

## 多数 GPU による SPH 粒子法の大規模化・高速化

九州大学 学生会員 ○大崎 春輝  
 九州大学 学生会員 森川 ダニエル 茂夫  
 九州大学 正 会 員 浅井 光輝

### 1. はじめに

我が国では、2011 年の東日本大震災、あるいは甚大化している豪雨災害など、大規模災害が頻発している。今後危惧される大規模災害に備えるため、事前の被害予測が求められ、数値解析による高精度な災害影響評価は重要性を増している。なかでも、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 SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 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を効率的に解く手法として注目されている。

本研究では、比較的安価な計算機で効率が期待できる GPU (Graphic Processing Unit) を用いた並列計算[1]を拡張し、計算ノードを跨ぐ環境での通信を含む多数 GPU の利用を検討した。本研究が目的とする、都市規模の災害解析へと適用する場合、広域な対象領域に対して、粒子法は均等な粒子間隔で解かなければならないため、計算モデルが大規模になる。しかし、GPU のメモリサイズは CPU と比較すると小さく、大規模な解析を行うには、複数 GPU を用いた計算が必要となる。本研究では、大規模津波遡上解析を高速に行う解析手法を開発することを目的とし、MPI (Message Passing Interface) を用いたマルチ GPU による SPH コードの開発及びダムブレイク問題による性能分析を行った。

### 2. 解析手法

#### 2.1 安定化 ISPH 法

本研究で用いた解析手法[1]は、非圧縮性流れに適した安定化 ISPH (Incompressible SPH) 法である。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、微圧縮性を一部許容した下記の圧力ポアソン方程式により圧力を求める。

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

上式を離散化したのが次に示す式である。

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

ここで、

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

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

である。(2)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。

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

(2)式は、圧力に関して連立 1 次方程式を解く必要があるため半陰解法と呼び、一方、(5)式は陽解法と呼ぶ。

#### 2.2 マルチ GPU による並列計算

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。領域分割された小領域 (MPI プロセス) を 1 台の GPU に割り当てて計算する。また、GPU のスレッドを用い、粒子毎の計算を並列処理する。各 GPU のメモリ領域は独立しており、隣接する小領域における計算で参照される袖部領域の粒子データは、隣接領域間の通信が必要である。また、SPH では時間経過に伴い粒子配置が大きく変動するため、計算コストを均等化するように小領域を再構成する動的負荷分散を行った。

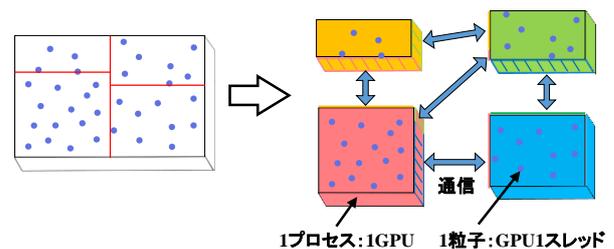


図 1. マルチ GPU における MPI 並列化

### 3. ITO を用いた性能分析

九州大学・情報基盤開発センターのスパコン ITO のうち、GPU を搭載しているサブシステム B は、16 ノードから構成され、1 ノードは 2 ソケットの CPU (18-cores Intel Xeon Gold 6140 2.3 GHz) と 4 台の GPU (NVIDIA Tesla P100) から構成される。

ITO-B 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計測した。計算は倍精度浮動小数点を用いて行い、陽解法・半陰解法それぞれにより計算を行った。

本コードの性能分析として、1 プロセス (1GPU) 当たりの問題サイズ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。Weak スケーリングでは、GPU 数を増やしても計算時間が一定であれば理想的な性能と評価される。1 台の GPU 当たりの水粒子数を約 256 万粒子 (壁粒子約 126 万粒子、総粒子約 382 万粒子) とし、1 台の GPU から 16 台の GPU までの実行性能を計測した。16 台の GPU の条件で、水粒子約 4059 万粒子 (壁粒子約 625 万粒子、総粒子数 4683 万粒子) である。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。16 台の GPU の場合で、陽解法では 95.8% の並列化効率を得られ、15.3 倍の性能向上であり、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 64.0% の並列化効率で 10.2 倍の性能向上に留まった。半陰解法では、圧力を求める際に反復解法である共役勾配法を用いており、計算時間の大半を占めている。問題規模の増加に伴い、共役勾配法による連立 1 次方程式ソルバーの反復回数が増加しており、演算数に対する並列化効率を計測すれば、64.0% → 93.9% と、陽解法と同程度の良好なスケールアップが得られた。

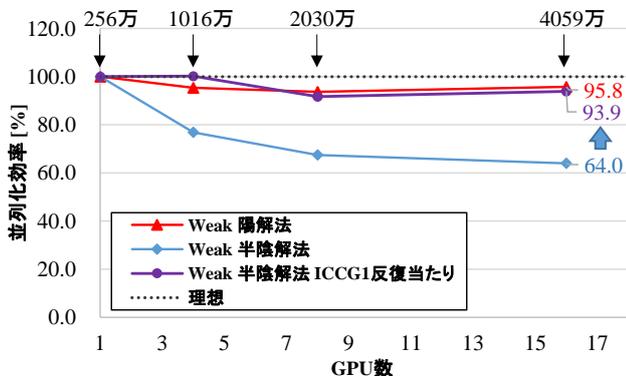


図 2. Weak スケーリング計測結果

次に、全体の問題サイズを固定して並列数を増加させる Strong スケーリングを半陰解法により測定したときのプロファイラを 図 3 に示す。Strong スケーリングでは、GPU 数を  $N$  倍に増やしたときの計算時間が  $1/N$

であれば理想的な性能だと評価される。水粒子数を約 256 万粒子 (壁粒子約 126 万粒子、総粒子約 382 万粒子) として計測した。この図からも半陰解法では連立 1 次方程式ソルバーの計算時間 (= 演算時間 + 通信時間) が大半を占めることが確認できる。また、GPU の台数を増やすほど、演算時間は単調に減少していることが確認できるが、通信時間はほぼ一定となっていた。

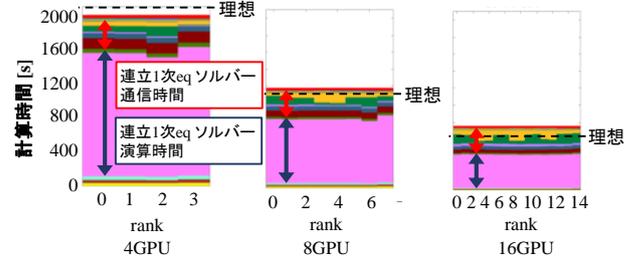


図 3. Strong スケーリング (半陰解法) のプロファイラ (サブルーチン毎の計算時間を色別で表示)

### 4. 結論

本研究では、多数 GPU による SPH 解析の大規模化を図るために MPI による並列化を行い、性能を計測した。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 スケーリングを示した。一方で、半陰解法では、連立 1 次方程式ソルバーが計算時間の大半を占め、問題規模の増加に伴い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。

今後の課題としては特に半陰解法の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、多階層構造をなす GPU のメモリにおける、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ることも望ましい。現状のコードでは、セルを一方向に走査しながら粒子番号をリナンバリングしているが、これを空間充填曲線による粒子番号のリナンバリングに変更することで、メモリの効果的な利用ができるであろう。

### 参考文献

- [1] 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