参考文献

- 1) Walberg, G. D.: A survey of Aeroassisted Orbit Transfer, *J. Space & Rocket*, 22 (1985), pp. 3-18.
- 2) Bird, G. A.: *Molecular Gas Dynamics*, Clarendon Press, Oxford, 1976.
- 3) Borgnakke, C. and Larsen, P. S.: Statistical Collision Model for Monte Carlo Simulation of Polyatomic Gas Mixture, *J. Compu. Phys.*, 18 (1976) pp. 405-420.
- 4) Dogra, V. K., Bird, G. A. and Moss, J. N.: Nonequilibrium Thermal Radiation for an Aeroassist Flight Experiment Vehicle, AIAA-88-0081, 1988.
- 5) Bird, G. A.: Monte-Carlo Simulation in an Engineering Context, *Prog. Astro. Aero.*, 74 (1981), p. 239.
- 6) Hulbut, F. C.: Particle Surface Interaction in the Orbital Context, *Prog. Astro. Aero.*, 116 (1989), pp. 419-456.
- 7) Bartel, T. J.: Sensitivity of Energy Accommodation Modeling of Rarefied Flow Over Re-entry Vehicle Geometries Using DSMC, *Prog. Astro. Aero.*, 116 (1989), pp. 451-462.
- 8) Abe, T.: Rarefied Gas Flow Analysis by Direct Simulation Monte Carlo Method in Body-Fitted Coordinate System, *J. Compu. Phys.*, 83 (1989), pp. 424-432; Shimada, T. and Abe, T.: Applicability of the Direct Simulation Monte Carlo Method in a Body-fitted Coordinate System, *Prog. Astro. Aero.*, 118 (1989), pp. 258-270.
- 9) Jones, J. J.: AIAA-87-1508.
- 10) Abe, T., Kawaguchi, J., Uesugi, K. and Yen, C. W.: Aerobraking Strategies for the Sample of Comet Coma Return Mission, *Proc. of 17th ISTS*, at Tokyo, 1990.

—特 集—

モンテカルロ直接シミュレーション法に 関するいくつかの試み^{*1}

宇佐美 勝^{*2}・京 極 肇^{*3}
加 藤 征 三^{*2}

Key Words: Rarefied Gas Flow, Monte Carlo Direct Simulation, Parallel Processing, Heat Transfer, Neural Net

1. 緒 言

希薄気体数値解析としてのモンテカルロ直接シミュレーション法 (DSMC 法) は, Bird¹⁾ をはじめとする多くの研究者によってほぼ完成されてきた。今後は, この DSMC 法を, より実際の複雑な形状を持つ流れ場に如何にたやすく適用するかが重要となる。さらに, 連続流領域にまで拡張して適用できるかどうかを実用的な観点から明らかにすることも重要となろう。そのために, 例えば, 計算時間短縮のための並列計算, DSMC 法が本来持つ「時間と長さのスケールの微細性」に起因する諸問題, 任意の流れ場の分子移動ルーチンに関する自動プログラミング, 流れ場を最適な微小体積要素 (セル) に分割する方法, 等を解決しておく必要がある。本稿では, これらに関連して, ①二台のトランスピュータを用いた DSMC 法の並列計

算, ②分子運動の時間スケールに比べ非常に大きな時間スケールで温度変化する境界壁を含むシミュレーション, および, ③二次元空間のセル分割にニューラルネットを適用する方法, を検討したので報告する。

2. トランスピュータによる DSMC 法の 並列計算

DSMC 法は, 微小時間ステップ Δt ごとに, 分子移動と分子間衝突とを分離して計算していくものである。分子移動の計算は, 個々の分子が独立に物理空間を移動するので並列計算が可能であり, また分子間衝突の計算も, セルごとに独立であるので並列化できる。DSMC 法の専用並列計算機はすでに NASA 等で作製されているが²⁾, ここでは, 比較的安価で容易に並列計算機を実現できる INMOS 製のトランスピュータ T 800 を使用した。付属のデータシートによると, T 800 の 20 MHz 版は 10 MIPS, 1.5 MFLOPS, リンクスピード 20 Mbit/s の特性を持っている。なお, 1 台あたり 5 MB のメモリを付属させた。今回は, 流れ場空間を二つの領域に分けて各々 1 台のトラ

^{*1} 平成 2 年 4 月 3 日, 日本航空宇宙学会第 21 期年会講演会にて講演。平成 2 年 8 月 1 日原稿受理 Some Trials for the Monte Carlo Direct Simulation

^{*2} 三重大学工学部 Masaru USAMI and Seizo KATO

^{*3} ヤマハ発動機 (株) Hajime KYOGOKU

著者紹介

宇佐美 勝 (非会員)

昭和24年生。愛知県出身。昭和50年名古屋工業大学大学院修士課程修了。同年(株)新潟鉄工所に入社。昭和51年三重大学工学部助手。昭和62年同助教授。現在に至る。工学博士。希薄気体流のシミュレーションと実験的研究に従事。日本機械学会、情報処理学会会員。

京極 肇 (非会員)

昭和40年生。愛知県出身。平成2年三重大学大学院修士課程修了。同年ヤマハ発動機(株)に入社。現在、クオリティライフ事業本部GHP事業部技術部技術3課に所属。エアコン開発・製作に従事。日本機械学会会員。

加藤 征三 (非会員)

昭和18年生。愛知県出身。昭和47年名古屋大学大学院博士課程満了。同年名古屋大学工学部助手。昭和52年三重大学工学部助教授。昭和59年同教授。現在に至る。工学博士。プラズマ電離場からの粒子線、ホログラフィーによる温度場の解析等の研究に従事。日本機械学会等会員。

ンスピュータを割り当て、領域間を移動する分子については高速データ転送によりその分子情報を交換するという方法で並列計算を試みた。スリットを通過する希薄気体流³⁾と円柱フィンからの熱伝達(3章で記述)の2例を示す。これらは、すでに通常の計算でも結果を得ているものであり、今回の並列処理における計算条件はそれに準じて決定した。

第1図に示した流れ場は、二次元スリットを通過する希薄気体が、スリット内面の表面あらしにより、どの程度流量減少するかを計算するものである。並列化に際しては、第1図におけるA領域をメインランスポピュータに割り当て、B領域とC領域をサブトラ

ンスピュータに割り当てた。スリット幅の2倍を代表長さを選んでクヌッセン数 Kn を定義したとき、 $1/Kn=70$ (総分子数約85,000) においては、 Δt 時間あたり約60個の分子がA領域とB領域の間の境界を交差する。したがって、それら分子の情報(位置座標、速度成分)を Δt 時間ごとにトランスピュータ間でデータ交換しなければならない。このような条件下で、2台のトランスピュータで並列計算した場合と、1台で通常計算した場合との速度比較をしたところ、第2図(○)のような加速率を得た。第2図において、

第2図 並列計算による加速率

第1図 二次元スリット流の計算領域

第3図 領域境界の自動調整

初期加速率 1.75 の値が時間とともに改善されていくのは以下の理由による。最初はサブトランスペュータの受け持つ分子の数が一割程度多く、また、BとC領域における分子移動の計算がA領域に比べて多少複雑なために、サブトランスペュータの計算負荷が大きく、境界通過分子のデータ交換直前にメイントランスペュータが時間待ちさせられる。しかし、計算の進行とともにBとC領域内の分子数が減少し、計算負荷がしだいに近づいて加速率は改善されるものである。今回のような流れ場の場合、2台のトランスペュータに割り当てる領域の境界を計算の進行とともに自動調整して、2台をたえず最適の計算負荷で動作させることは可能である(第3図参照)。ただし、境界調整を行った場合には、境界付近のセルの所属が一方のトランスペュータから他の一方に変更されるので、その際のセル情報転送作業をプログラムに組み込んでおく必要がある。第2図(●)は、計算負荷の自動調整を行った結果であるが、計算の進行とともに、急速に加速率が改善され、最終的に1.95の値に達して、そのまま一定の加速率を維持する。なお、境界の自動調整は、計算速度の異なるトランスペュータ同士の並列処理においても有効で、各トランスペュータの待ち時間をゼロにするよう処理能力に応じた計算負荷を割り当てるので、むだのない並列動作が実現できる。第2図(Δ)は、20 MHzのT800と25 MHzのT800を並列で動作させたものであるが、1台のトランスペュータ(20 MHz)に比べて約2.05の加速率を達成している。

この計算における Δt 時間あたりの境界通過分子数(約60)は総分子数(約85,000)に比べて非常にわずかであるため、データ転送に要する時間はほとんど無視できる。しかし、境界を横切る分子数が多くなった場合には、それが負担となって並列計算の効果が現れない場合も考えられる。そこで、このプログラムのデータ転送部分だけを繰り返し計算させて、データ転送に要する時間を調べてみた。データシートでのリンクス

ピードは20 Mbit/sとなっているが、実際にパラレルFortran上で行ってみると、単精度実数配列の要素の転送は毎秒約12万個程度であることがわかった。例えば、二次元流れの場合、分子1個あたり5個のデータを転送するとして、2万4千個の分子の情報転送に約1秒必要となる。境界通過の分子数を把握し、これをできる限り小さくするための領域分割を行うことが並列演算による高速化には重要となろう。

今回は、2台だけの並列計算であって、この結果から、何十あるいは何百台と結合した場合の効果を安易に推測はできないが、並列化がDSMC法の高速化に有望な方法であることは間違いない。

3. 時間スケールの二重化(円柱フィンからの熱伝達)

DSMC法は、多数の気体分子の運動を、微小時間ごとに分子移動と分子間衝突に分けて計算していくものであるが、分子運動の時間スケール(平均衝突時間)に比べて極端に大きな時間スケールを有する現象を取り扱う場合に問題が生ずる。DSMC法は、基本的に非定常現象をシミュレーションするもので、定常現象の解析には、任意の初期状態から始めて、定常に達するまで計算を続けていく必要がある。いま、分子の平均衝突時間が例えばマイクロ秒であるとする、秒あるいは分の単位で変化する現象を解析するためには、膨大な計算量が必要となる。

以下に述べる円柱フィン(spine)からの熱伝達は、固体内熱伝導により円柱フィン根元(基底部)から先端方向へ流れる熱量が、気体の分子運動および熱放射によって円柱フィン表面から奪い去られることをシミュレーションするものである(第4図参照)。円柱フィン温度の時間的变化は、その熱容量に大きく関係するが、ここでは、秒～分のオーダーとなり、上記の問題が生ずることになる。もし、フィン温度変化の時間スケールと気体分子運動の時間スケールを実際のままで計算しようとする、フィン温度が定常に達するまでには膨大な計算時間が必要となり、現在最高速のベクトル計算機をもってしてもシミュレーションは不可能である。そこで本研究では、気体分子運動の時間スケールとフィン温度変化の時間スケールとを別々に考

第4図 円柱フィンからの熱伝達

え、「時間重み(時間スケールの比)」を介して両者を関係づけることでこれに対処した。すなわち、まず、円柱フィン温度を固定し、非常に短い時間の非定常シミュレーションによって気体がフィン表面から奪う熱量を算出する。次に、得られた熱量に数桁のオーダーの係数(これが「時間重み」に相当)を掛け合わせ、それを用いて、フィンの単位ブロックごとのエネルギーバランスから円柱フィン温度変化を算出する。これら二つの計算を繰り返し、最終的に円柱フィン温度の定常解を得るものである。この方法は、非定常現象を長時間にわたって追跡し厳密に収束させて定常現象の解を得るものではないので、時間的なフィン温度変化は厳密には正しいものではないが、定常状態の結果に関しては正確な値が得られるものとする。

シミュレーションの条件は、真空室内実験(第5図に実験装置を示す)と一致するように決定された。円柱フィンは、直径 $D=5\text{ mm}$ 、長さ $L=600\text{ mm}$ のアルミ製で、これと同軸の内径 70 mm の冷却筒で囲まれている。代表長さには、円柱フィンと冷却筒の半径差を用い、クヌッセン数 Kn は平均自由行程を代表長さで除したもので定義した。第6図に、 $1/Kn < 10$ における対象空間のセル分割の様子を示す(縦横の尺度は異なる)。この状態では、全空間に約14万個の分子(VHS分子モデル⁴⁾)が存在する。円柱フィン基底部の温度は $t_b=135^\circ\text{C}$ 、冷却筒温度は $t_w=15^\circ\text{C}$ 、円柱フィン基底部と冷却筒との間の円筒底面の温度は半径の対数関数として $15\sim 135^\circ\text{C}$ の間で一定に保った。気体分子の初期温度は 15°C とし、円柱フィン各部の初期温度としては、 15°C の場合、 135°C の場合、および $15\sim 135^\circ\text{C}$ で直線変化させた場合の3とおりを行い比較した。

希薄気体における熱伝達を考える場合、熱放射の効果を見捨てることはできない。そこでシミュレシ

ョンに先立って、十分低い圧力状態(気体分子運動によるエネルギー輸送が熱放射によるエネルギー輸送に比べて無視できる状態)で得られた実験結果から放射率を計算しておき、任意の円柱フィン温度に対する熱放射量はステファン・ボルツマンの法則に基づいて算出した。

シミュレーションは、まず、等間隔に分けられた円柱フィン各セクション(第7図参照)に一定数の分子衝突が生ずるまで、円柱フィン温度を固定して、気体分子移動と分子間衝突の計算を繰り返す。全てのセクションで一定数以上の分子衝突が生じた後、いまの分子運動に要した時間に上述の「時間重み」を掛ける。分子運動によるエネルギー輸送量にも同じ重みを掛け合わせ、これに、「重みを掛けた時間」の間に生じる熱放射量を加えて、円柱フィン各部からのエネルギー放出量とする。次に、円柱フィン各セクションに固体内熱伝導で出入りする熱量と内部に蓄えられる熱量(セクションの温度変化により生じる)が上記エネルギー放出量とつりあうものとして、円柱フィン各部の温度を算出する(円柱フィン温度は軸方向のみの関数であると仮定)。以上の一連の計算を、円柱フィン温度が定常

第7図 円柱フィン熱伝達のエネルギーのつりあい

第5図 希薄気体熱伝達の実験装置

第6図 熱伝達空間のセル分割

第8図 円柱フィン温度の時間変化 ($1/Kn=8.13$, フィン初期温度 135°C)

値に達し、十分な時間平均が得られるまで繰り返す。

第8図 ($1/Kn=10$) は、基底部から距離 x mm だけ離れた位置における円柱フィン温度が、時間経過とともに変化して定常温度に達する様子を示している。第8図は円柱フィン全体の初期温度を 135°C に設定したときのものである。DSMC 法のもつ統計的ばらつきのために、定常状態に達した後も円柱フィン上の温度分布は定常値の周りで変動するので、第8図において曲線の集合が帯状に現れている。円柱フィン初期温度を異なる状態に設定して行った計算からも同様の収束値が得られた（第9図参照）。第10図は、いくつかの異なる圧力状態 ($1/Kn=0.057\sim 33.0$) で得られた円柱フィン温度の定常値（定常状態に達した後の時間平均値）を描いたものである。圧力が上昇するにつれて円柱フィン温度が低下していく様子が示されている。なお、 $1/Kn=0$ と示された曲線は、放射熱伝達のみでの温度分布である。第10図には、実験により得られた円柱フィン先端の温度も直線で示してある。両者がよく一致していることから、このシミュレーションが有効であることがわかる。

なお、このシミュレーションについても、第11図に示したように円筒空間を左右二つの領域に分割し、2台のトランスペュータで並列計算を行った。この問題では、領域境界を通過する分子の情報転送だけでなく、境界壁面（円柱フィン）の温度変化を計算するための情報も交換する必要があるが、それにもかかわらず、加速率では 1.93 が得られた。両トランスペュー

第9図 円柱フィン温度の時間変化 ($1/Kn=8.13$, フィン初期温度 15°C)

第10図 円柱フィン温度の圧力による変化

第11図 並列計算のための領域分割

タが同程度の計算負荷で動き、待機に時間を費やすことがなければ、この程度の加速率は比較的容易に達成できるものと思われる。

4. ニューラルネットによる二次元流れ場のセル分割

DSMC 法では流れ場をセルと呼ばれる微小体積要素に区切り、その中で分子間衝突の計算を行う。理想的なセル構造の条件としては、(a) 空間移動後の分子がどのセルに属することになったか高速に算出できること、(b) いかなる形状の流れ場にも適用できること、(c) 流れの特性や平均自由行程によって各セルの大きさが変更できること、等が挙げられる。しかし、従来のセル分割法では複雑な形状の流れ場に対してこれらの条件を満たすのは困難である。以下は、セル分割法にニューラルネットの手法を適用し、その有効性を検討したものである。

ニューラルネットの中で、Hopfield モデルと呼ばれるネットワークは、通常の計算法では計算不可能な規模の組合せ最適化問題を近似的に高速に解くことが

できると考えられている⁵⁾。このモデルは、多入力1出力の非線形要素子（ニューロン）が、階層構造を造らずに相互に結合しているネットワークである。 i 番目のニューロンの内部状態 U_i は、他のニューロンの状態変数 V_j にシナプス荷重 W_{ij} を掛けたものの総和と自己バイアス I_i により式(1)で与えられる。

$$U_i = \sum_j W_{ij} V_j + I_i \quad (1)$$

これに対して、 i 番目のニューロンのとる状態 V_i は、

$$V_i = g(U_i) \quad (2)$$

となる。ここで $g(x)$ は、一般に、シグモイド型のアナログ的な非線形単調増加関数である。

このようなネットワークは、一つの初期状態から出発してニューロンの状態変化が繰り返されるうちに、ある安定な平衡状態に到達して動かなくなったり、いくつかの状態を巡るサイクルに落ち込んだりする。いま、ネットワークの状態を数値的に表現するためにエネルギー関数

$$E = -(1/2) \sum_i \sum_j W_{ij} V_i V_j - \sum_i I_i V_i \quad (3)$$

を導入する。もし、シナプス荷重が $W_{ij} = W_{ji}$ のように対称性をもち、また、各々のニューロンが非同期的にその状態を変化させるなら、ネットワークは、「エネルギー最小化の原理」に従って E を減少させる方向にニューロンの状態を変化させていく。そこで、シナプス荷重 W_{ij} と入力バイアス I_i を適切に設定すれば、最適化問題を解くことができる。しかし、式(3)のエネルギー関数は多数の極小値を持つので、一般に、この極小値が最適解への到達を妨げる。この局所解を逃れるために、式(2)における関数 $g(x)$ を、式(4)のようにとる方法がある。

$$g(x) = \{1 + \tanh(x/T)\}/2 \quad (4)$$

ここで、 T は、系の温度と呼ばれる。これを徐々に下げていくことによって、局所解を避けながら最適解に近づこうとするものである（シミュレーテッドアニーリング⁶⁾）。今回はさらに、式(1)の右辺に、平均ゼロ、標準偏差 $\sqrt{4.8/\pi} T$ のガウス分布に従うノイズ項 ε をつけ加えた。これも、局所解を避けるための手段である。

ニューラルネットを使って最適化問題を解くには、まず、解を表現できるようなネットワークを設定し、次に、このニューラルネットの解となる状態が最小となるような評価関数を求めなければならない。さらに、その評価関数を式(3)のエネルギー関数に対応させて W_{ij} , I_i を求める。

本研究では、流れ場を非常に小さな矩形の小セルに分割し、それらを組み合わせてサンプリングセル（大

セル）を構築するという方法をとった。小セルが矩形であるため、分子の所属する小セルの算出は高速に行えるし、小セルをうまく組み合わせて大セルを構築すれば、任意の流れ場に対して、自由な大きさの大セルを形づくることができる。いま、二次元に限定した流れ場のセル分割を、「小セルがどの大セルに属するか」という問題としてとらえると、これを第12図に示すようなニューラルネットで表現することができる。第12図において、小セルは、1~68の数字で示したもので、大セルは、A~Gの英字で示した太線で囲まれた部分である。例えば、いま、14番の小セルは、大セルAに属し、CあるいはDには属していないので、14とAとの結合を意味するニューロンだけが発火している。なお、計算機メモリの節約と高速化のために、可能性のほとんどない大セル-小セル結合のためのニューロンは省略している。第12図(b)に描いたニューロンが相互結合してニューラルネットを形成する。評価関数を決めるためのネットワークの制約条件

(a)

(b)

第12図 セル分割のニューラルネット表現

としては、次の三つを考えた。

- (1) 大セルの面積は許容範囲内で目的の面積になること
- (2) 小セルは必ず一つだけの大セルに属すること
- (3) 小セルはそれの属する大セルの重心まわりに集中して結合すること

これらの条件をもとに評価関数を求めると、例えば、以下ようになる。

$$\Phi = (A/2) \sum_i^{N_i} (\sum_j^{N_s} S_j V_{ij} - S_0)^2 + (B/2) \sum_i^{N_i} (\sum_j^{N_s} V_{ij} - 1)^2 + C_1 \sum_i^{N_i} \sum_j^{N_s} (D_{ij} - C_2 D_0) V_{ij} \quad (5)$$

ここで、 A 、 B 、 C_1 、 C_2 は定数、 N_i は大セルの数、 N_s は小セルの数、 S_j は小セルの面積、 D_{ij} は小セルと大セルとの間の距離マトリクス、 S_0 は目的とする大セルの面積、 D_0 は小セルが大セルの重心まわりに集中して結合するための基準距離である。式(5)の評価関数をエネルギー関数(式(3))を二次元に拡張したもの)に対応させてシナプス荷重 W_{ij} 、自己バイアス I_i を決定すると、式(6)、(7)が得られる。

$$W_{ij} = -A \delta_{ii'} S_j S_{j'} - B \delta_{ij'} \quad (6)$$

$$I_i = A S_0 S_i + B - C_1 (D_{ii} - C_2 D_0) \quad (7)$$

ここで、 $\delta_{ii'}$ は、 $i=i'$ のとき1、 $i \neq i'$ のとき0のクロネッカデルタである。

計算は、1台のトランスピュータにより、パラレル Fortran 言語を用いて行った。計算時間は、小セル約 50,000 個、大セル約 2,000 個で約 24 時間を要した。実行結果の一部を第 13 図～第 15 図に示す。比較的に単純な形状の流れ場に対しては良好な結果を得ることが

第 13 図 ニューラルネットによるセル分割例 (1)

第 14 図 ニューラルネットによるセル分割例 (2)

第 15 図 ニューラルネットによるセル分割例 (3)

できたが、複雑な流れ場では、大セル形状に、不自然な形の現れる場合があった。今後、評価関数の設定に改良を加える余地は十分あり、さらに多くの流れ場に適用することによってこれを完全なものにしていく必要がある。ただし、現段階においても、複雑な流れ場をあらかじめいくつかの比較的に単純な流れ場に分割した上でニューラルネットを用いることは有効であり、

計算時間的に見ても有利な方法である。

参考文献

- 1) Bird, G. A. : Molecular Gas Dynamics, Oxford University Press, London, 1976.
- 2) Wilmoth, R. G. : Adaptive Domain Decomposition for Monte Carlo Simulation on Parallel Processors, Book of Abstracts 17th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics, Vol. 2, 1990, pp. 562-564.
- 3) Usami, M., et al. : Monte Carlo Simulation on Mass Flow Reduction due to Roughness of a Slit Surface, AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, 116 (1989), pp. 283-297.
- 4) Bird, G. A. : Monte-Carlo Simulation in an Engineering Context, AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, 74, Part I (1981), pp. 239-255.
- 5) Hopfield, J. J. and Tank, D. W. : Neural Computation of Decisions in Optimization Problems, Biological Cybernetics, 52(1985), pp. 141-152.
- 6) Kirkpatrick, S., et al. : Optimization by Simulated Annealing, Science, 220(1983), pp. 671-680.