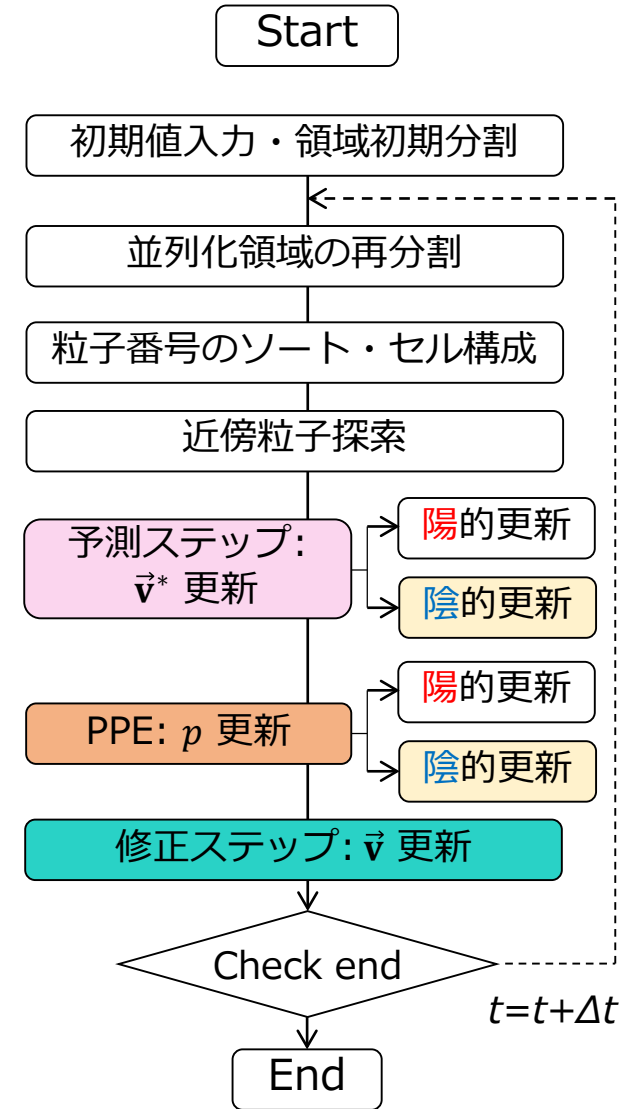
$$\vec{v}^{n+1} = \vec{v}^* - \Delta t \left(\frac{1}{\rho} \nabla p^{n+1} \right)$$

陽解法 (Explicit ISPH) 半陰解法 (ISPH) 陰解法 (Implicit ISPH)

(仮) 速度 \vec{v}^*	陽的	陽的	陰的
圧力 p	陽的	陰的	陰的

粒子数	○	△	×
計算時間	○	△	※
計算精度	△	○	◎

※高粘性流体に対しては○



解析手法 - 圧力の陽的 / 陰的評価 -

ISPH法 (Incompressible SPH)

・ 圧力ポアソン方程式 (PPE)

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{\rho_0}{\Delta t} \nabla \cdot \vec{v}^* + \alpha \frac{\rho_0 - \langle \rho \rangle^n}{\Delta t^2}$$

➡ ISPHにより離散化

$$\sum_j \underbrace{\frac{2}{\rho_0} m_j \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot \nabla W_{ij}}{r_{ij}^2}}_{A_{ij}} (p_i^{n+1} - p_j^{n+1}) = \underbrace{\frac{\rho_0}{\Delta t} \nabla \cdot \vec{v}^* + \alpha \frac{\rho_0 - \langle \rho \rangle^n}{\Delta t^2}}_{b_i}$$

線形方程式ソルバーにより陰的に求解.

$p_j^{n+1} \approx p_j^n$ と近似して陽的に更新.

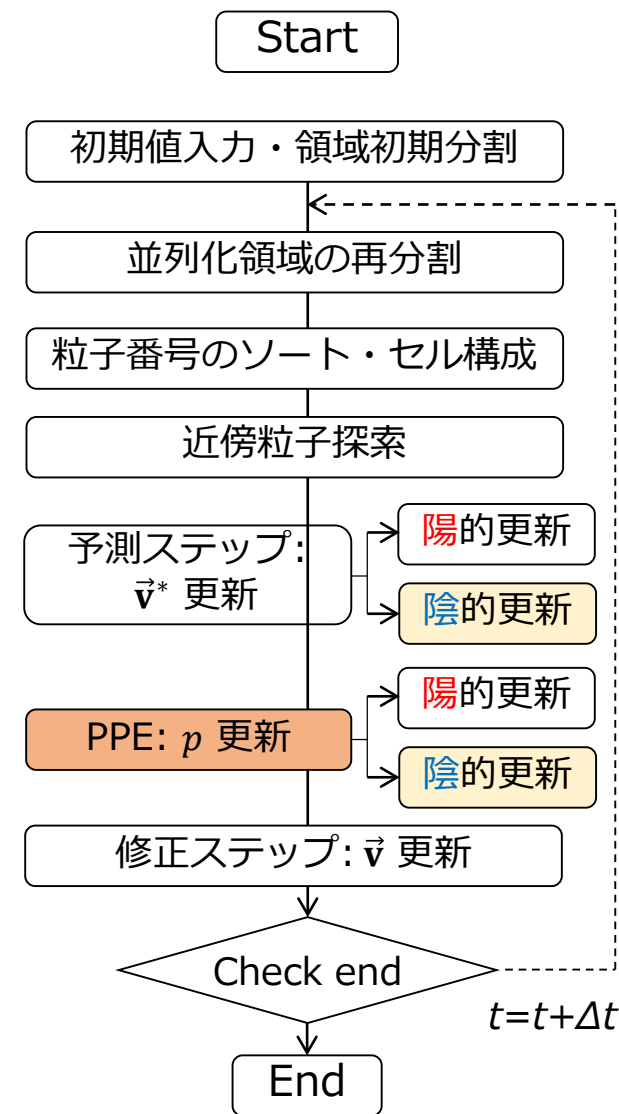
半陰解法 (ISPH)

$$\left(\sum_j A_{ij} \right) p_i^{n+1} - \sum_j A_{ij} p_j^{n+1} = b_i$$

陽解法 (EISPH)

$$p_i^{n+1} = \frac{b_i + \sum_j A_{ij} p_j^n}{\sum_j A_{ij}}$$

粒子数	△	○
計算時間	△	○
計算精度	○	△



陰的 ISPH法 (Implicit ISPH)

$$\frac{D\vec{v}}{Dt} = \vec{g} + \nu \nabla^2 \vec{v} - \frac{\nabla p}{\rho}$$

予測ステップ ↓

$$\vec{v}^* = \vec{v}^n + \Delta t(\vec{g} + \nu \nabla^2 \vec{v}^n) \quad \longrightarrow \quad \vec{v}^* = \vec{v}^n + \Delta t(\vec{g} + \nu \nabla^2 \vec{v}^*)$$

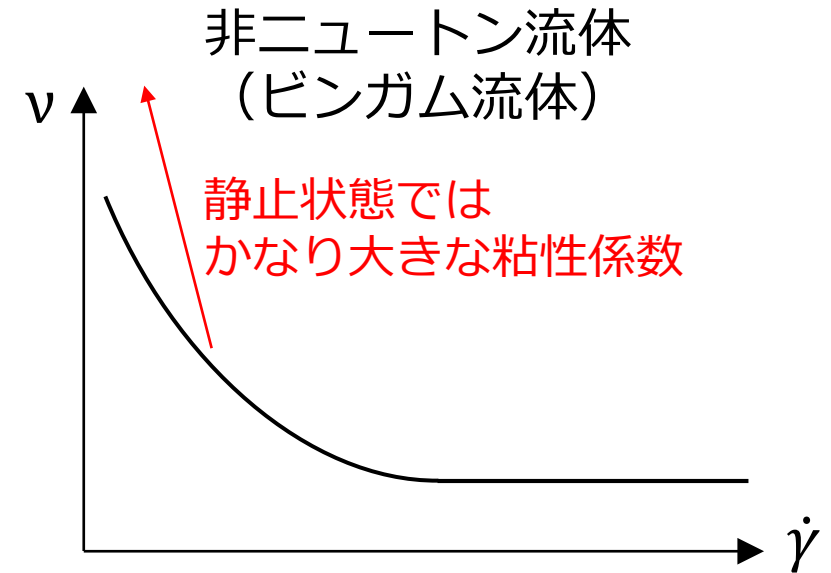
(ISPH) (陰的ISPH)

$$\Delta t < 0.1 \frac{d}{8\nu} \quad \longrightarrow \quad \text{高粘性流体では } \Delta t \text{ に厳しい制約.}$$

→ \vec{v}^* を陰的に評価.

→ 高粘性流体の解析に対しても適用可能な
陰的ISPH法 (Implicit ISPH) へと拡張*.

* Morikawa et al. (2019)



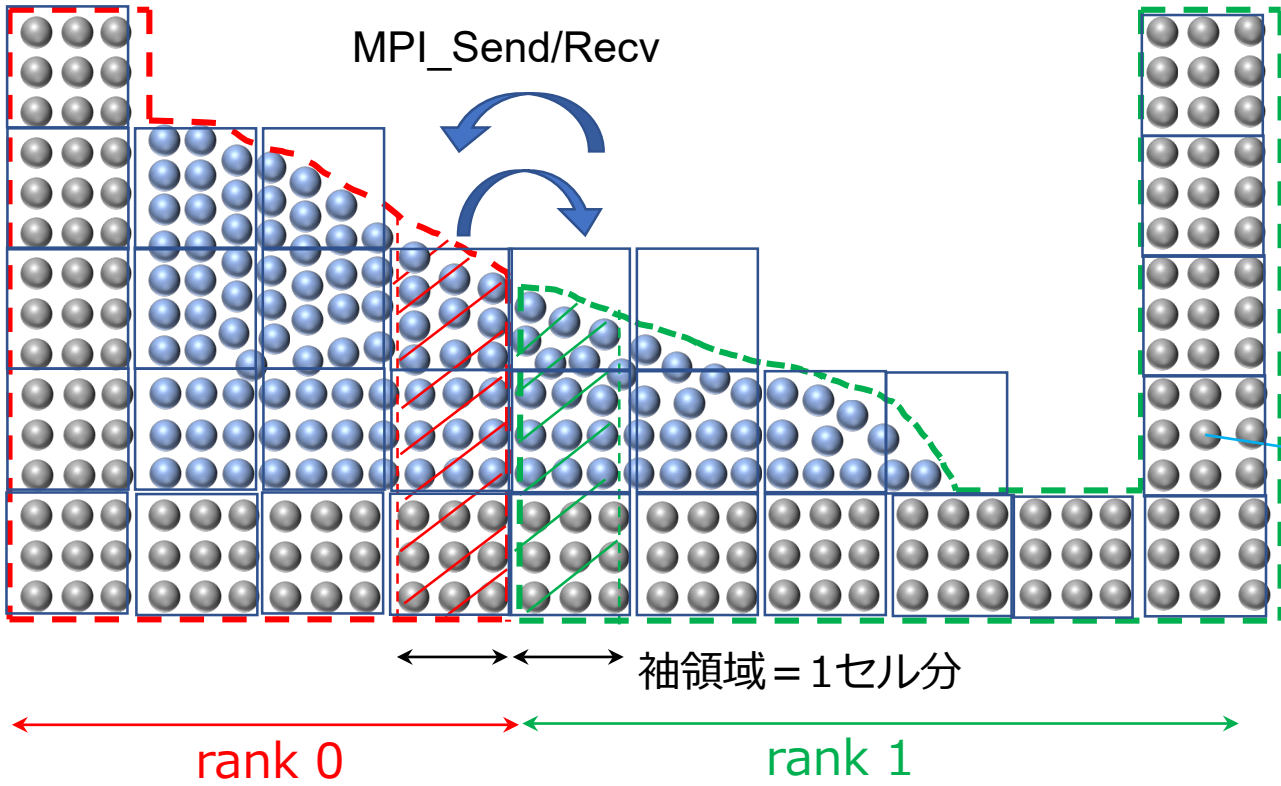
$$\nu = \begin{cases} \nu_{\max} & (\text{if } \nu > \nu_{\max}) \\ \nu_0 + \frac{\tau_y}{\rho_0 \dot{\gamma}} & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

MPIを用いた多数GPUによる並列計算

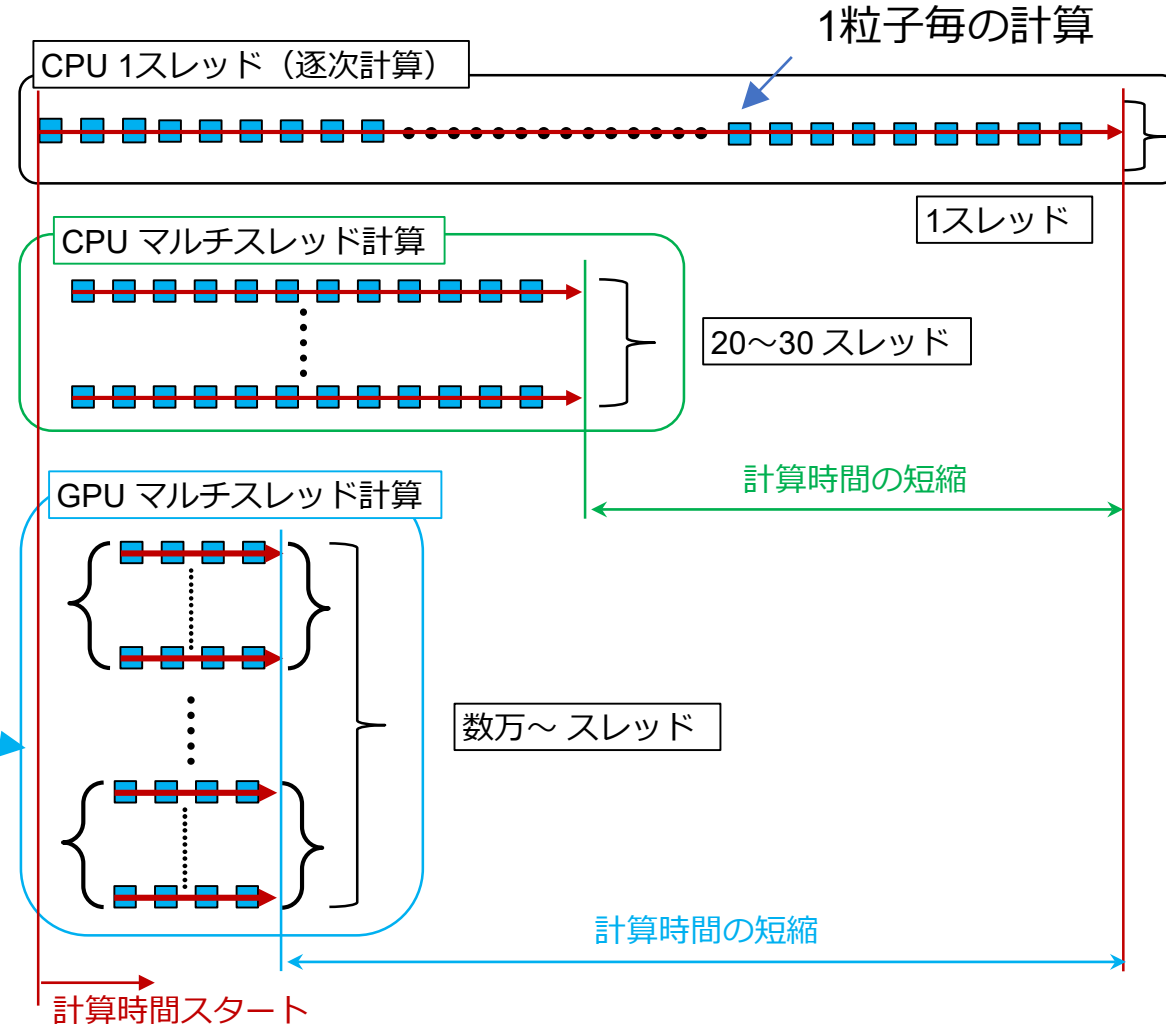
MPIによる隣接領域との通信 (2GPUの例)

- ・ 隣接プロセス間の袖領域通信
- ・ 粒子移動に伴うデータ交換
- ・ 動的負荷分散による領域再分割

- Fluid particle
- Wall particle



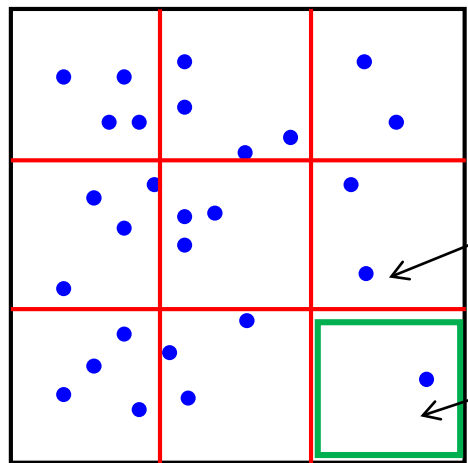
GPU (CUDA) によるスレッド並列計算



2D-Slice gridによる動的負荷分散

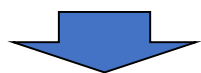
直交分割 (9GPUでの例)

粒子数に粗密ができやすく、
計算負荷が均等になりにくい

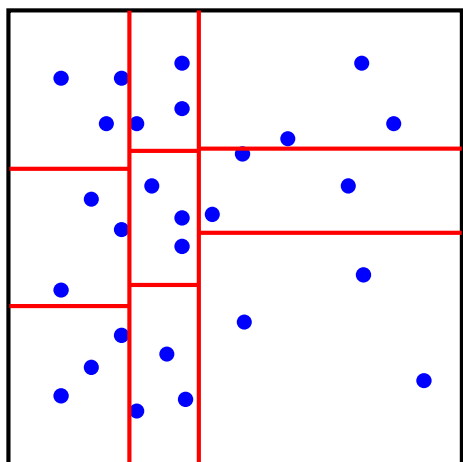


水粒子

各プロセス
(各GPU)



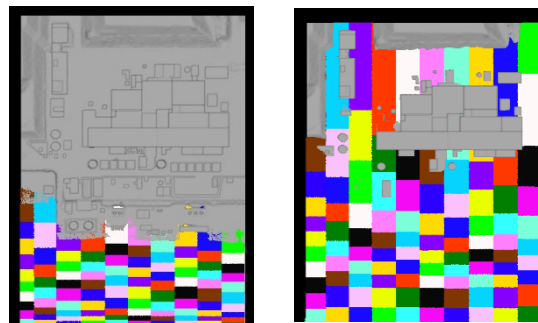
2次元スライスグリッドによる分割



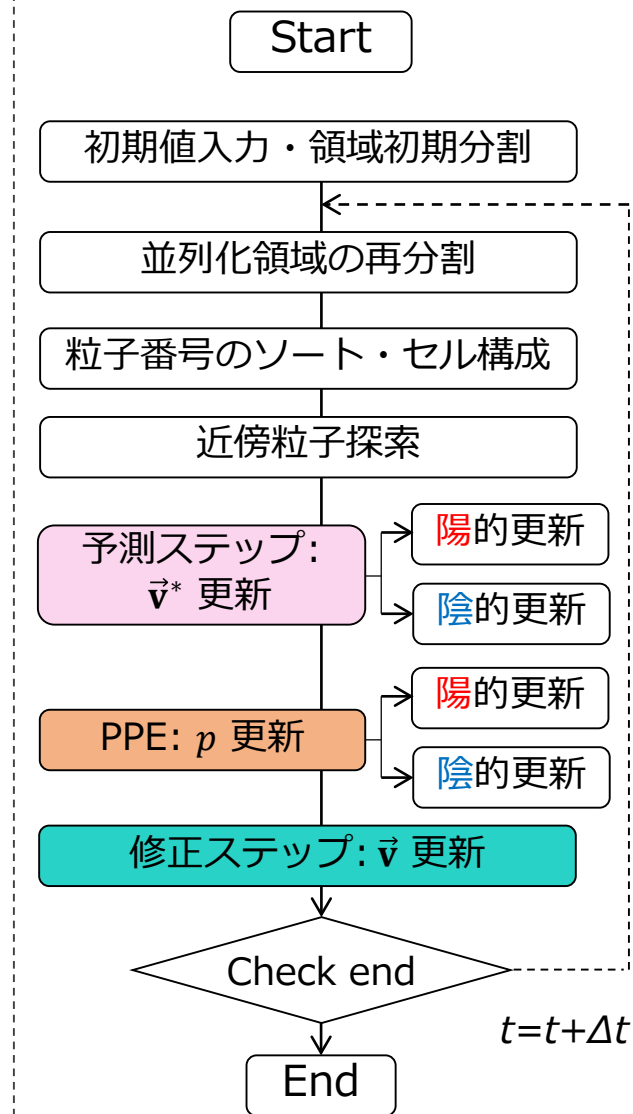
動的負荷分散

各時間ステップにおいて、
現ステップの各GPUの負荷を参考に
次ステップの各GPUの負荷を均等化

負荷 : 計算時間+通信時間



動的負荷分散による計算領域分割例

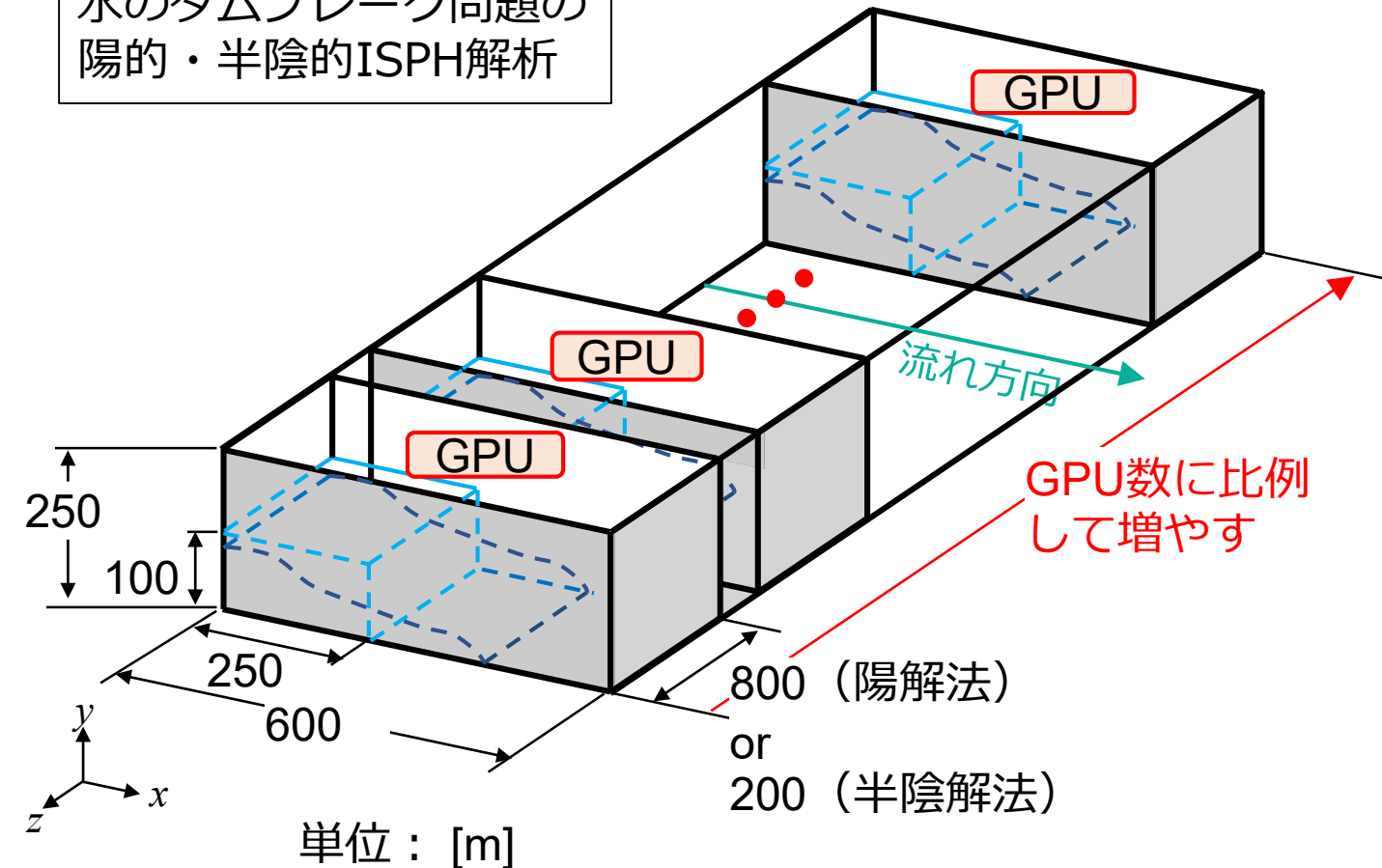


Weak Scaling モデル (陽的・半陰的ISPH)

Weak Scaling : 1GPU当たりの粒子数を固定して1GPU~64GPUまで増やし、
計算時間が一定になるかどうか計測.

モデル形状

津波遡上解析へ向けた
水のダムブレイク問題の
陽的・半陰的ISPH解析



計算条件

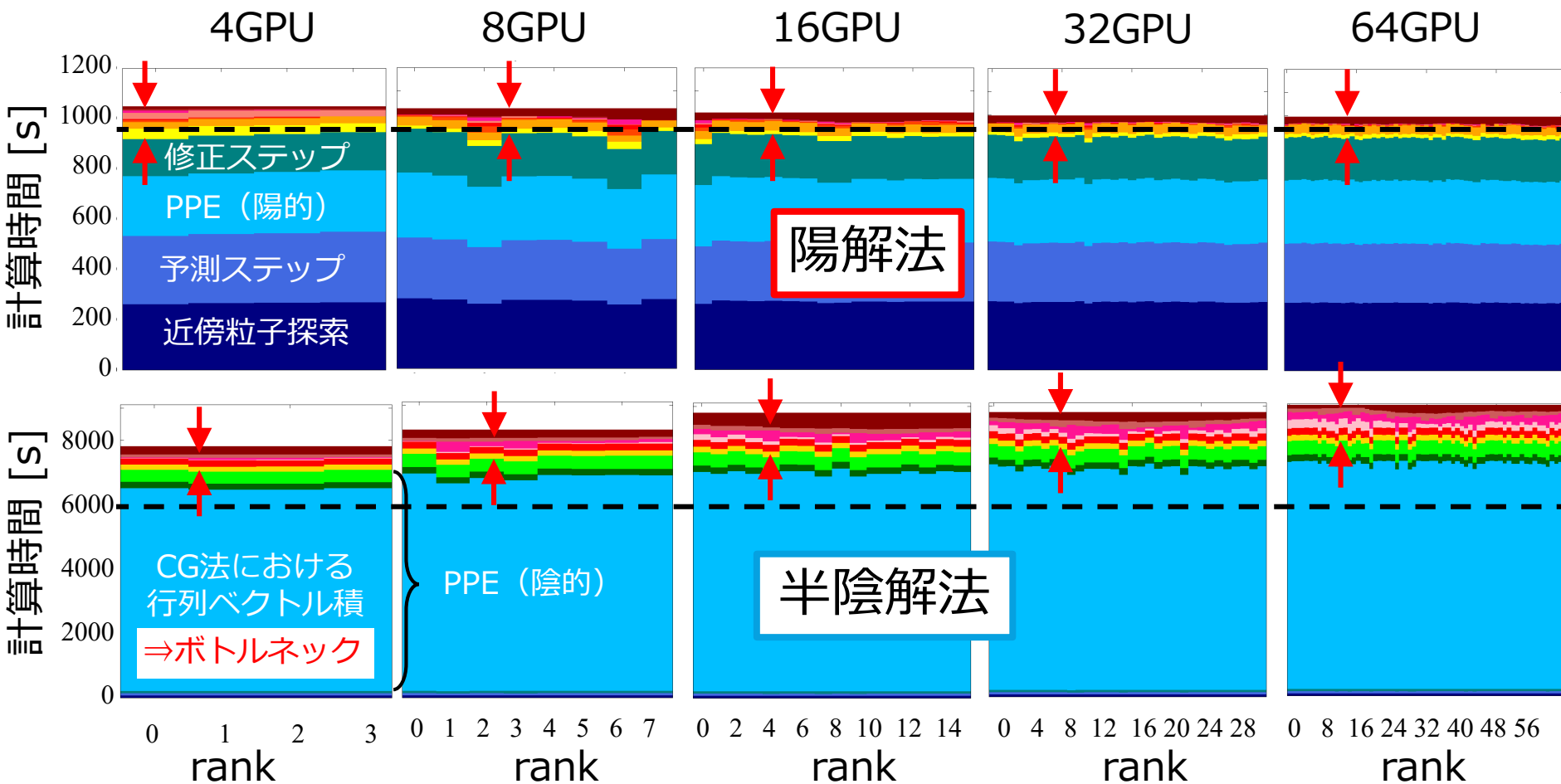
1GPU当たりの水粒子数	陽解法 : 約2000万	半陰解法 : 約500万
64GPUでの水粒子数	約 12.8億	約 3200万
粒子径 d	0.10 [m]	
時間増分 Δt	1.0×10^{-3} [s]	
総ステップ数	3,000 [step] → 実時間 3.0 [s] (対岸に着く程の時間)	

計算機諸元

(東京大学スパコンWisteria-A)

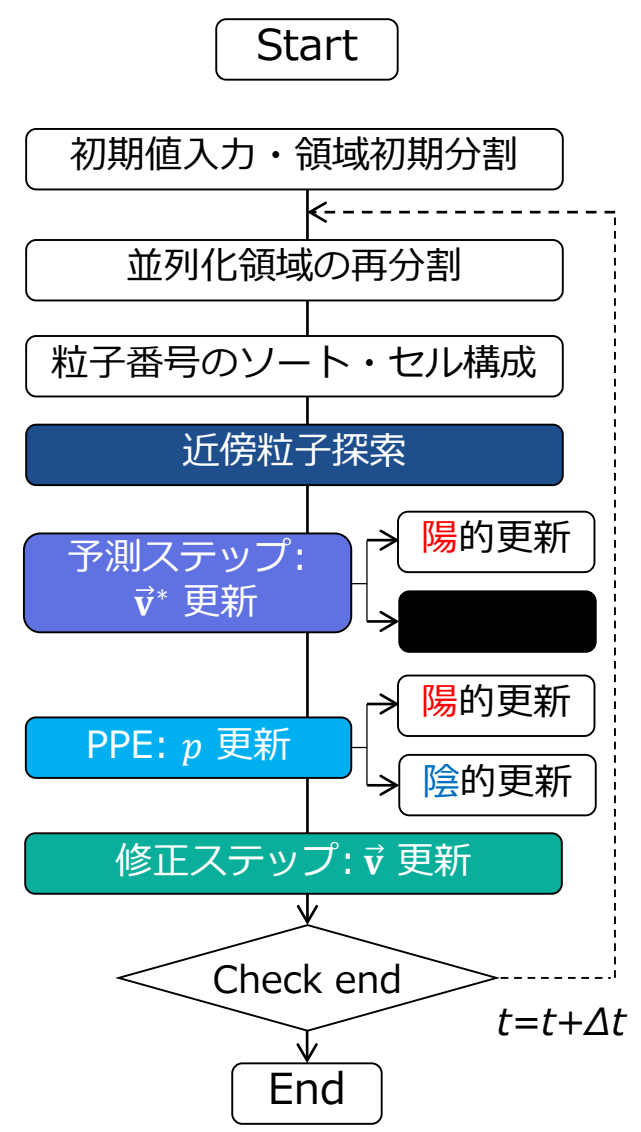
CPU	Intel Xeon Platinum 8360Y
GPU	NVIDIA Tesla A100
GPU数	8GPU/node × 8 node =最大64GPU

計測結果 - 計算時間内訳 (陽的・半陰的ISPH) -



--- 理想 \updownarrow 通信時間 横軸：各GPU, 縦軸：サブルーチン毎の計算時間 を表示.
 青系統色：演算時間, 赤系統色：MPIによるGPU間の通信時間 を表示.

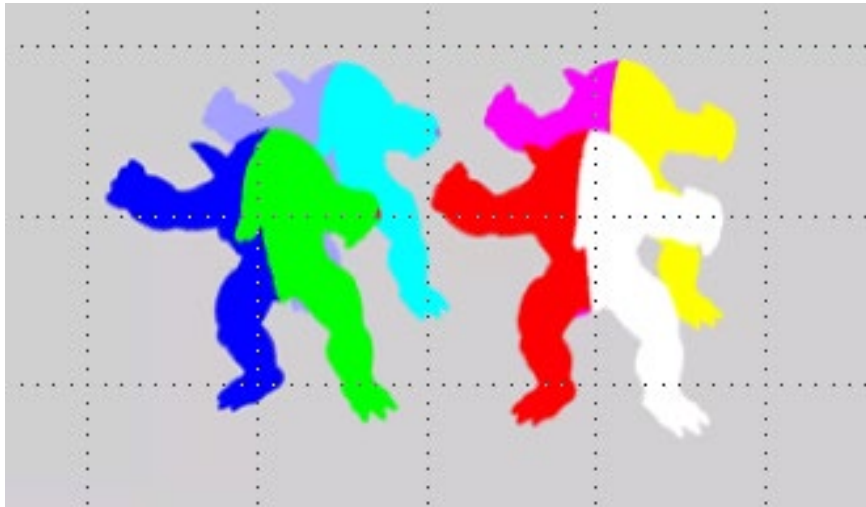
動的負荷分散により各rankにおける**計算時間**が**ほぼ均等**に。



Weak Scaling モデル (陰的ISPH)

モデル形状

2GPUで1体の計算を担当し, 8GPU 4体まで増やして計算.



各GPUの計算領域毎に色別で表示

物性値

密度	ρ [kg/m ³]	1.0×10^3
最小動粘性係数	ν_0 [m ² /s]	1.0×10^{-1}
最大動粘性係数	ν_{\max} [m ² /s]	1.0×10^2
降伏応力	τ_y [Pa]	1.0×10^3

半陰的ISPHでは...

$$\Delta t < 0.1 \frac{d}{8\nu} \\ = 6.25 \times 10^{-7} \text{ [s]}$$

計算条件

1GPU当たりの流体粒子数	約190万
8GPUでの水粒子数	約760万
粒子径 d	0.005 [m]
時間増分 Δt	1.0×10^{-4} [s]
総ステップ数	10,000 [step] → 実時間 1.0 [s]

計算機諸元

(地球シミュレータes4)

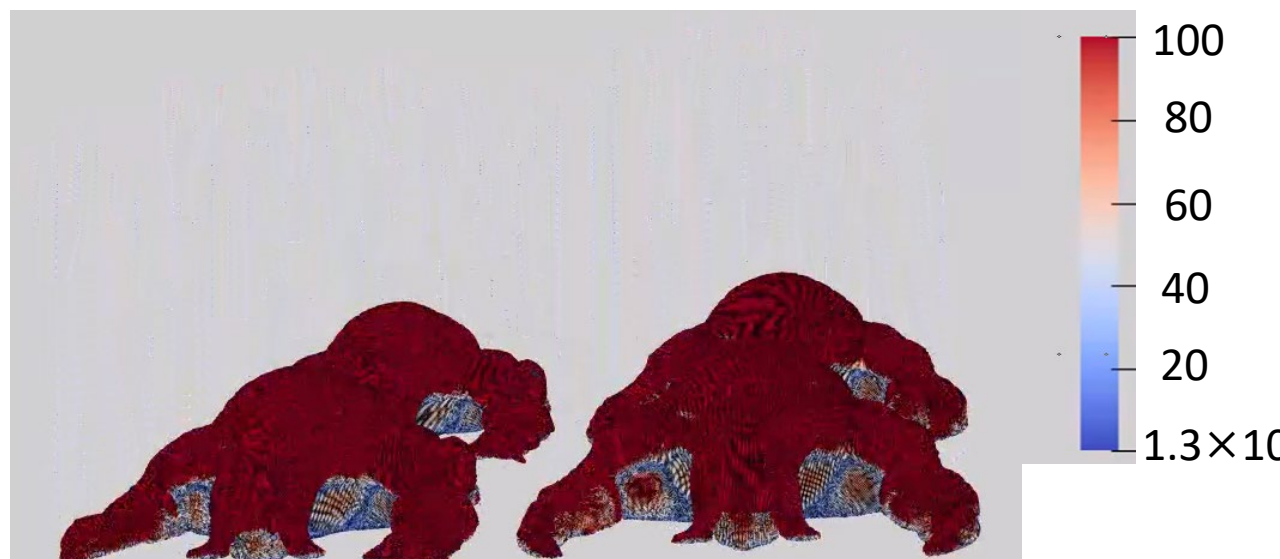
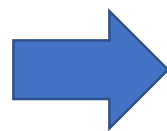
CPU	Intel Xeon Platinum 8360Y
GPU	NVIDIA Tesla A100
GPU数	8GPU/node

陰的ISPH 解析結果

2GPUで1体の計算を担当し, 8GPU 4体まで増やして計算.



各GPUの計算領域毎に色別で表示



動粘性係数 ν [m^2/s]

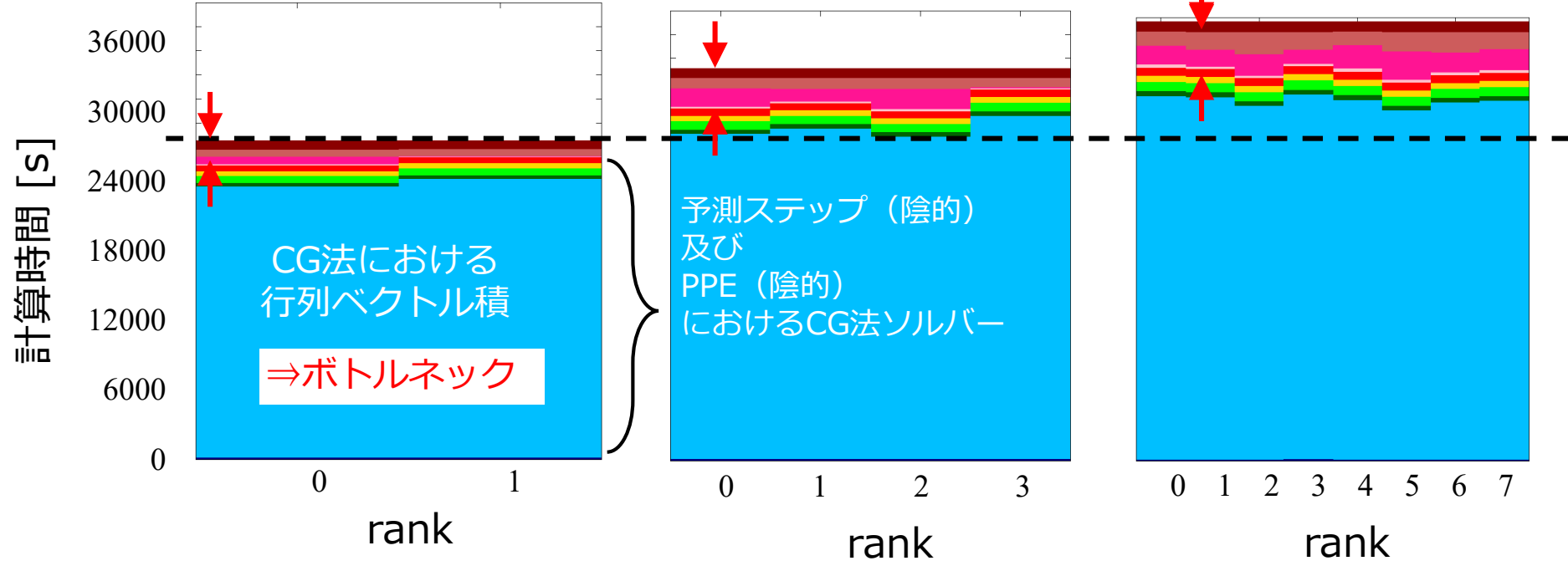
計測結果 - 計算時間内訳 (陰的ISPH) -

陰解法

2GPU(アルマジロ1体)

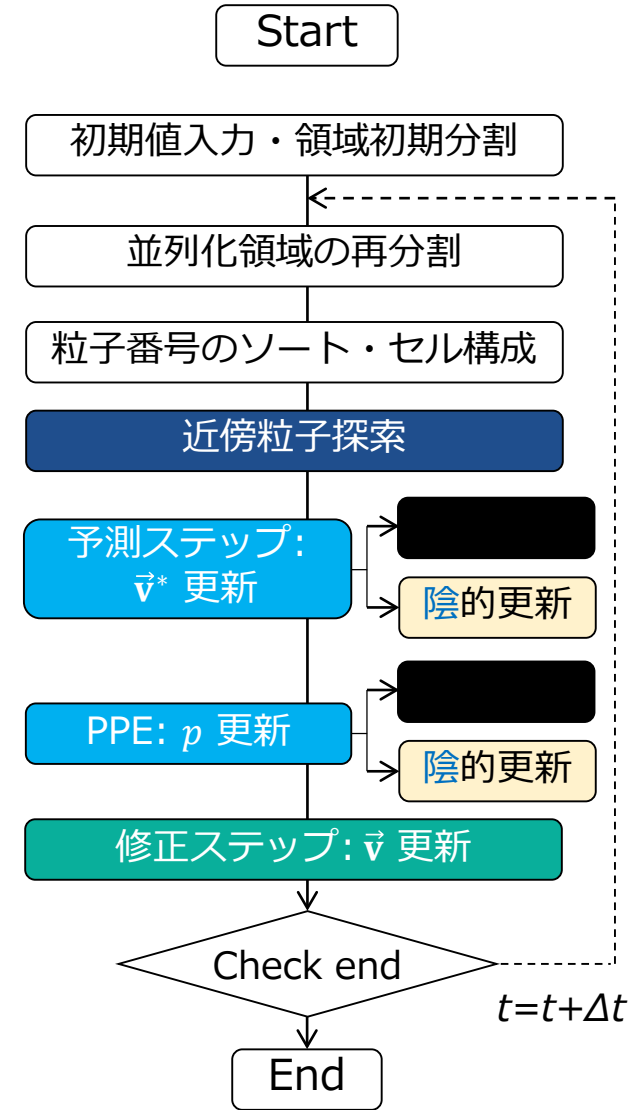
4GPU(アルマジロ2体)

8GPU(アルマジロ4体)



--- 理想 ⇕ 通信時間

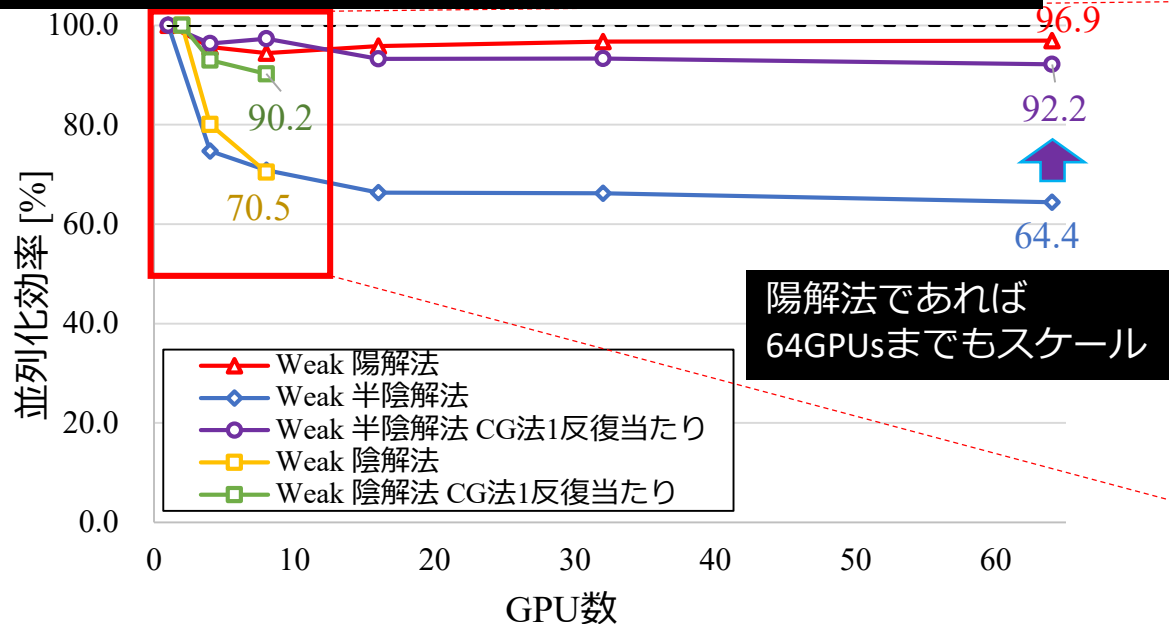
➔ 半陰解法と同様に陰解法においてもCG法の行列ベクトル積が計算時間の大半を占める。



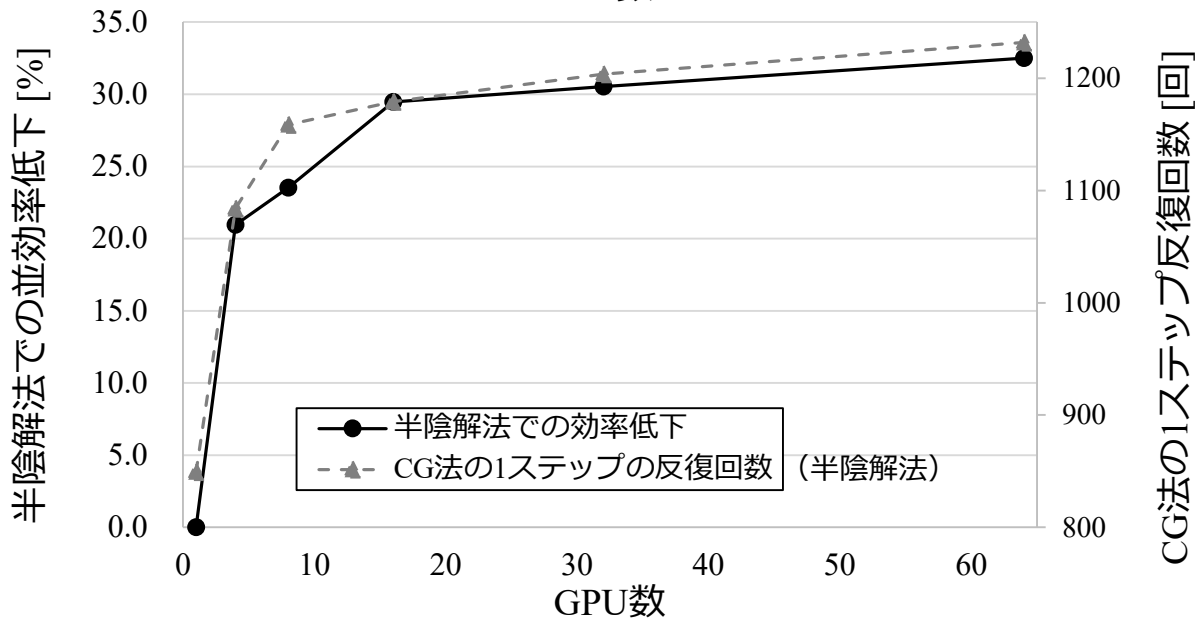
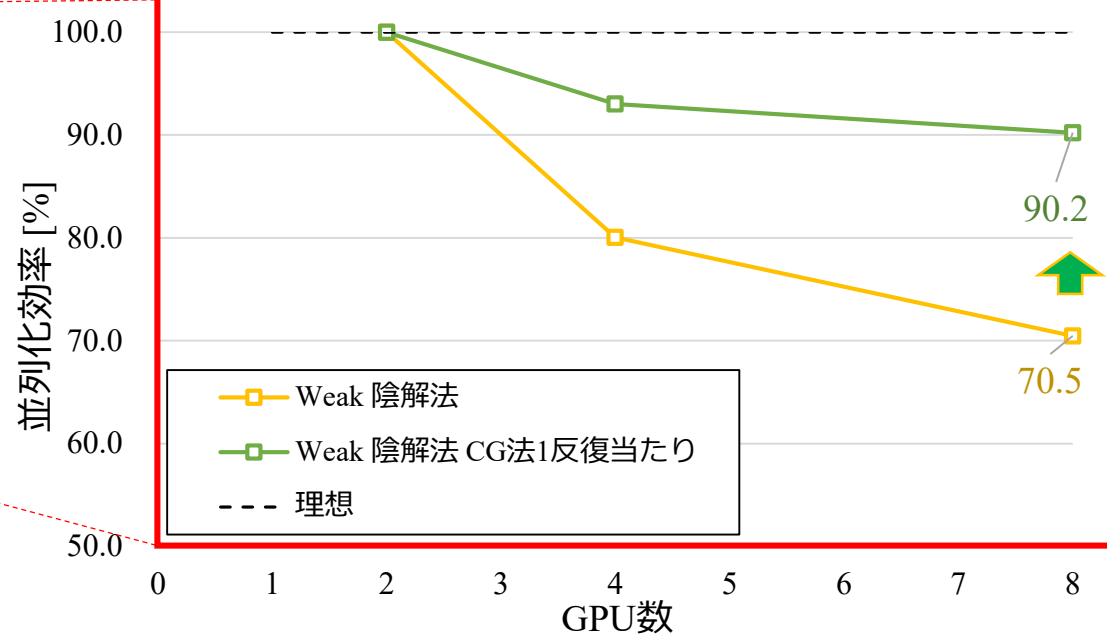
Weak Scaling 計測結果

陽的ISPH・半陰的ISPH(ダムブレイク), 陰的ISPH法 (アルマジロ)

陰的ISPH法(アルマジロのみ)



陽解法であれば
64GPUsまでもスケール

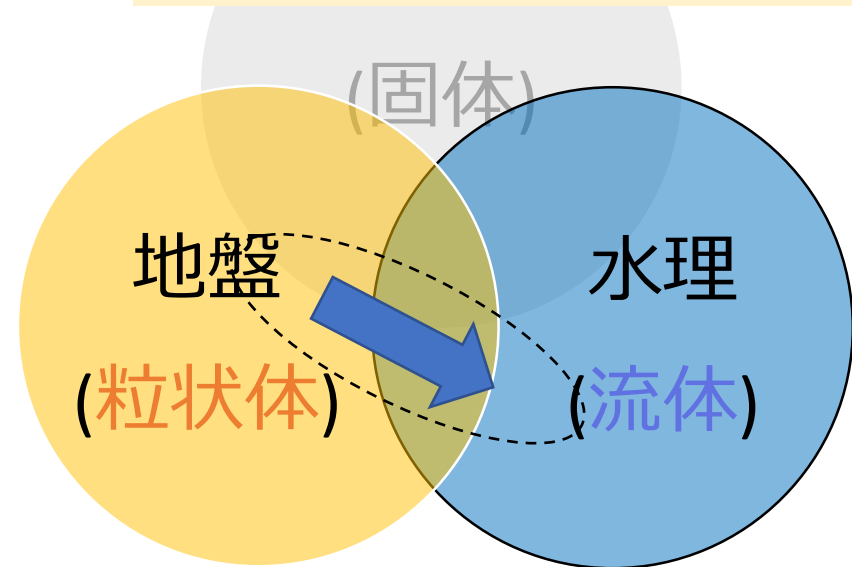


➡ ソルバーの演算1回当たりの計算時間に対する効率
⇒陰解法, 半陰解法においても**ほぼ理想通り**.

➡ 残る改良余地は,
全体の問題規模が増加しても
連立1次方程式のソルバーの**反復回数が**
増加しないような前処理の導入.

自然災害におけるマルチフィジックス現象

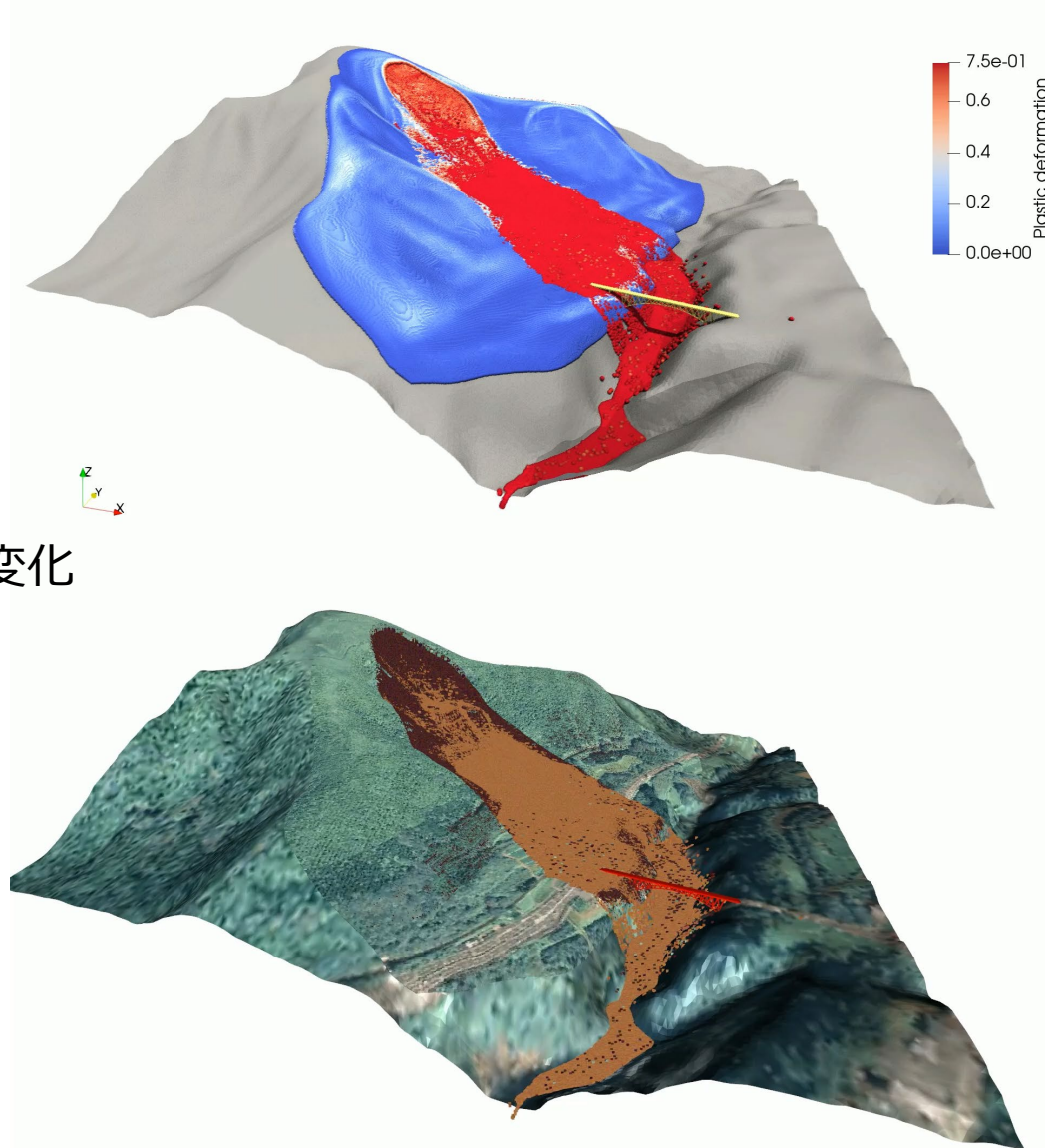
A phase-change approach to landslide simulations: Coupling finite strain elastoplastic TLSPH with non-Newtonian IISPH」, *Computers and Geotechnics*, Vol. 148, 104815, 2022. *Computers and Geotechnics*. 146, 113681., 2022



写真提供：国土交通省 九州地方整備局



弾塑性体から
非ニュートン流体へと相変化
(陰的ISPH法を使用)



結論および今後の課題・展望

結論

- ・ノード間通信により**多数GPU**を用いることで、水から高粘性流体まで統合的かつ**大規模**に解析可能な陽的・半陰的・陰的**ISPH**解析コードを整備.

GPU数を増やしても性能を落とすことなく、スケーラビリティを確認することができた.

今後の展望・課題

- ・粒子法における連立1次方程式ソルバーの**収束に要する反復回数が増加しない前処理**の開発
- ・高粘性流体解析への応用 / 物性値の異なる複数流体の流れへの応用
- ・高粘性流体と近似できる土砂災害などの実際の災害の解析への陰的ISPHの応用

	陽的ISPH	ISPH	陰的ISPH
粒子数	○→◎	△→○	×→○
計算時間	○→◎	△ (→○?)	※ (→○?)
計算精度	△	○	◎

※高粘性流体に対しては○

(単一GPU → MPI並列による多数GPU)