

複数 GPU を用いた SPH 法による大規模流体解析の高速化

九州大学 学生会員 ○大崎 春輝
 海洋研究開発機構 非会員 森川ダニエル茂夫
 九州大学 正会員 浅井 光輝

1. 緒言

我が国では、2011年の東日本大震災をはじめとして、大規模災害が頻発している。このような大規模な災害に備えるために数値解析による事前の災害影響評価は重要性を増している。なかでも、SPH法[1]などの粒子法は、津波遡上解析のような、対象とする物体の形状変化の激しい問題を効率よく計算できる手法として注目されている。粒子法は均等な粒子間隔で解かなければならないため、広域な領域を対象として解析する場合、計算モデルが大規模になる。本研究では、大規模津波遡上解析を高速に実施する SPH 法を開発することを目的とし、効率が期待できる GPU を用いた並列計算[2]を拡張し、メモリサイズの小さい GPU の弱点を補うため MPI 通信を含む動的負荷分散コードを複数 GPU 環境下で実装し、性能を測定した。

2. 解析手法

2. 1. 安定化 ISPH 法 / 安定化 EISPH 法

本研究で用いた解析手法[1]である SPH 法は、解析領域を有限個の粒子に離散化し、対象粒子の物理量を一定の領域内に存在する近傍粒子の物理量を重み付けした平均として計算する近似解法である。本研究で用いたのは、SPH 法の中でも非圧縮性流れに適した安定化 ISPH 法[1]である。安定化 ISPH 法では、ISPH 法の解析精度と安定性の両者の向上を目的として、下記の圧力ポアソン方程式により圧力を求める。

$$\langle \nabla^2 p \rangle_i^{n+1} = \frac{\rho_0 \nabla \cdot \mathbf{v}^*}{\Delta t} + \alpha \frac{\rho_0 - \langle \rho \rangle_i^n}{\Delta t^2} \quad (1)$$

ここで、 p, \mathbf{v}^*, α はそれぞれ、圧力、予測ステップにおける速度、安定化パラメータであり、 $\langle \cdot \rangle$ は SPH 近似を表す。(1)式を SPH 近似により離散化したのが次に示す(2)式である。

$$\sum_j A_{ij} (p_i^{n+1} - p_j^{n+1}) = b_i \quad (2)$$

ここで、

$$A_{ij} = \frac{2}{\rho_0} m_j \frac{\mathbf{r}_{ij} \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h)}{r_{ij}^2} \quad (3)$$

$$b_i = \frac{\rho_0 \nabla \cdot \mathbf{v}^*}{\Delta t} + \alpha \frac{\rho_0 - \langle \rho \rangle_i^n}{\Delta t^2} \quad (4)$$

である。(3)式において、時間ステップ n から $n+1$ までの微小な時間間隔では圧力の変動が小さいと仮定し、右辺の近傍粒子の圧力を前ステップの値で近似すると、次式のように圧力の陽的な更新も可能である。

$$p_i^{n+1} = \frac{b_i + \sum_j A_{ij} p_j^n}{\sum_j A_{ij}} \quad (5)$$

(3)式は、速度は陽的に更新する一方、圧力に関しては連立 1 次方程式を陰的に解く必要があるため半陰解法と呼び、一方、(6)式は速度・圧力ともに陽的に更新するため陽解法と呼ぶ。

2. 2. MPI 通信による複数 GPU 並列計算

SPH 法の GPU 及び MPI によるハイブリッド並列化の概念図を図-1 に示す。粒子法の MPI による並列化では、背面に用意したバックグラウンドセルに粒子を事前に登録し、セル単位で領域分割を行う。GPU を用いて、1GPU スレッドを各粒子毎に割り当てて並列処理する。各 GPU のメモリ領域は独立しており、各プロセスの袖部領域の粒子データが隣接プロセスから参照される際や、各粒子が位置を更新し、他のプロセスの解析領域に移動した場合の粒子データの交換の際には MPI 通信を用いることで整合性を担保した。また上述したように SPH では時間経過に伴い粒子配置が大きく変動するため、前ステップからの計算時間を計算コストとして均等化するように各 MPI プロセスが担当する解析領域を再構成する動的負荷分散を行う。また、領域再構成後に粒子番号のリナンバリング及びバックグラウンドセルの再登録を行った。

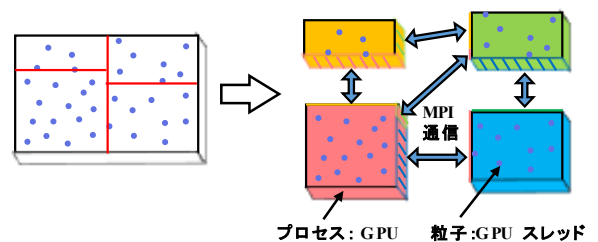


図-1 MPIによる複数 GPU 計算

キーワード 粒子法, SPH 法, GPU, 並列計算

連絡先 〒819-0395 福岡県福岡市西区元岡 744 九州大学 構造解析学研究室 TEL: 092-802-3370

3. 東京大学 Wisteria を用いた性能測定

東京大学・情報基盤センターのスパコン Wisteria のうち、GPU を搭載しているサブシステム Aquarius (以下、Wisteria-A) は、最大 45 ノードから構成され、1 ノードは 4 ソケットの CPU (36-cores Intel Xeon Platinum 8360Y 2.4 GHz) と 8 台の GPU (NVIDIA Tesla A100) から構成される。Wisteria-A を用いてダムブレイク問題の計算を行い、本コードの実行性能を計算時間により測定した。計算は倍精度浮動小数点数を用いて行い、陽解法・半陰解法それぞれにより計算を行った。1GPU 当たりの計算規模を固定して並列数を増加させる Weak スケーリングの評価を行った結果を図-2 に示す。計測結果をプロット点で、理想的な実行性能を点線で示している。1GPU 当たりの水粒子数は、陽解法では約 2030 万、半陰解法では約 510 万とし、1GPU から 64GPU までの実行性能を計測した。64GPU の条件で水粒子数は、陽解法では約 12 億 9799 万、半陰解法では 3 億 2452 万である。64 台の GPU の場合で、陽解法では 96.9 % の並列化効率を得られ、ほぼ理想に近い良好な Weak スケーリングが得られた。一方で、半陰解法では 64.4 % の並列化効率に留まった。半陰解法の陽解法に対する効率低下と、共役勾配法の 1 ステップでの反復回数をプロットしたものを図-3 に示す。問題規模の増加に伴う共役勾配法の収束性の悪化が半陰解法の効率低下の要因であると言える。これを踏まえ、演算数に対する並列化効率を計測すれば、64.4 % → 92.2 % と、陽解法と同程度の良好なスケーリングが得られた。いずれの計算アルゴリズムにおいても、GPU の増加に伴い線形的に高速化が期待できる。Wisteria-A での Weak スケーリングで得られたスループットを図-4 に示す。64GPU の条件で、陽解法では 2337.8 Mip/s と、高いスループットが得られた。

4. 結論

本研究では、大規模津波遡上解析を高速に実施する SPH 法を開発することを目的とし、計算ノードを跨ぐ環境での MPI 通信を含む動的負荷分散コードを多数 GPU 環境下で実装し、性能測定を行った。その結果、圧力を陽的に更新する陽解法ではほぼ理想通りの良好な Weak スケーリングを達成できた。一方、半陰解法では、問題規模の増加に伴い連立 1 次方程式ソルバーの反復回数が増加するため、陽解法ほどの効率は得られなかったが、1 反復当たりの計算時間に関する並列

化効率を計測すると陽解法と同程度の良好なものであった。多数 GPU による並列計算を行うことで、数十億粒子のオーダーの大規模流体解析を高速に実行可能であることを示した。今後は、特に半陰解法の更なる改良が必要と考えている。たとえば、連立 1 次方程式ソルバーの反復解法において、自由度の増加に対し反復回数が増加しない前処理方法の開発があげられる。また、空間充填曲線を用いての粒子番号のリナンバリングへの変更によ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上げ、GPU の単体性能を向上させることも考えている。

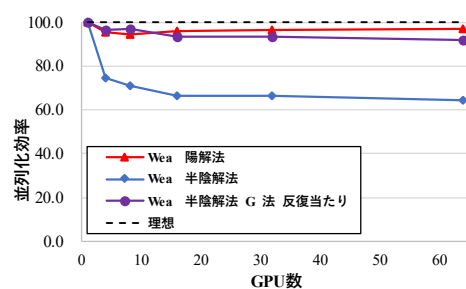


図-2 Weak スケーリング結果

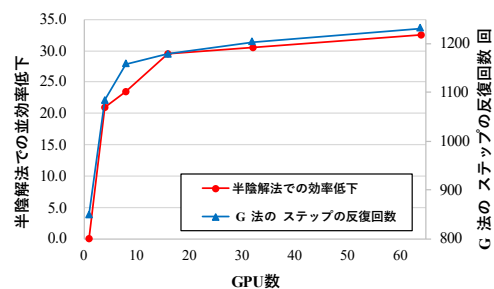


図-3 Weak スケーリングにおける半陰解法の効率低下と共役勾配法の反復回数

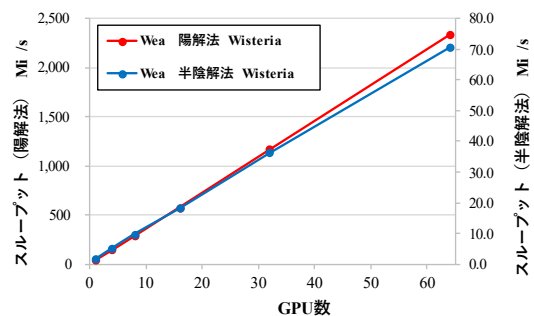


図-4 Weak スケーリングにおけるスループット

参考文献

- 1) 浅井光輝：明解 粒子法，丸善，2022。
- 2) D. S. Morikawa, H. Senadheera and M. Asai, Explicit Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics in a multi-GPU environment for large scale simulations, *Comput. Part. Mech.*, Vol. 8(3), pp. 493-510, 2020.