

jh240005

分子気体力学解析コードの GPU 実装と相分離現象シミュレーション

高田 滋 (京都大学大学院工学研究科)

概要

本課題では、相分離現象の分子気体力学計算を GPU 並列計算によって従来よりも大規模なレベルで実行した。具体的には van der Waals 流体中の液滴あるいは気泡を表す定常解の求解とその安定性解析を分子気体力学モデル方程式の数値計算により行った。準安定領域での液滴あるいは気泡の構造やその崩壊過程を詳しく議論することができた。Young-Laplace の式が微細な液滴あるいは気泡に対して成り立つかどうかの検討も行った。得られた成果は査読付き国際学術誌へも掲載された。また、グループで有する分子気体力学 IN-HOUSE コードの GPU 実装と性能評価を行った。具体的には、有限差分法ベースのコードに OpenACC での並列化を施した。CPU での計算よりも効率が向上する見込みが得られた。本課題へ取り組むことにより、今後の各種の分子気体力学計算のより効率的・大規模な実行へつなげる知見が得られた。

1. 共同研究に関する情報

ム化に取り組んだ。プログラムの性能を測定し、CPU システムの性能との比較を行った。

(1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名

大阪大学 D3 センター

(2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

(3) 参加研究者一覧と役割分担

本課題には代表者の他に、初鳥と博士課程学生の宮内・鷹橋の3名が参加している。宮内は相分離現象の分子気体力学計算のマルチ GPU プログラムの動作確認と性能改善、データ取得を担当した。結果の分析は、高田、宮内を主として全員で行った。初鳥と鷹橋は、適宜宮内の協力も得ながら、分子気体力学における他の種類の計算コードの GPU プログラ

2. 研究の目的と意義

ふつう、われわれの身の回りの気体の振舞いは流体力学によりよく記述できる。しかし、たとえばマイクロ・ナノデバイスや微細な空隙をもつ多孔質体内部などの微小系内の気体の振舞いは流体力学では正確に記述できない。これは、気体分子の平均自由行程と系の代表長さが同程度になり、気体の状態が局所平衡にごく近いという流体力学の暗黙の前提がやぶれるからである。この場合、気体の振舞いを正しく把握するには微視的な立場にたつ分子気体力学を用いる必要がある。

分子気体力学の支配方程式は気体分子の速度分布関数に対するボルツマン方程式である。時刻、位置に加え、分子速度の分だけ独立変数が増えること、分子間衝突の効果を

表す衝突項が複雑な形をしていることなどから、この方程式を解くには解法を問わず一般に大規模な計算が必要になる。

代表者らは、グループ内で蓄積してきた気体論方程式の数値解析技術を基盤に、近年の新たな数値計算法も取り入れながら、R3~R6年度の HPCI 課題に参加して大規模計算による研究成果を得てきた。従来の計算は Fortran の MPI 並列の IN-HOUSE コードを汎用 CPU 搭載のスパコンで実行して行ってきた。一方で、近年の GPU の倍精度演算性能とメモリ容量の増大や openACC(と CUDA-aware MPI)の整備等により、GPU 搭載のシステムの利用で当グループの計算の高速化が見込め、これまで不可能だった更なる計算規模の拡大ができると考えた。

上述の状況をふまえて、本課題の目的は次の2つである。1つ目は相分離計算を従来 CPU システムで実行していたよりも大規模なレベルで実行する。2つ目はグループの有する他の種類のプログラムのマルチ GPU 並列プログラムの実装と性能測定の実行である。

本研究課題の意義は2つある。第一に、計算速度に大きな向上が見込め、各種の分子気体力学計算をより大規模により有利に展開する見通しが立てられることである。第二に、今後主流となりうる GPU 搭載のシステムの性能を引き出し利用する経験をグループとして獲得、蓄積できる点である。

課題の学際性

本課題では、相分離現象に関する新たな本計算を行う。相分離の現象を直接追跡するのに要する時間は MD の時間スケールを超えることもあり、たとえば核生成プロセスに関する貴重な知見を提供している一方で MD によるアプローチは計算量の制約にも悩まされている。このような状況で、(MD よりも粗視化された立場の) 運動論方程式による解析が注目されてきている。エントロピー性の担保や本質を抽出した本運動論モデルによ

る解析の結果を報告できれば、分子気体力学の分野にとどまらないインパクトが期待できる。また、本課題では相分離のテーマを含め他の系統の計算コードのマルチ GPU プログラム実装と高速化を図っている。そこで得られる数値計算技術面の有用性は分子気体力学分野にとどまるものではない。例えば、ナノスケールの熱輸送におけるフォノン熱伝導やプラズマの輸送などの同じ構造の方程式(フォノンボルツマン方程式、ボルツマン-ブラソフ方程式)で記述される現象を扱う他分野への波及効果が期待できる。

3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

当研究グループにはマルチ GPU の環境がなく、専攻・研究科等で共同利用契約している資源もない。このため、大規模計算による本課題の研究を遂行するには外部の大型計算機の利用契約が必要だった。

上述の環境のために、当グループにはこれまで GPU コード開発の実績がほとんどなかったが、実施拠点による性能チューニングのサポートを受ける機会にも恵まれて、プログラム実装技術の蓄積につなげることができた。このことにより、今後マルチ GPU 環境を利用した継続的な研究展開が実施可能になった。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

該当なし

5. 今年度の研究成果の詳細

相分離現象の数値計算

相変化の有無にかかわらず、二相系はこれまで、物理学、化学物理学、数理物理学、工学といった観点から、熱流体力学的手法を用いて様々に研究されてきた。動的側面に関心がある場合、熱力学的な議論では Cahn-Hilliard 方程式 [1] やその派生版が広く用いられ、流体力学的な議論では二相流体のナビエ・ストークス方程式が用いられてきた。しかし、動的過程は必ずしも相平衡のもとで進行するとは限らない。この点が、近年、相平衡の制約を受けない微視的アプローチを用いた研究が進められる契機となっている。そのような研究においては、分子動力学 (MD) および運動論が代表的なアプローチである。

単相状態から二相状態への相変化の基本過程を理解するうえで、おそらく最も基礎的な設定は、無限に広がる流体中の単一液滴または気泡の問題であろう。このような設定は、少なくとも概念的には最も単純であるが、必ずしも十分に理解されているわけではない。例えば、文献にはいくつかの MD シミュレーションが見られるが、それらは通常、周期境界条件のもとで行われている。そのため、それらのシミュレーション結果から単一液滴（または気泡）の形成に関する結論を導く際には、他の液滴や気泡との相互作用が依然として存在しているかどうか、エネルギー保存系なのか等温系なのか、などを慎重に検討する必要がある。代表者らのこれまでの運動論的モデル方程式に基づく一次元シミュレーションも例外ではなく、単一液滴（または気泡）の形成に関する直接的な情報を提供するものではない。

このような背景のもと、Enskog-Vlasov 方程式に基づく単一気泡の数値シミュレーションの最近の報告がある。ただし、その主たる目的は、Enskog-Vlasov 方程式に対する確率粒子シミュレーション手法の開発にある。

本研究では、単一液滴または気泡の定常状態とその安定性に関する解析に焦点を当て、相変化の基本過程に対する理解を深めることを目的とする。本研究の解析の基盤となる運動論的モデルは、代表者らの過去のモデルを拡張する形で提案されたものであり、熱力学第二法則に対応する H 定理の成立および適切な輸送特性の再現性が確立されている。

本研究では具体的に以下のことを行った。まず、座標原点に対して等方的な単一液滴または気泡の定常解を、静止マクスウェル分布のもとで調べ、問題を半径方向密度場の問題に帰着させた。この簡約化された問題を低次元力学系として取り扱い、非線形力学系の分野でよく知られている位相空間ベクトル場、固定点、フローといった概念を用いて解析を行った。ここで得られた定常解は本課題の大規模数値計算で行った安定性解析の基本解の役割を担っている。特に、遠方の一様状態を特徴づけるパラメータの組が不安定領域または準安定領域のいずれに属するかどうかによって、フローが質的に変化することを明らかにした。また、単一液滴または気泡の構造についても議論した。運動論的モデルの直接数値シミュレーションを本課題の計算資源を用いて実行し、得られた定常解の不安定性を評価した。得られた成果は査読付き国際学術誌に掲載された [T. Miyauchi and S. Takata, Single droplet or bubble and its stability: Kinetic theory and dynamical system approaches, *Physical Review E* **110**, 025102 (2024)]. 本節の以下では、計算結果の一部を紹介する。

図 1 に本研究の運動論モデルの定常解として得られる液滴あるいは気泡の空間分布の一例を示す。これらに代表される解の安定性を本課題の計算資源を使用した運動論モデルの直接数値計算によって調べた。

図 2 には不安定な定常解が擾乱によって崩壊していく様子を示している。

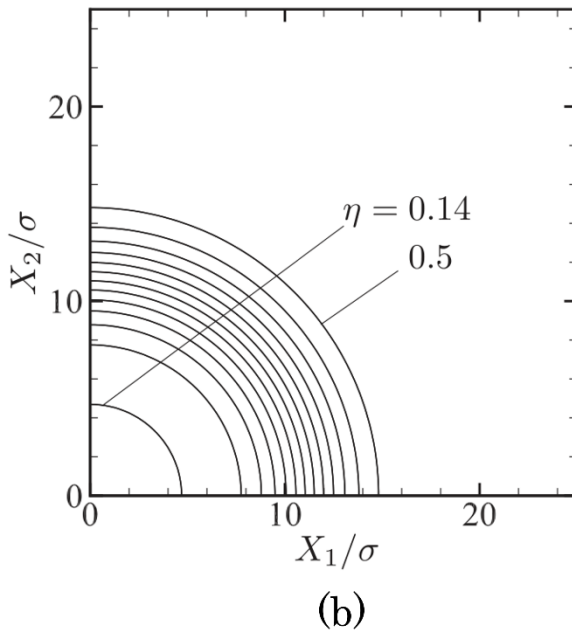
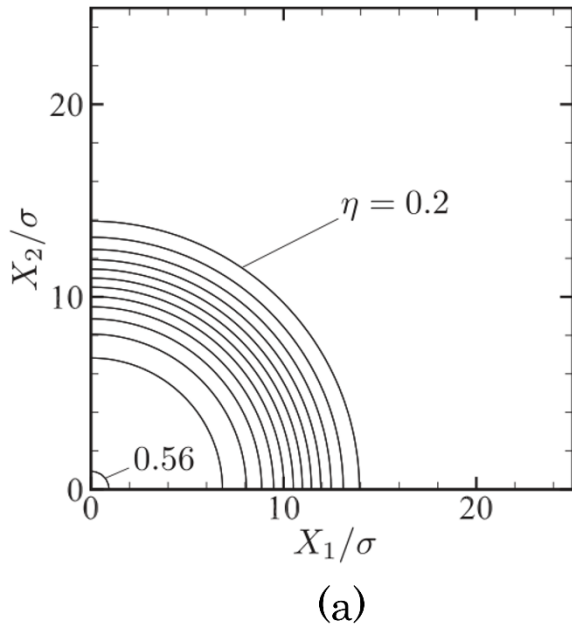


図 1 液滴と気泡を表す定常解の密度分布の一例. (a)液滴, (b)気泡. η は無次元密度. 位置は分子直径 σ で規格化している. 全体のうち右上の 1/4 領域を示している.

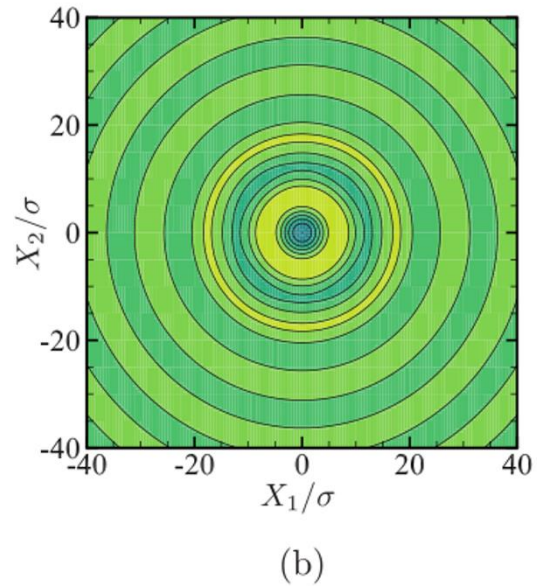
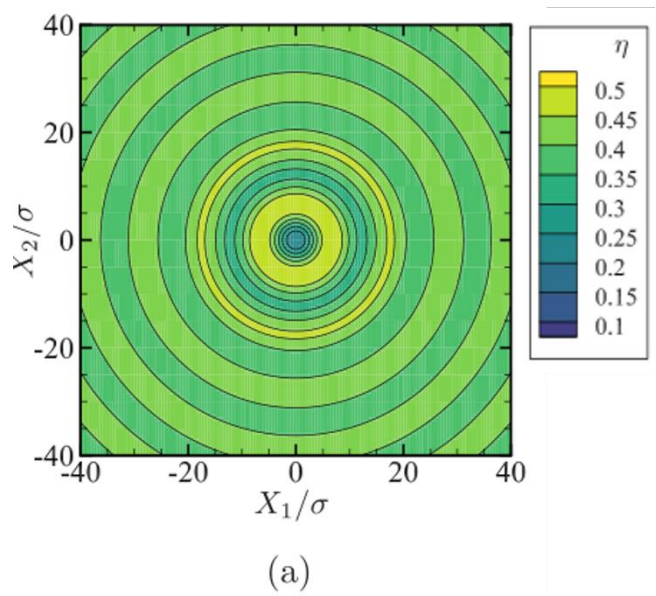
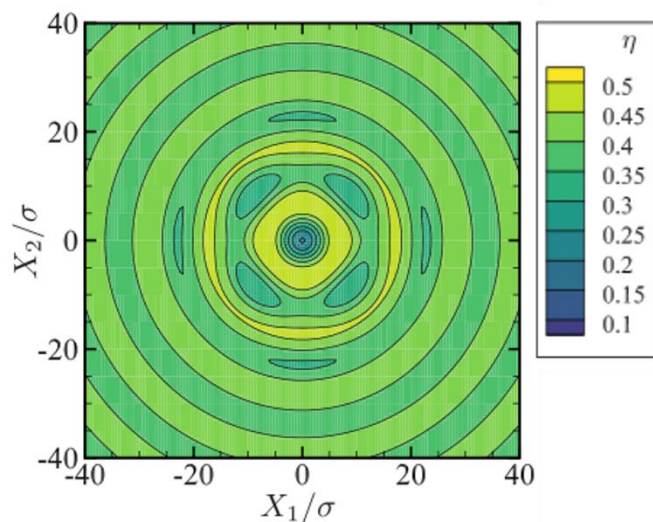
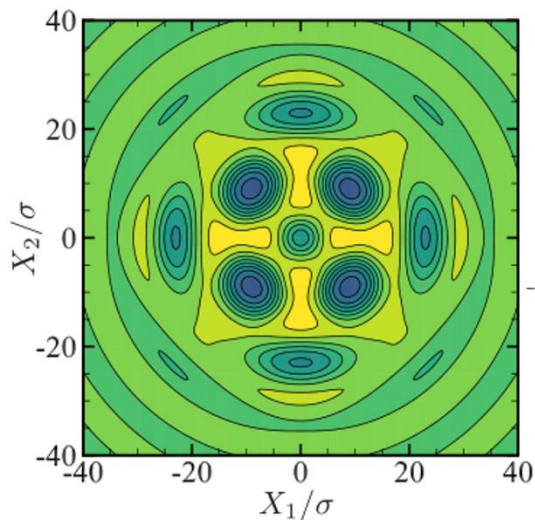


図 2 不安定解の密度分布の時間発展の一例. (a) $t/t_c = 0$, (b) $t/t_c = 100$. η は無次元密度. 位置は分子直径 σ で規格化している. (次ページに続きあり)

有限差分法コードの openACC 実装と評価



(c)



(d)

図 2 前頁からの続き. (c) $t/t_c = 150$, (d) $t/t_c = 200$.

グループで今後目標とする計算の多くが、(a)空間多次元の境界値問題として定式化される、(b)現象が非線形、(c)決定論的な精密計算が必要といった共通の特徴を持つ。そこで、本課題の開始に際し、目標の計算での GPU 移行に今後直接的に役立てられるよう、上記の特徴を備えた問題を選定した。

その結果、矩形の直管内の気体の圧力駆動流れの問題を考えるに至った。これまでの経過を以下で説明する。ボルツマン方程式と管壁上での拡散反射境界条件に基づき問題の定式化を行った。その解を衝突項計算と組み合わせた有限差分法で計算する。計算時間の大部分は分子の移流に対応する空間方向の差分計算と衝突項の積分計算が占める。

まずは、GPU コードの比較対象のための CPU プログラムコード (分子速度領域分割による flat-MPI) の構築を行い、その動作確認と性能測定を行った。SQUID の汎用 CPU ノード群で十分な性能が確保でき、GPU コードの性能評価のためのフェアな比較対象の準備が整った。

その後、openACC での並列 GPU プログラムを作成した。管内の流れをある 1 ケースで計算 (空間が約 1 万点、分子速度が約 4 万点で約 4 億自由度、2000 反復ステップ) したとき、SQUID の CPU2 ノード (144 コア) で約 3300 秒、openACC プログラムでは約 5100 秒で計算が実行できた。公開されている計算機使用料では GPU の 1 ノード (8 枚) が CPU の 6.1 ノードに相当することから、利用料で規格化してみると GPU の方がおよそ 1.6 倍ほど効率が良いことが示唆されていた。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

主であった相変化現象の計算については、計画どおり GPU 計算によるデータ収集と考察が本課題で可能となり、進捗は予定通りと考えている。他の計算の GPU 並列化の検討の方についても、openACC を利用して GPU 搭載の計算機で一定の計算が可能であることを確かめることができ、この点には満足している。一方で、cuda-aware MPI と組み合わせたマルチ GPU 並列化の検討については今後の課題であると考えている。