

# 입자기반 수치해석기법 개발

한국과학기술정보연구원

정 민 중

# 목 차

제1장 입자기반 수치해석기법 개발의 개요 .....	1
제1절 연구 개발의 목적 .....	1
제2절 연구 개발의 필요성 및 범위 .....	1
1. 필요성 .....	1
2. 연구 범위 .....	3
제2장 국내외 기술 개발 현황 .....	4
제1절 국외 동향 .....	4
제2절 국내 동향 .....	6
제3장 연구개발 수행 내용 .....	10
제1절 KISTI Moving Particle Simulator - KMPS .....	10
제2절 KMPS 해석 결과 가시화 프로그램 개발 .....	14
제3절 OpenMP와 GPU 컴퓨팅을 활용한 KMPS 병렬화 .....	16
제4절 연구 결과 및 성과의 우수성 .....	18
1. 해석 Solver 구성을 위한 자체 함수 개발 완료 .....	18
2. 효과적인 입자해석 경계함수의 개발 .....	19
3. 구조-유동 연성해석을 위한 검증방안 수립 .....	22
4. 확장 가능한 입자해석 가시화 프로그램 추가 개발 .....	25
제4장 연구성과의 활용계획 .....	27

# 1. 입자기반 수치해석 개발의 개요

## 가. 연구 개발의 목적

- 비격자형 (mesh free) 입자기반 한국과학기술정보연구원(KISTI) 자체 수치해석기법 개발
- 슈퍼컴퓨팅을 위한 해석 프로그램 설계 및 서비스 유용성 검증
- 개발된 입자기반 해석자(Solver)를 사용 구조물 유동해석 실시 및 전용 가시화 코드 작성

## 나. 연구 개발의 필요성 및 범위

### 1) 필요성

- 기존 슈퍼컴퓨팅 활용 격자형 해석기법의 문제점
  - 시장지배적인 고가 상용소프트웨어(ex: Ansys, Fluent, LS-Dyna)를 이용한 해석
  - 병렬컴퓨팅 및 외부 서비스에 상당한 라이선스 비용이 발생
  - 격자기반의 한계로 인하여 일정규모 이상 병렬계산의 Scalability 저하
  - 격자생성에 상당한 노하우가 필요하고 대변형 복잡계 해석 난이도 증가
  - 격자기반 해석기법의 기술적 완성도로 인하여 신규 개발이 어려움
  - 그림 1에 입자를 이용한 유체흐름을 표시



그림 1 입자를 이용한 유체흐름의 표현

- o 입자기반 해석기법 개발 개요
  - 대표적인 Mesh Free 기법인 Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 등을 고려
  - 비격자형 해석방법으로 해석의 전처리에 사용되는 비용과 시간 절감 가능
  - 자유표면, 대변형, 구조-유체 연성해석 Solver 개발이 용이
  - 입자 규모와 해석의 정확도 상관관계의 문제점 존재
  - 초병렬화, 경계조건의 설정, 수렴을 위한 해석인자조절의 난이도 극복이 관건
  - 자체 코드의 경우 자동화, 외부 서비스, 기술이전, 차세대슈퍼컴퓨팅에 적합
  - 그림 2에 입자법을 이용한 연성해석과 가시화를 표시

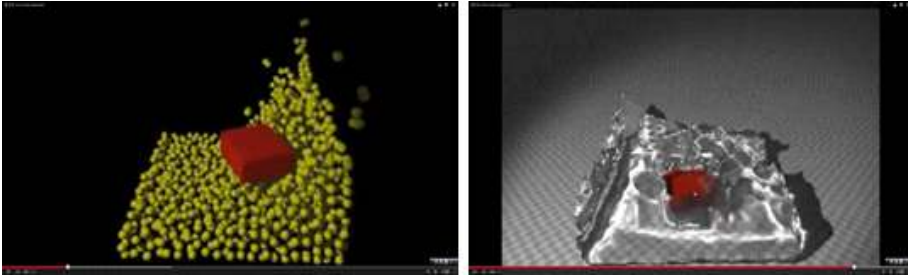


그림 2 입자법을 이용한 유체-고체 연성해석 및 가시화의 예

## 2) 연구 범위

- 입자기반 유동 해석자(Solver) 1종 개발
  - 입자기반 해석 모듈개발: 이웃입자지도, 커널, 유동역학계산, 경계조건 함수 개발
  - IO/프로그램 설계, 검증모델 유동해석 실시 및 검토
- 입자해석 가시화 프로그램 1종 개발
- 입자기반 수치해석 Solver 병렬화 2종
  - OpenMP, GPU 병렬화 2종 및 성능개선


## 2. 국내외 기술 개발 현황

### 가. 국외 동향

- 70년대 후반부터 SPH기법이 발달하고 격자기반 해석과 함께 주요한 시뮬레이션 기법으로 사용됨
- 그림 3에 입자기반의 역사를 표시



### History and Research Trend



---

- **Meshfree Method**
  - Meshfree Collocation Method
    - Smooth Particle Hydrodynamics (SPH) [Lucy1977, Monaghan 1980, Libersky1993]
    - Finite Point Method [Onate et al.1996]
  - Meshfree Galerkin Method
    - Element Free Galerkin (EFG) [Belytschko et al. 1994]
    - Reproducing Kernel Particle Method (RKPM) [Liu et al. 1995]
    - Partition of Unity Method [Babuska and Melenk 1995]
    - HP-Clouds [Duarte and Oden 1996]
    - Free-Mesh Method [Yagawa et al. 1996]
    - Natural Element Method [Sukumar et al.1998]
    - Meshless Local Petrov-Galerkin Meshfree Method(MLPG) [Atluri et al.1998]
    - Local Boundary Integral Equation (LBIE) [Atluri et al. 1998]
    - Finite Sphere Method [Bathe 1998], Particle Finite Element Method [Idelsohn et al.2004] ...
  - Meshfree Least Square Method, ...
- **(FEM, Control Volume, BEM ...) + Meshfree Method**
  - Coupled FEM/Meshfree Method [1995]
  - Extended FEM Method [1999]
  - Finite Particle Method [1999]

그림 3 무요소법, 입자법 및 요소법의 역사

- 기계해석 분야의 경우 계산비용 소요, 격자법의 성숙에 따라 일정부분 발전이 지연

- DEM(Discrete Element Method)의 경우가 토목 광산 농업 분야에 적용이 성공한 사례임 (그림 4에 농산물 적용사례를 표시)

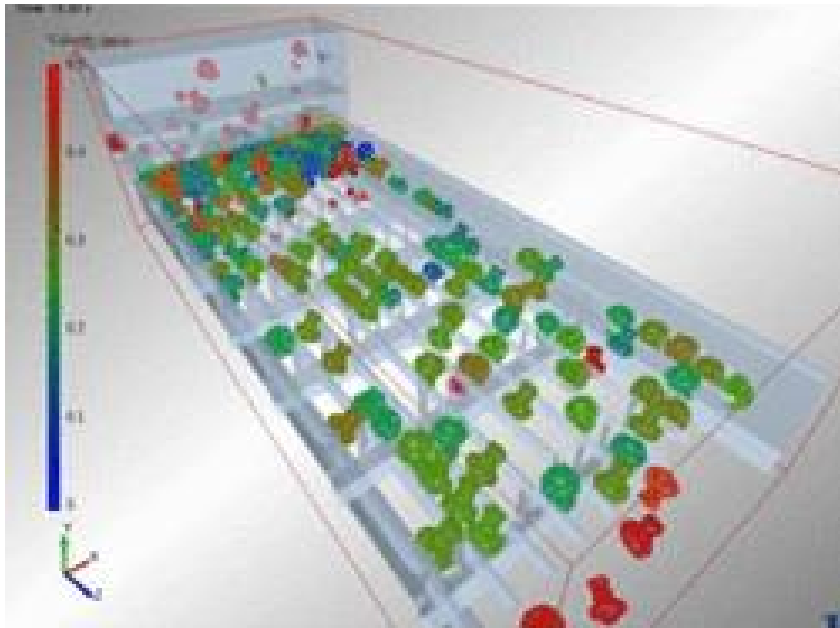


그림 4 DEM을 이용한 농산물 분류기의 시물레이션

- 주요한 입자기반 해석코드로 SPHERIC ([https://wiki.manchester.ac.uk/spheric/index.php/Main\\_Page](https://wiki.manchester.ac.uk/spheric/index.php/Main_Page)), DualSPHysics(<http://www.dual.sphysics.org/>), EDEM(<http://www.dem-solutions.com>) 등이 있음
- 그림 5에 DualSPHysics의 적용 사례를 표시
- SPH 기반의 해석기법은 실제 유체해석에서 비압축성 특성을

준압축성 등으로 해결하는 단점이 있음

- 입자기반 해석방법의 경우, 격자기반의 ANSYS, ABAQUS와 같은 대형 산업용 해석 솔루션으로 발전 가능

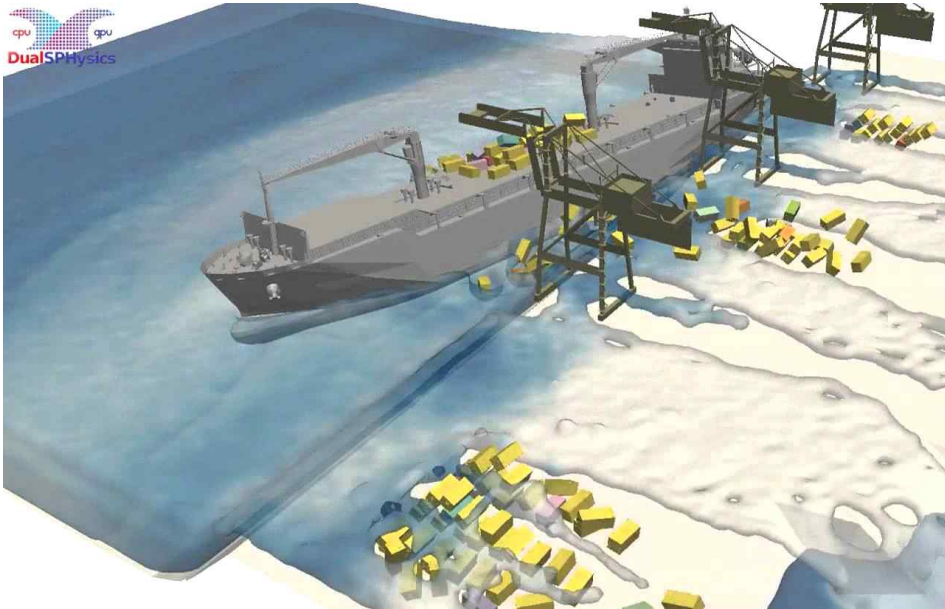


그림 5 DualSPHysics를 활용한 항구에서 화물선에 대한 파도 영향 평가 해석 사례

## 나. 국내 동향

- 서울대 등에서 SPH의 장점을 고려, 다양한 물리적 현상의 분석에 적용연구를 실시
- Rocket injector에서 연료/산화제의 분무특성을 수치적으로 해석할 수 있는 SPH코드를 개발중 (그림 6 참조)



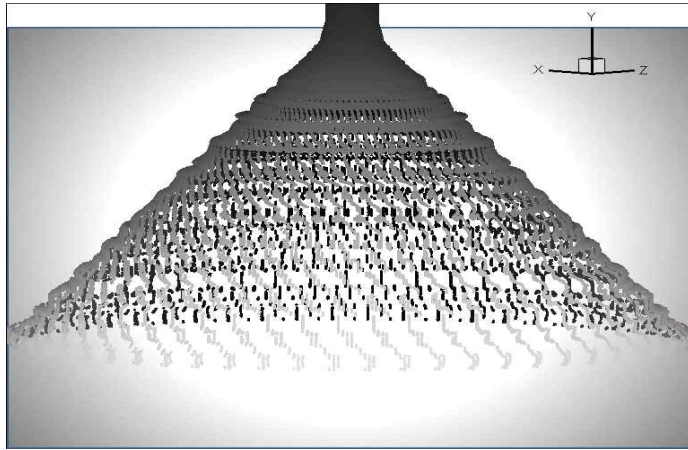


그림 6 SPH를 이용한 로켓 노즐 분사부분의 유동해석

- 2013년 DEM in-house코드에 대한 SPH 코드 연동 연구 (코드 비공개, 일반연구자지원사업, 교과부)
- 입자기반의 해석시 입자의 지배방정식에 화학방정식, 연소방정식 등, 다양한 방정식이 가능, 통합 시뮬레이션 코드에 적합
- 상용소프트웨어의 경우 디엔에프코텍社에서 유동해석 N-Flow를, 베퉀얼모션社에서 구조동력학 솔루션을 공급하고 있음

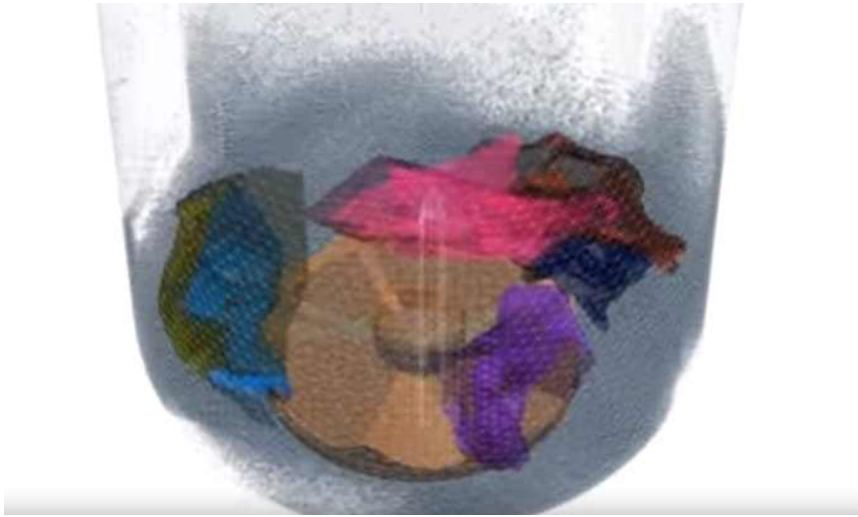


그림 7 메타리버테크놀로지의 DEM을 활용한 세탁기 내부 유동해석

- 메타리버테크놀로지사의 경우 DEM 기반 솔버(그림 7)를 개발하여 공급하고 있으며, 유동해석 특화를 위해서는 Lattice-Boltzmann Method(LBM)를 기반으로 개발중
- 이는 DEM 기법 특성이 구조의 탄성력 기반해석으로 유체에 적용시 한계가 있을 수 있음
- 평선베이사의 경우 일본의 ParticleWorks를 국내에 도입/배급하고 있으며, 자체 동역학 CAE 소프트웨어와의 연동도 실시하고 있음 (그림 8)
- 국내 대학의 경우 고에너지물리 천문, 해양 분야 등에서 연구활동 수준의 입자기반해석 적용이 활발함.

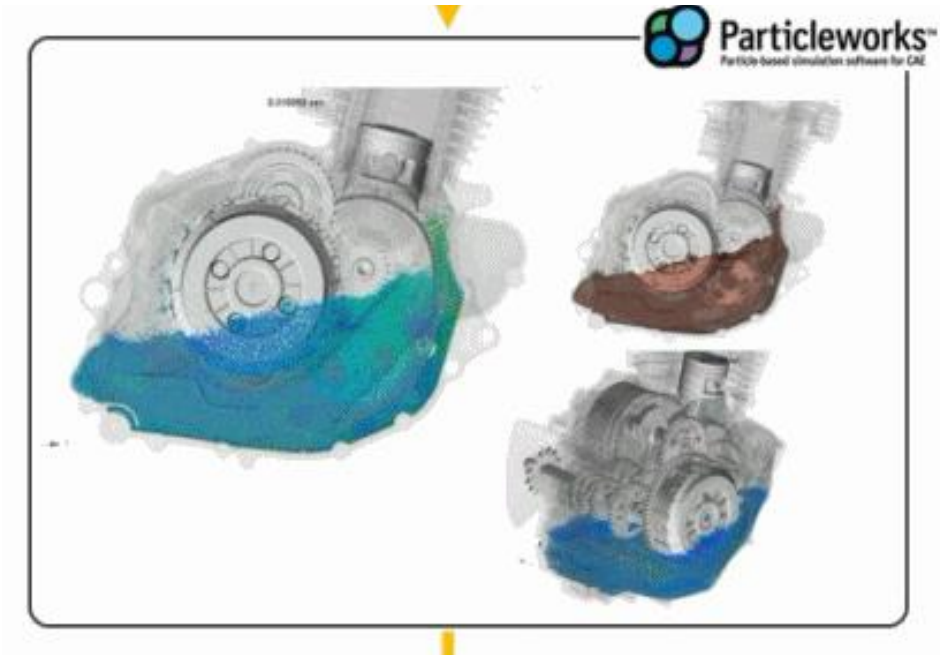


그림 8 엔진 크랭크와 피스톤에 가해지는 유체압력에 대한 ParticleWorks 해석 사례

### 3. 연구개발 수행 내용

#### 가. KISTI Moving Particle Simulator - KMPS

- 가속도, 속도, 위치, 밀도, 압력 등의 함수식을 개발
- 입력형상 및 경계조건 반영을 위한 코드 개발
- 개발된 Solver를 이용한 검증 모델 유동해석 실시
- Mesh 벽면 사용시 발생하는 입자 유출 등의 문제를 해결
- 유동 및 구조해석 시뮬레이션을 위한 프로그램 설계 및 IO 정의
- 개발된 Solver를 위한 전용 가시화 프로그램 작성
- 대규모 입자계산을 위한 Solver OpenMP 병렬화 및 GPU 프로그래밍
- 각 계산 함수별 병렬 성능 검사 및 속도향상 실시
- 그림 9에 연구개발 추진체계를 표시함

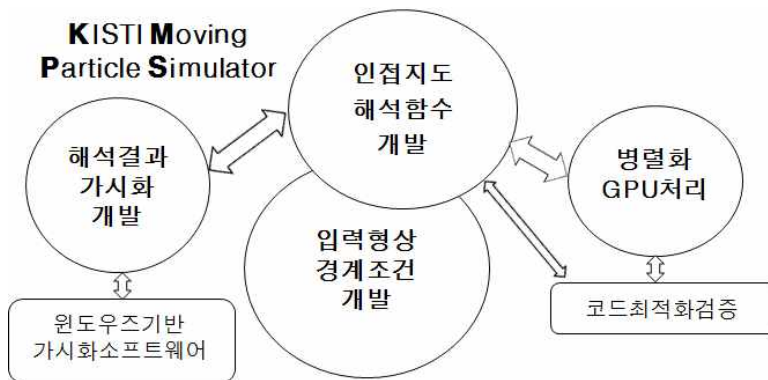


그림 9 KMPS 개발을 위한 추진체계

- 기본적인 입자해석 함수에 추가적인 함수 개발을 통하여 기존 문제점을 극복
- 본 과제에서 개발된 Solver를 구성하는 해석함수들의 시간증분  $dt$ 에서의 해석과정을 그림 10에 표시

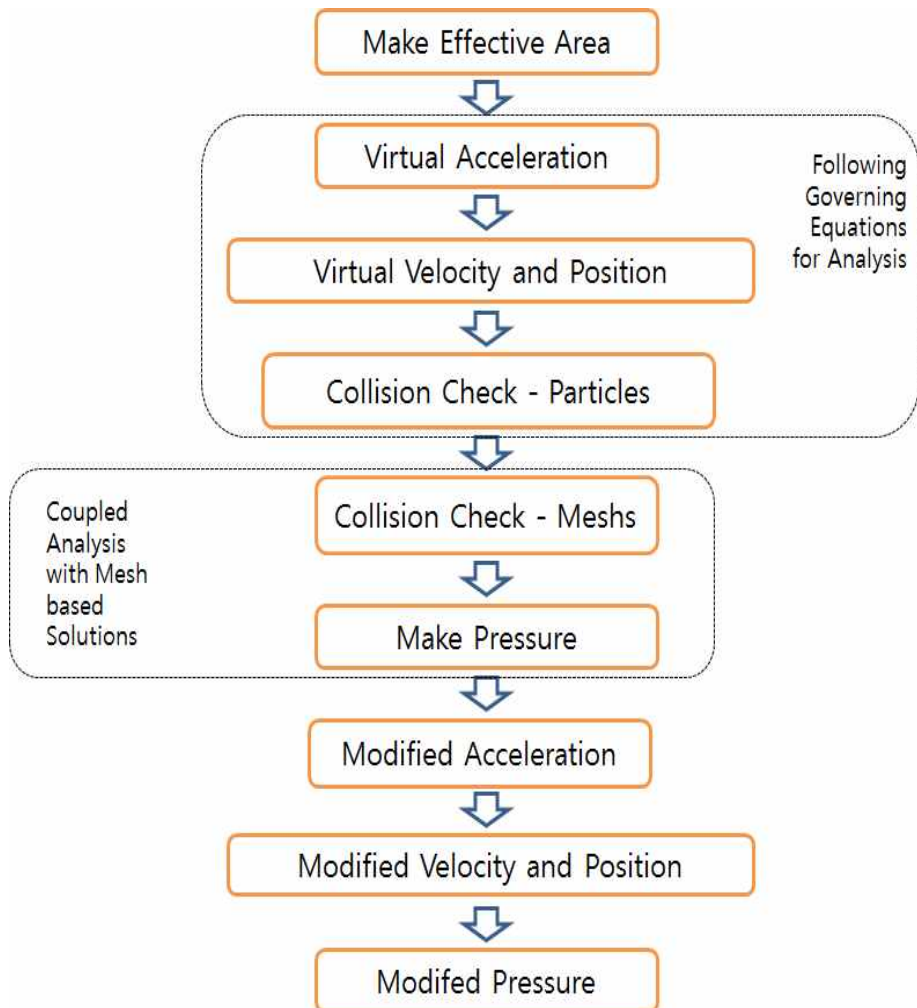


그림 10 유동계산을 위한  $dt$  경과에 따른 각 해석 함수 구성

○ 그림 10의 개발된 해석함수들 각각의 기능은 아래와 같음

함수명	함수내부 기능
Make_Effective_Area()	계산속도 향상을 위한 영역분할
Virtual_Acceleration()	$dt$ 를 고려한 가상 가속도 $a^*$ 계산
Virtual_VelocityPosition()	가상 속도 $u^*$ , 가상 위치 $r^*$ 계산
Collision_Check()	입자간 충돌에 대한 속도 $u^*$ 계산
Mesh_Collision_Check()	요소벽면 충돌에 대한 속도 $u^{**}$ 계산
Make_Pressure()	유동 압력 $P^*$ , 요소벽면 충돌의 경우 추가적인 $P^{**}$ 계산
Modified_Acceleration()	계산된 압력에 대응하는 가상 가속도 $a'$ 계산
Modified_VelocityPosition()	가속도에 기반하여 $dt$ 경과 수정 속도 $u^{k+1}$ , 위치 $r^{k+1}$ 계산
Modified_Pressure()	수정된 압력 $P^{k+1}$ 계산

## 나. KMPS 해석 결과 가시화 프로그램 개발

- 입자의 시간 경과에 대응하는 속도, 압력, 위치 가시화 프로그램의 개발
- C/C++, OpenGL, GTK 등을 활용한 그림 11의 가시화 프로그램을 통하여 해석 검증을 수행
- 유동 입자, 벽 강제입자, 벽 Mesh 등의 시각화 실시
- 입자 속도, 압력, 시간 증분에 대한 평균압력을 color contour로 표시하여 물리량 확인
- 해석시간 경과에 대응하여 해당 결과파일의 가시화를 통하여 유동흐름의 확인이 가능

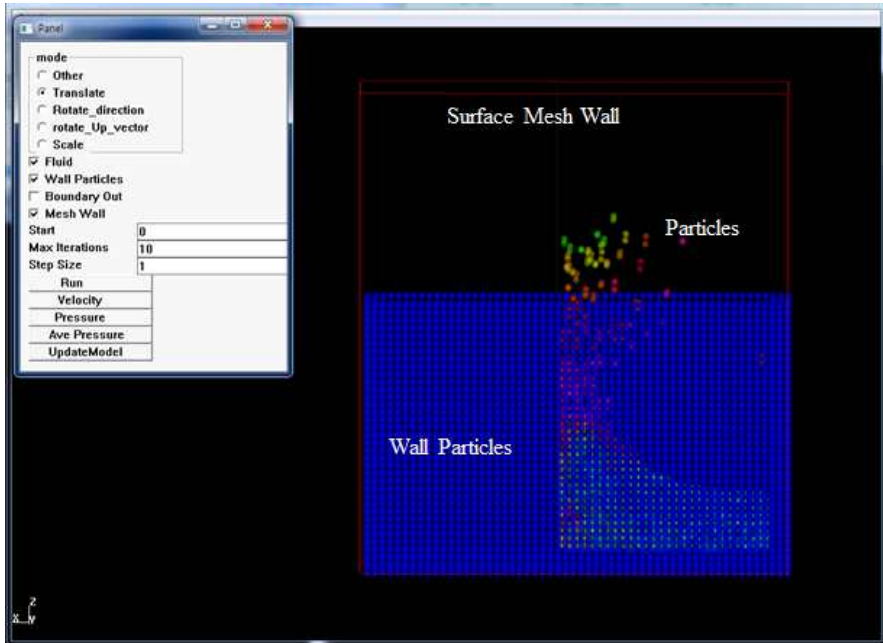


그림 11 개발된 가시화 프로그램을 활용한 입자 유동 형상



## 다. OpenMP와 GPU 컴퓨팅을 활용한 KMPS 병렬화

- NVIDIA CUDA 프로그래밍에 따른 GPU 병렬화 실시: Nvidia Tesla K40M GPU 사용
- OpenMP를 활용한 병렬화 실시: Xeon E3 4Cores 사용
- 입자수 19,136개 해석시간 5.0sec 이하에서 병렬화 효율은 OpenMP의 경우 3.79배, GPU 5.06배의 속도 향상
- 그림 12에 Single Core, 4 Cores, GPU 사용시의 실제 계산시간을 표시

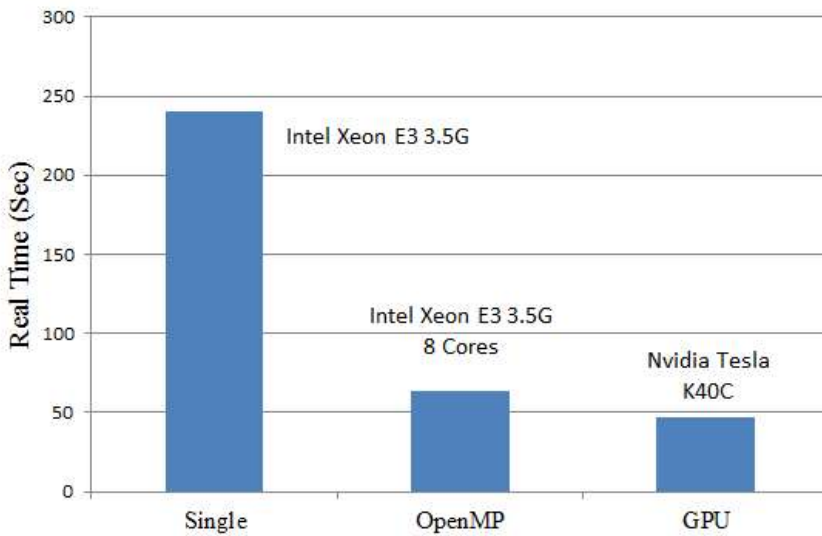


그림 12 개발된 입자해석 프로그램의 OpenMP 및 GPU 병렬화 결과

- 프로파일링 결과 약 80 % 정도의 시간을 주요 계산 루틴에서 사용

- 속도향상 결과는 해석문제의 입자의 개수와 직접 관련이 있음
- 입자의 개수가 많아지면 주요 계산 루틴이 차지하는 비율이 증가
- 입자수 109,236개의 경우 그림 13과 같은 병렬화 효과를 확인할 수 있음
- 그림 13은 반응용기에 유입되는 용액의 흐름을 2.0sec 이내에서 해석한 내용으로 단일 Core에서 27.86시간, 8 Core에서 5.59시간, GPU에서 0.64시간이 소요됨

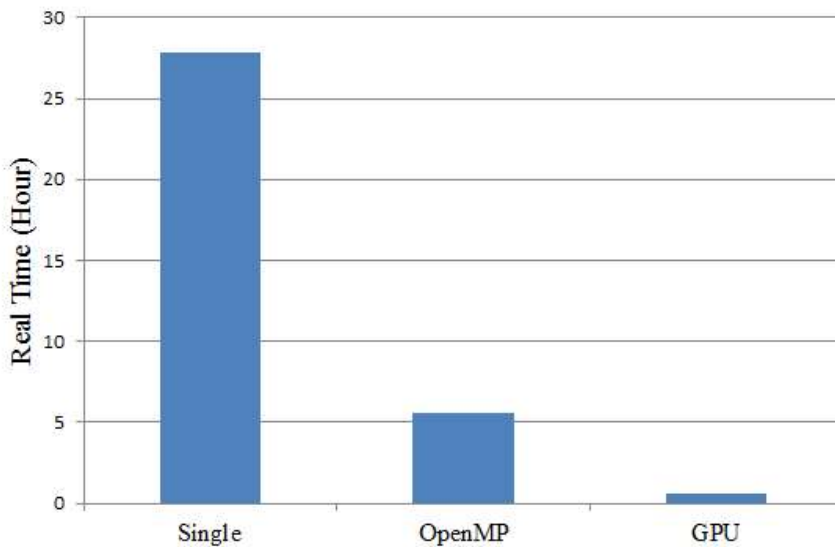


그림 13 입자수 109,236개의 유동해석에서의 병렬화 결과

- 이때 병렬화 효율은 OpenMP 4.98배, GPU 43.53배에 달함

- 개발된 Solver의 Scalability가 우수하여 계산 입자의 개수가 많을수록 성능 향상이 대폭적으로 커질 것으로 예상됨

## 라. 연구 결과 및 성과의 우수성

### 1) 해석 Solver 구성을 위한 자체 함수 개발 완료

- 자체 해석 함수의 경우, SHP 기법에서 사용이 어려운 비압축성 유체의 해석에 사용이 가능
- DEM 등과 달리 직접적으로 유동함수의 해석이 가능하여 실제문제의 적용이 수월
- 입자간 계산시 발생하는 계산량 절감을 위한 이웃입자지도 기법 적용 및 병렬화 효율 우수
- 커널함수 사용을 통한 연속체 공간의 이산화 적용, 계산효율 증대
- \*.out 파일 형식에 의한 I/O 정의에 따라 가시화 및 재현성 편리
- 그림 14에 \*.out 파일내부 각각의 구성에 대하여 표시함

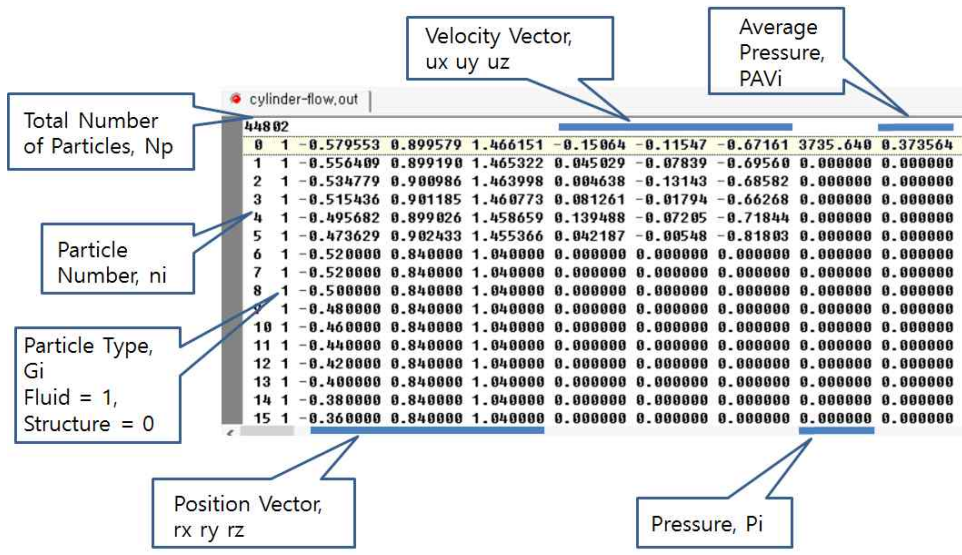


그림 14 입자계산의 입력 및 출력에 사용하는 파일 내부 구조

- 시간변화량 가정에 따른 가상가속도, 가상속도위치, 충돌확인, 벽면충돌확인, 가상압력 함수개발 완료
- 시간변화량 확정 수정 가속도, 수정 속도위치 및 수정압력 함수들을 개발

## 2) 효과적인 입자해석 경계함수의 개발

- 단순 격자활용 경계조건의 문제점으로 Repulsive-force 모델의 경우 벽면 투과 현상이 발생
- 이를 해결하기 위한 과도한 dt 축소는 계산시간 비용 상승으로 사용불가

- 그림 15에 경계조건 문제 발생시의 벽면 투과 현상을 표시

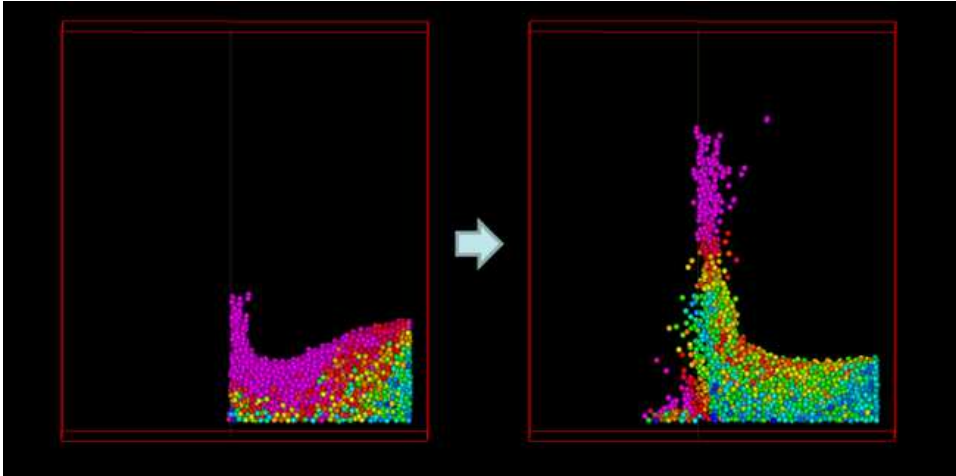


그림 15 기존 모델 사용시 발생하는 경계조건 면에서의 투과현상

- Virtual mirror particle 모델의 경우 angled edge 모서리의 유출현상을 해결해야 함
- 그림 16에 angled edge에서 해석시간 경과에 따른 특이점 발생에 의한 입자 유출 예를 표시

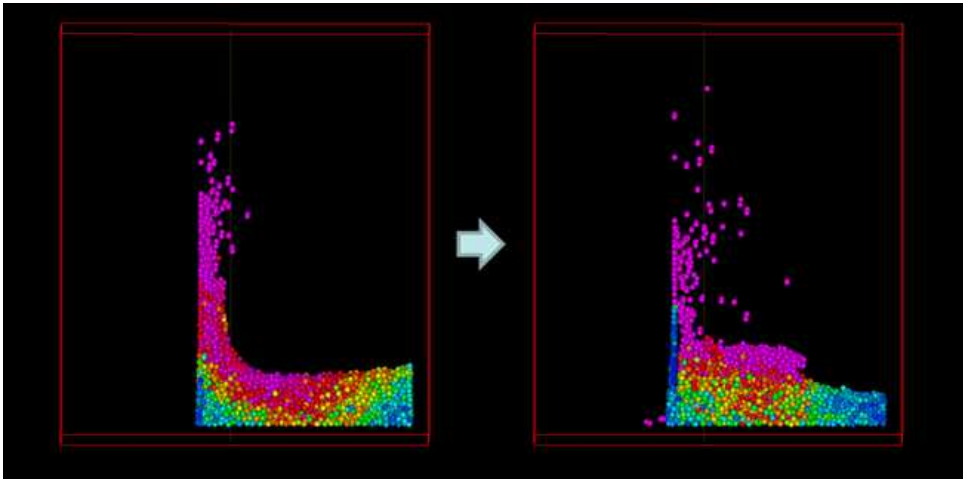


그림 16 경계조건 설정에서 발생하는 angled edge 표면의 유출현상

- 개발된 입자해석 함수에 향후 Mesh 기반 CAE 솔루션 등의 활용을 위한 경계조건을 구축
- dt 경과에 따른 각  $u^{**}$ ,  $P^{**}$  함수 개발
- 각 dt에 대하여 prediction step과 correction step으로 분리하여 진행
- 이때 prediction step은 속도  $V^*$ 와  $V$ 에 대한 dt의 함수로 구성
- correction step의 경우는 압력장 변화에 대한 속도장 변화로 구성함
- 입자 i에서 압력 변화  $\nabla P_i$ 는 주변입자 n과 초기 입자  $n_0$ 로 구성함
- 실제 입자 압력은  $P_i = (n_i - n_0) \cdot A_0 \cdot m_i$  형식을 따름
- 경계조건 만족을 위한 추가함수 개발에 따른 유동해석 결과 검증

- 개발된 함수에 따라 벽면 투과 및 angled edge 표면의 유출문제가 해결됨
- 입자해석 경계함수의 개발에 따른 해석 결과 그림 17와 같은 해석이 가능
- 시간흐름 dt에서 벽면 통과 및 angled edge에서의 관통현상을 극복함

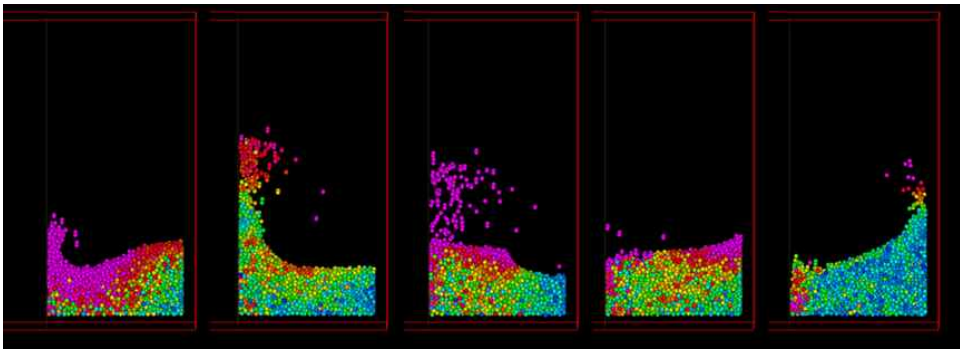


그림 17 입자해석 경계함수의 개발에 따른 해석 결과 - 시간흐름 dt 축소없이 Mesh 경계 통과 및 angled edge에서의 관통현상을 극복

### 3) 구조-유동 연성해석을 위한 검증방안 수립

- 기본적으로 검증방법으로 실험 비교에 의한 정성적 평가를 수행함이 타당함
- 자체적인 실험 데이터 적용 검증 모델 설계는 장비조건 등의 제약이 있음

- 연성해석의 정량적 평가에 대해서는 일정 시간 T에 대한 유동흐름, 벽면에서의 압력변동이 고려됨
- 구조 연성해석을 위해서는 Explicit 기법상의 조건을 만족시키기 위한 상수 결정이 필수임
- 이를 위해서는 반복적 수치실험과 압력변동 항에 대한 수치 모델의 개선이 필요
- 특히 주변입자  $n_i$ 에 대한 고려를 통하여 구조체의 압력이상 해결을 기대함
- 수치적인 해에 의한 검증은 기존 문헌을 참고하여 그림 18의 문제를 설정
- 구조-유동 연성해석의 그림 18와 같은 초기 조건과 압력 점검 위치를 사용할 예정임

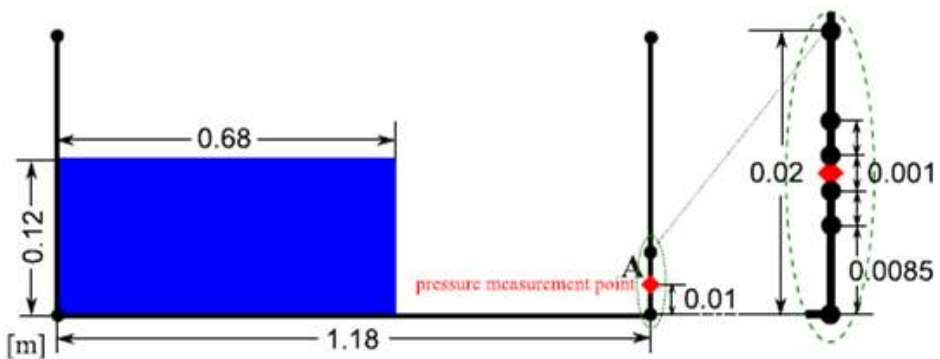


그림 18 구조-유동 연성해석을 위한 형상조건 및 벽면 압력 측정 부위



- 해석시간 경과에 따른 연성해석 결과를 그림 19와 비교하여 구조-유체 해석의 검증이 가능함

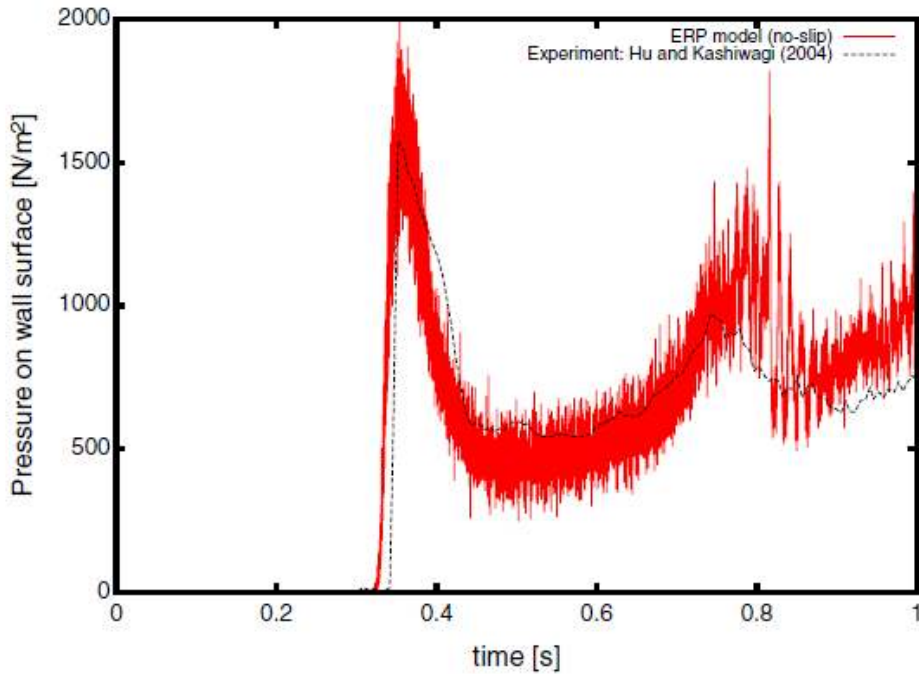


그림 19 해석시간 경과에 따른 유동에 의하여 구조물에 가해지는 압력 변동에 대한 실험 및 해석 결과

- 개발된 입자해석의 지배방정식을 DEM 실험을 위한 재료/고체 방정식으로 변경하여 그림 20과 같은 구조-진동 문제에 활용이 가능

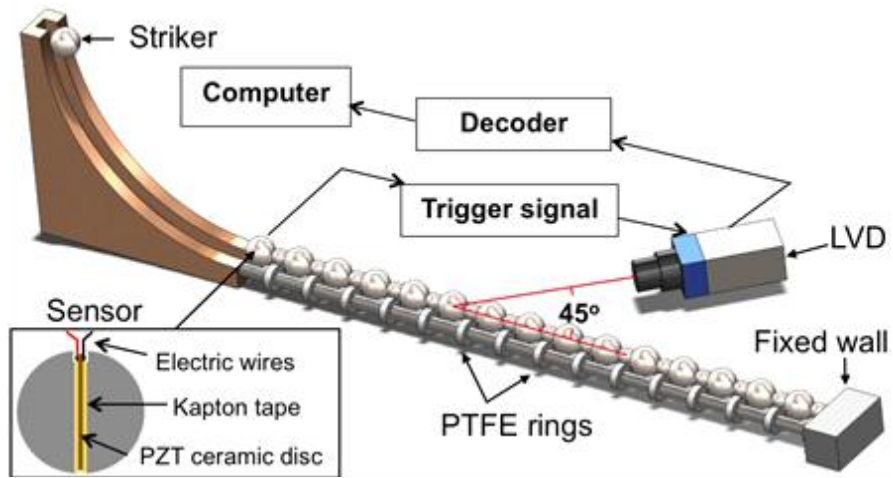


그림 20 입자를 이용한 구조물의 충돌 및 진동파 검출 실험 예

#### 4) 확장 가능한 입자해석 가시화 프로그램 추가 개발

- 그림 11의 개발된 가시화 프로그램은 연구목적으로는 충분하나 향후 기술이전 등을 고려하면 사용자 인터페이스 구성에 한계가 있음
- 이는 C/C++ 언어로 구성이 되나 그래픽 부분에 Unix/Linux 기반의 라이브러리 참조에 기인함
- 그림 11의 개발된 가시화 프로그램의 Unix/Linux 기반의 인터페이스 라이브러리 분석
- OpenGL 기반의 glu, glaux, glut, gdi 라이브러리의 MS Windows 전향번역(Code Wrapping)을 실시
- 2단계로 분리된 사용자 인터페이스 부분의 Windows 기반 C/C#

## 재작성 및 통합화

- 상용 SW 형식의 사용자 인터페이스 참조 및 설계를 반영, 그림 21의 윈도우즈 기반 가시화 프로그램을 개발함

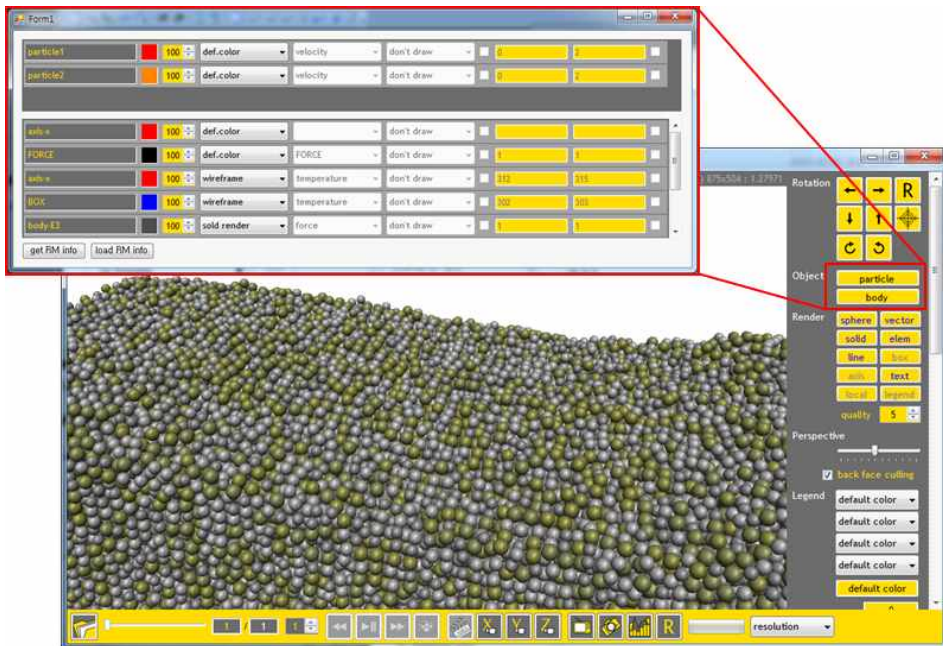


그림 21 윈도우즈 기반 입자해석 가시화 프로그램

- 시간변화에 따른 해석결과의 속도장, 압력장, 평균압력장, 유동입자, 장체입자, Mesh 벽면 등의 표현이 가능
- 확장성을 고려하여 추가적인 속성의 부여 및 가시화가 가능한 구조로 개발
- 입자와 삼각요소의 집합으로 정의되는 다수의 Body, 그 밖에 line과

text를 render할 수 있는 format으로 확장

- 입자와 Body의 물리량을 가변적으로 확장 가능한 구조(Vector와 Scalar)
- Solver에서 아래와 같이 정의되는 format으로 file을 작성하면  
Renderer에서 다양한 방식의 화면을 render하도록 함
- 효율적인 입자 render를 지원하면서 다양한 용도로 사용 가능하도록  
작성

## 4. 연구성과의 활용계획

- 슈퍼컴퓨팅 지원을 위한 자체 전산해석 - KMPS Solver 확보
- 라이선스 제한이 없는 대변형 구조-유동 해석지원 가능
- 그림 22에 본 과제에서 개발된 KMPS Solver를 활용한 교반기 유동해석 사례를 나타냄

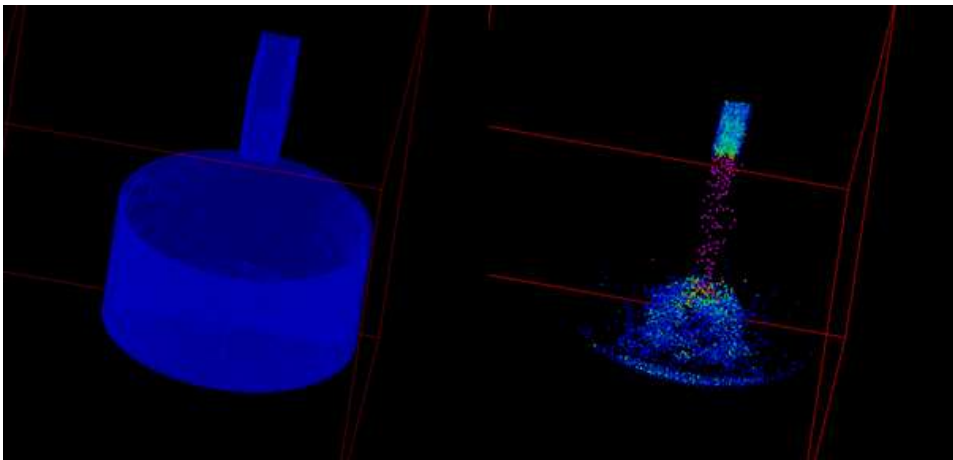


그림 22 KMPS Solver를 활용한 교반기 내부 유동해석, 구조모델(좌) 및 유동 흐름(우)

- 다양한 응용서비스 프로그램 개발을 위한 기초 기술 확보
- 차세대 슈퍼컴퓨팅을 위한 Solver 및 GUP 가속기 관련 기술 확보
- 해석 전처리 및 후처리에 발생하는 다양한 문제를 해결
- 응용분야 수요에 따른 문제 해결을 위한 유체-구조 연성해석의

## 자유도 확장

- 극단적인 대변형 문제에 적용하여 재난 해석, 방재에 활용이 가능