



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

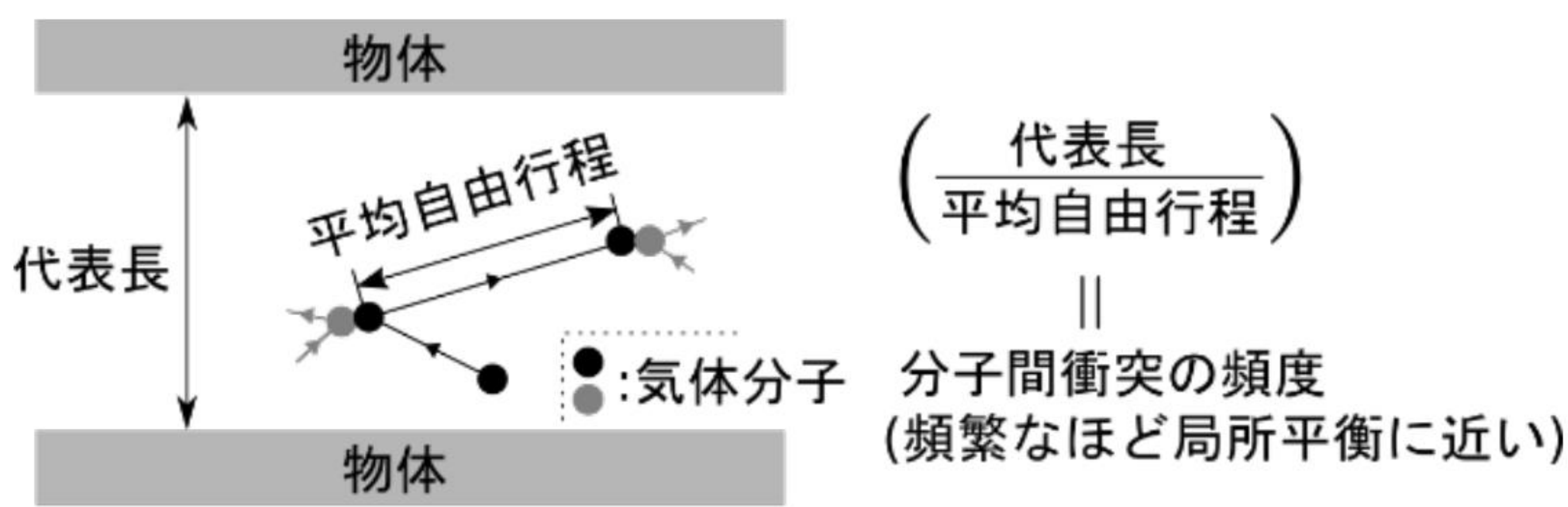
京都大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻

高田 滋, 初鳥 匡成, 宮内 拓夢, 鷹橋 碧音

jh240005 キーワード：流体工学・分子流体力学

背景

- 微小な系内の気体流
- 低圧気体の流れ
- 相変化を伴う流体現象



微小系における長さスケールの模式図

➤ 局所平衡仮定の破綻 → 微視的立場の分子気体力学
非平衡な気体中の現象

➤ ボルツマン方程式（気体論方程式）と大規模計算

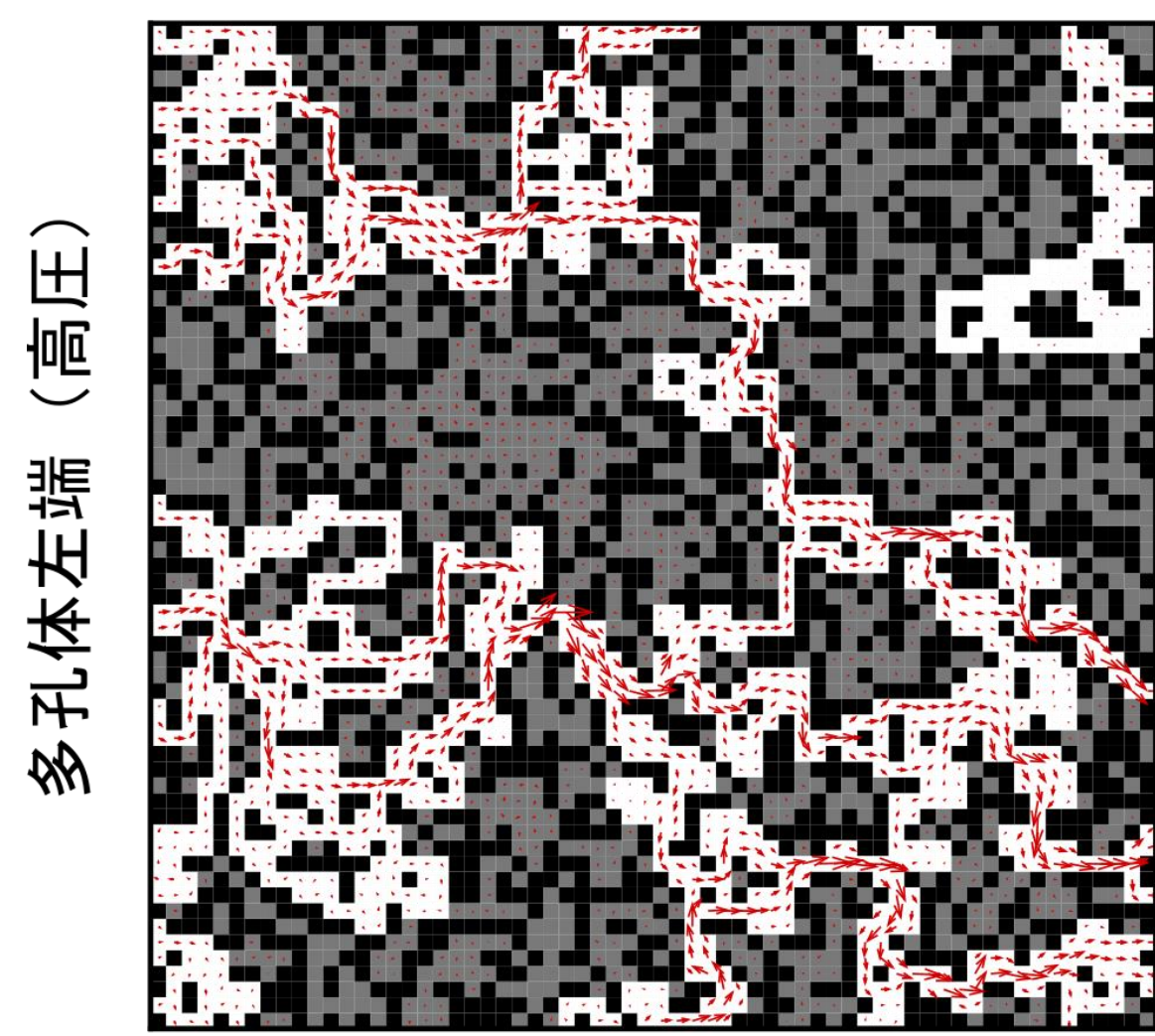
$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_i \frac{\partial f}{\partial X_i} = Q(f) \quad f(t, \mathbf{X}, \boldsymbol{\xi}) : \text{速度分布関数}$$

衝突項（複雑） 分子速度（多次元）

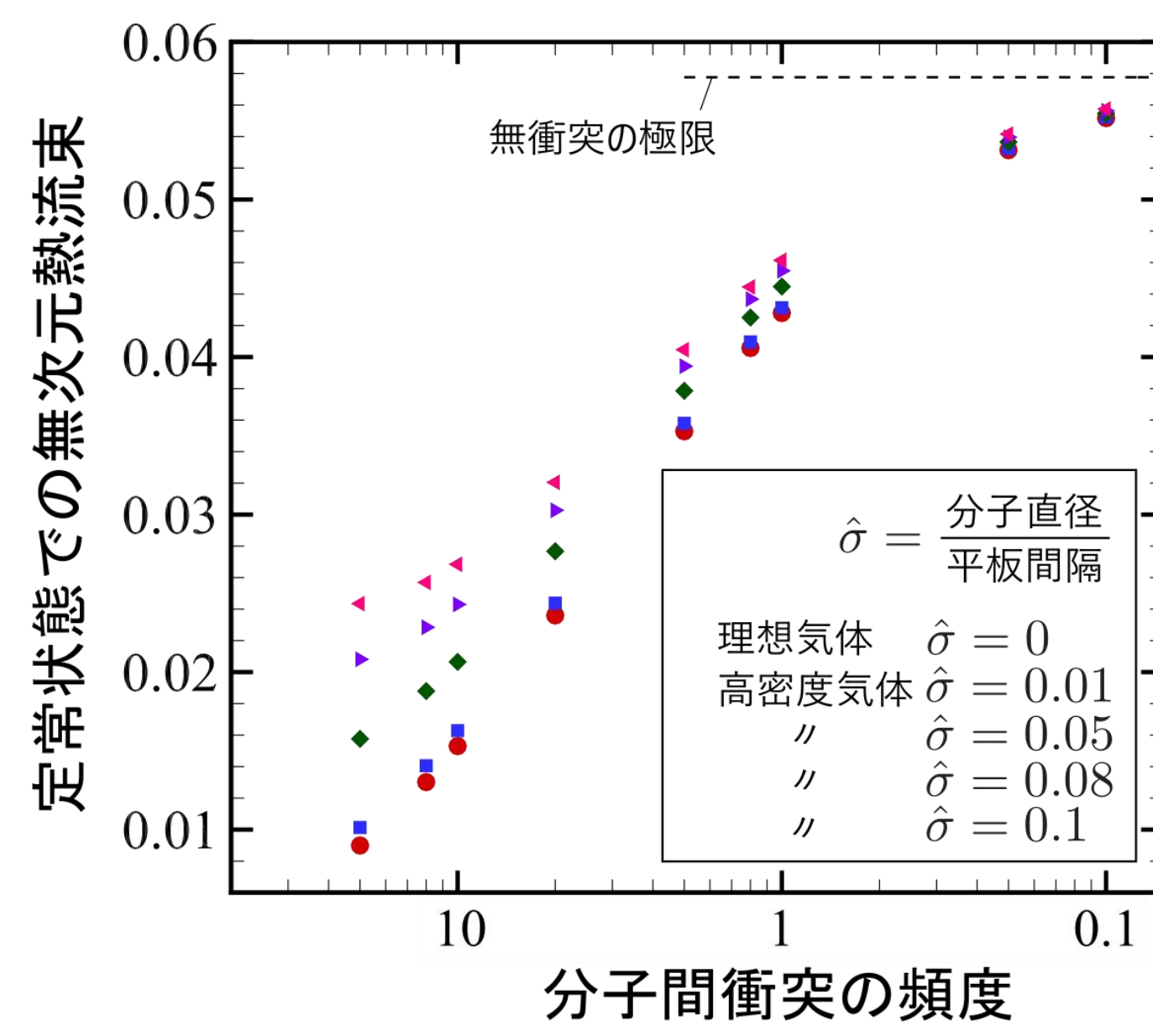
- ・ 近年の計算資源と対象の拡大
 - ・ 京大グループの研究蓄積 ・ 欧米等他グループの動向
- ⇒ 大規模計算による未解明の種々の基本問題への取組み

- R3~R6 HPCI課題に参加
- CPU機（東大Oakbridge-CX, ...）で実行
- GPUの演算性能・メモリ容量の増大

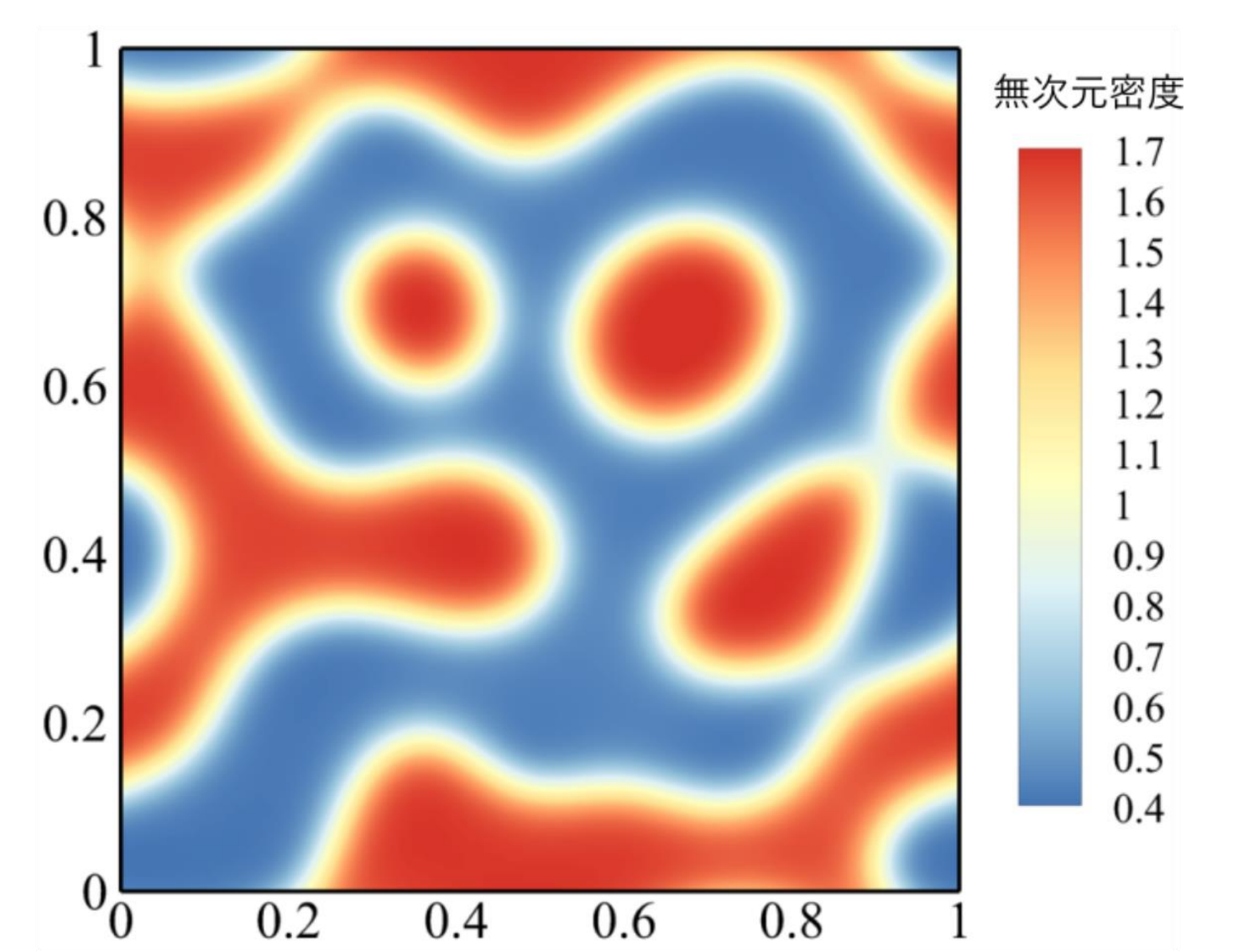
GPU機利用による
高速化・計算規模の拡大



(a) 多孔体内部の流れ場。
[セルは、白:空隙(主要路),
グレー:空隙(行き止まり), 黒:固相]
(hp230028, R5年度)



(b) 微小間隙を占める理想気体
および高密度気体に対する熱流束
(hp210007, R3年度)



(c) 相分離が進行している
最中の密度分布の一例
(hp220077, R4年度)

研究計画

大阪大学 サイバーメディアセンター SQUID GPUノード群を利用 [A100×8/node (640GB/node)]

◆ 速度向上が見込まれた相分離のテーマの計算

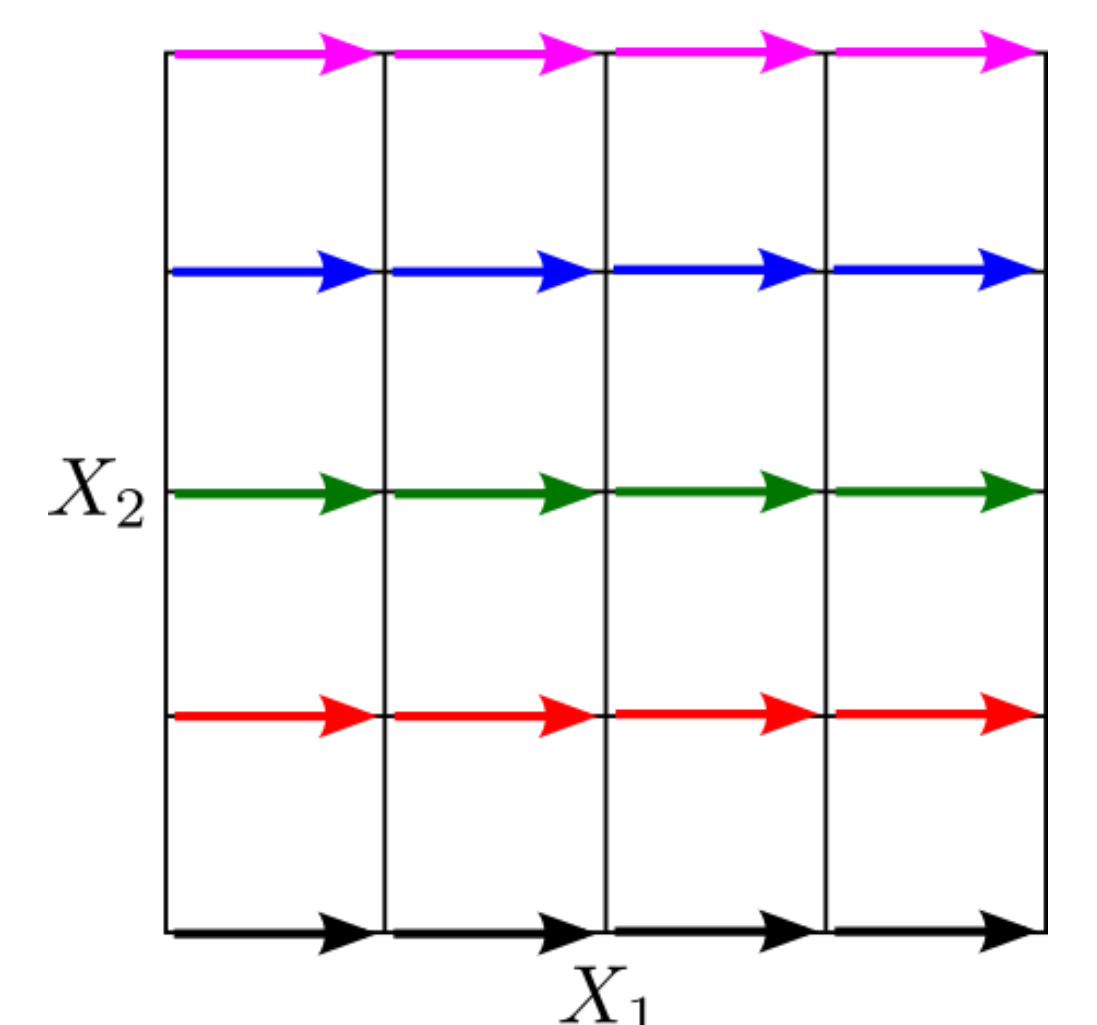
- ✓ マルチGPU並列プログラムの実装 (openACC + CUDA-aware MPI)
- ✓ 予備的計算によるCPU機との性能比較
6.7億(=201×201×129×129)点, 40万ステップ
209h @ CPU 4ノード (304コア) (利用料: CPU 6ノード ~ GPU 1ノード)
12h @ GPU 1ノード (8GPU)

- MPIでのプロセス分割の検討等による効率向上
- 従来よりも大規模な計算を実行

◆ 当グループの他の種類の計算法のマルチGPU並列プログラムの実装と性能測定

- 例：衝突積分計算と組み合わせた有限差分法
- ベンチマーク問題（空間多次元）での評価

Strang splittingのマーチング



有限差分法のマーチング

