直接シミュレーションモンテカルロ法 の並列処理に関する研究*

太田 正 廣^{*1}, 谷 口 弘 芳^{*2}, 有 富 正 憲^{*3}

Parallel Processings for Direct Simulation Monte Carlo Method

Masahiro OTA, Hiroyoshi TANIGUCHI and Masanori ARITOMI

Parallel processing for the DSMC method (direct simulation Monte Carlo method) using a multiprocessor computer is discussed in this paper. Rarefied gas flows through a finite length circular tube, over a flat plate, and in a closed cavity were simulated by the DSMC method. The performance of parallel processing with a dynamic domain decomposition technique is evaluated in terms of parallel processing efficiencies and acceleration. An estimation method of parallel processing for evaluation of the DSMC method is proposed.

Key Words: Rarefied Gas Dynamics, Direct Simulation Monte Carlo Method, Parallel Processing, Domain Decomposition Technique

1. ま え が き

流体が分子から構成されていることを考慮することが必要な物理現象(希薄気体流れ)には、代表長さに比べて気体分子の平均自由行程が長い場合と、雰囲気は常圧で気体分子の平均自由行程は短い代表長さも短い場合の2種類がある。これらの関連する技術分野における有力な解析・設計手段は直接シミュレーションモンテカルロ法(以下、略してDSMC法)である^{(1)~(3)}。DSMC法では気体は連続体とはみなさず、ある確率法則にしたがって、気体を構成する各分子の位置と速度を時々刻々追跡することにより流れ場を決定する。DSMC法は気体分子が固体表面と衝突する割合に比べて気体分子同士の衝突する割合が無視しえない遷移流領域(中間流領域)をもその適用範囲とする。したがって、解析領域に存在する気体分子の数や解析領域を分割したセル数の増加につれ、また三次元流れの場合や解離・電離・化学反応を伴えば計算時間が増大する。

数値シミュレーション用のスーパーコンピュータは、現在のところパイプライン形ベクトル計算機が主流である。パイプライン形ベクトル計算機で現在問題になっているのは、最大性能と実行性能の差が大きいことである。この差が大きい原因は、ベクトル演算器の速度に見合ったデータ供給ができないためにベクトル演算器のパイプラインに空きができるからであるといわれている。現実には、ベクトル計算機の実行性能が低下したことも報告されている⁽⁴⁾。そこで、マルチプロセッサ方式の並列処理による数値シミュレーションの計算速度向上が注目されている。特に、ベクトル化率が低いといわれているDSMC法を実用問題に適用するには、計算コスト低減およびダウンサイジングのすう勢からしてもワークステーションクラスのコンピュータ環境下での並列処理技術の開発が望まれている。数値シミュレーション計算時間の短縮化には、単独でも超高速度を有するプロセッサの開発が最優先されるべきであり、かつ搭載されたコンピュータを安価に使用できることがまず第1に必要である。しかし、単独プロセッサコンピュータの計算速度向上が鈍化し始めた昨今、DSMC法においても計算時間の短縮化および大規模化のためのベクトル処理および並列処理を目指した計算アルゴリズムの改良と安価な専用並列コンピュ

* 原稿受付 平成6年7月20日。

^{*1} 正員, 東京都立大学工学部 (☎192-03 八王子市南大沢1-1)。

^{*2} 東京工業大学大学院 (☎152 東京都目黒区大岡山2-12-1)。

^{*3} 正員, 東京工業大学原子炉工学研究所。

ータの開発はぜひとも必要であろう。DSMC 法の並列処理に関する研究も行われ始めている^{(5)~(8)}。

数値シミュレーション用計算ソースプログラム中に存在するごく簡単な並列処理可能な DO ループ等は、自動コンパイラにより並列化されるであろう。一方、計算手法の特徴等からは、

- (1) アルゴリズム全体の並列処理法、
- (2) 計算領域の並列処理法、
- (3) 事象の並列処理法

等が考えられる⁽⁹⁾。そこで、著者らは計算時間の短縮化および大規模化のための DSMC 法並列処理技術の開発を目的として、領域分割型並列処理による DSMC 法を用いた基礎的な希薄気体定常流の数値解析を報告した⁽⁵⁾。アルゴリズム全体の並列化 DSMC 法は、非定常流解析にも絶大な威力を発揮する⁽⁶⁾。定常流に関しては、揺らぎの大きな定常解を基にしてマクロ的な物理量の揺らぎを減少させるために時間平均計算をする必要がある。そこで、計算の大規模化を念頭においてプロセッサ台数に対応して解析領域を分割し各プロセッサが並列に計算を進めていく領域分割法による並列処理を試みている。使用したコンピュータは、トランスピュータ群(プロセッサ台数: 現在, 最大 24 個)で構成され最大 88 MB のローカルメモリーを有するマルチプロセッサ型並列コンピュータである。

DSMC 法の実用問題に適用する場合の最大の問題点は計算時間の短縮化であるから、本報告では気体分子の円管通過確率および密閉空間内の希薄気体流れなどに DSMC 法並列処理を適用した場合の並列処理特性の変化を明らかにする。

2. DSMC 法並列処理

研究で使用した計算機を図 1 に示す。ホストマシンであるパーソナルコンピュータに、英国インモス社で開発されたトランスピュータを最大 24 台まで接続したマルチプロセッサ型並列計算機システムである。DSMC 法では気体は連続体とはみなさず、ある確率法則にしたがって気体を構成する各分子の位置と速度

図 1 トランスピュータを用いた並列計算機システム

を時々刻々追跡することにより流れ場を決定する。DSMC 法では気体分子の移動は分子ごとに、分子同士の衝突計算はセルごとに行われる。そこで、著者らはプロセッサ台数に応じて計算領域を分割し、各プロセッサの担当する分割領域内の計算分子総数を計測することにより、プロセッサ計算負荷の計測および計算時間短縮の予測法を 4 台のトランスピュータを用いた場合について、すでに報告した⁽⁵⁾。すなわち、各プロセッサの計算負荷を均一にするために、10 タイムステップごとに各プロセッサの担当する計算領域の境界を変更することを試みた。動的に境界を移動するアルゴリズムとして、

- (1) 計算開始時には、各プロセッサに最低 2 セル分の長さの領域を割り当てる
- (2) シミュレーション分子数の差が最大の境界を、その差を緩和する方向に移動させる
- (3) 1 回の境界移動で 1 本の部分境界が 1 セル分だけ右か左に移動する(ただし、巨視の流れが二次元流れの場合)

を著者らは提案した。DSMC 法では、1 タイムステップ間に 1 セルを飛び越える分子移動が発生しないように計算条件を設定している。著者らの領域分割型並列処理による DSMC 計算では、さらに安全をみて分割領域の最低長さを 2 セル分を確保しており、1 タイムステップで分割領域を飛び越える分子は限りなく零に近い。

2・1 数値解析結果 通信による効率低下を計測するために、長方形領域(縦 10 セル, 横 2 セル)をプロセッサ台数に応じて増加させ、熱的平衡状態の気体分子を同数配置し、DSMC 算を実行した場合、8 台のプロセッサでは並列化効率 E_p は約 93% である(動的割当は実行していないので、揺らぎの範囲の負荷変動はある)。これが、最高効率の目安とすることができると思われる。なお、並列化効率 E_p および加速率 S_p は 3 章に定義されている。

図 2 セル分割図(円管付近)

本報告にて使用したセル分割図を図2に示す。軸対称性を考慮したくさび形のセル構造で、気体分子は上流側(左)である流入境界より熱的平衡状態で流入し、有限長さ円管を通過し下流側(右)流出境界から流出してゆく。時間きざみ(タイムステップ) Δt を流入状態における平均自由時間の1/10にした場合、定常状態を得るのに約2000タイムステップ以上の計算を必要としている。また、定常時には約70000の分子が解析領域に存在する。以上の同一条件の問題に対して2~8台のパイプライン構造をもつ計算機により並列処理を行い、各プロセッサの計算分子総数 N の変化(計算負荷の変動)、加速率 S_p および並列化効率 E_p を計測した。

図3 DSMC法並列処理性能(固定割当型)

図3は6台のプロセッサを用い、分割領域を固定したいわゆる固定割当の場合(合計5台のプロセッサが、上流側より中心軸方向に6セル分のストリップを1台のプロセッサで担当し、残りのセルを最後のプロセッサが担当)の数値実験結果を示す。横軸はすべて、タイムステップ数 M で、縦軸は図3(a)は各プロセッサの計算分子総数、図3(b)は加速率、図3(c)は効率を示す。固定割当の場合、計算分子総数を正確に予測しないと負荷が不均一になり加速率は4.5にしかならない。一方、図4は分割領域境界の動的割当(ある計算時刻において、各プロセッサの計算負荷に応じて分割領域の境界を移動させる方法)を実行した場合の結果を示す。計算開始時は、合計5台のプロセッサが上流

図4 計算分子数の変化(動的割当型)

側より中心軸方向に2セル分のストリップを各プロセッサが担当し、最後のプロセッサが残りのセルを担当した場合である。計算開始時〔図4(a)〕は不均一であった負荷は、ステップ数が大きくなるにつれ、揺らぎの範囲内で均一化されているのが明らかである。図5は8台のプロセッサを用いて動的割当を実行させた場合で、横軸にプロセッサ台数 p をとり、縦軸におおの S_p および E_p を用いている。3000ステップまでの性能では、効率は約87%である。

同様な流れ問題において、図3～5に比べてプロセッサ台数を倍の16台における並列化性能について述べる。円管上流部と円管内部での各プロセッサが担当する部分領域を同じ幅だけとり、円管下流部では分子数が急激に少なくなっているので1台のプロセッサに担当させた(図6のセル分割中の太線が分割線, Decomposition A)。非定常計算を1500ステップ行い、続いて定常計算を1500ステップ(サンプリング回数は100回)に要する計算時間を計測した。一方、図7は同様な流れ問題であるが、計算分子の大部分は入口領域に存在している。入口部分から円管内部に流入する分子は流入境界から流入した分子のうち約2%であること⁽¹⁰⁾を考慮して16番めのプロセッサは、入口部分の軸方向2セル分と円管内部および下流領域を担当させた(図7のセル分割中の太線が分割線, Decomposition B)。

tion B)。図8に Decomposition A, B の並列化性能を示す。Decomposition A 法では、プロセッサ台数の増加により加速率 S_p は上昇しているが、8台を超えると加速率の上昇率は低くなる。効率 E_p はプロセッサの台数増加により低下している。部分領域分割法には

図6 セル分割図(円管付近, 固定割当型)

図7 セル分割図(円管付近, 動的割当型)
(定常計算1500タイムステップ終了時)

図5 DSMC 法並列処理性能(動的割当型)

図8 DSMC 法並列処理性能

動的割当法⁽⁵⁾を用いているが、計算終了時に各プロセッサが担当する計算分子数にばらつきがあり計算負荷が偏ったものと思われる。Decomposition Bによれば、16台における加速率および効率ともに大幅に向上している。このような上流側と下流側に大きな圧力比があるとき、シミュレーション分子の総数は定常値に達しているにもかかわらず領域分割は定常(最適分割に近い)に達していない場合もある。すなわち、動的割当法による予期した計算速度の向上が達成されていない場合があることに注意しなくてはならない。このような不都合を避けるために非定常計算を行う前段階で試行により均一な計算分子数を割り当てる領域分割を調べ、非定常計算段階から最適な領域分割に近い分割法を採用して計算を始めることが望ましい。また、本研究にて用いた動的割当法では、10 タイムステップごとに最大負荷領域を判別しその負荷を減少させる方向に1セル分だけ部分領域を移動させている⁽⁵⁾。この動的割当法の改良も必要であろう。

3. DSMC 法並列処理の性能予測法

比較のプロセッサ台数が少数の場合、並列化性能は
加速率： $S_p = t_1/t_p$, (理想値： p)

並列化効率： $E_p = S_p/p$, (理想値：1)

ただし、

t_1 : 1台のプロセッサによる計算時間

t_p : p 台のプロセッサによる計算時間

p : プロセッサ台数

t_p の理想値 t_{pth} を用いると

$$t_{pth} = t_1/p, \\ \therefore E_p = t_{pth}/t_p, \dots\dots\dots (1)$$

したがって、 $t_p \geq t_{pth}$ であり

$$t_p = t_{pth} + t_s + t_c + t_0, \dots\dots\dots (2)$$

ただし、

t_s : 同期待ちによるロスタイム

t_c : 通信によるロスタイム

t_0 : 並列処理用へのプログラム変更に伴う計算時間増加分

t_0 が他に比べて小さいので無視すると、 t_s, t_c を推定できれば t_p が得られ S_p, E_p も予測できる。

ただし、

$$1/E_p = 1 + t_s/t_{pth} + t_c/t_{pth}, \dots\dots\dots (3)$$

3.1 同期待ちによるロスタイム t_s DSMC 法における計算時間は取扱うシミュレーション分子数に比例すると考えられる。すなわち、各タイムステップごとに最大のシミュレーション分子数を割り当てられたプロセッサにより同期待ちが支配される。

$$t_{pth} \sim N_{pth} = N/p, \dots\dots\dots (4)$$

$$\therefore t_s/t_{pth} = (N_{pmax} - N_{pth})/N_{pth} \dots\dots\dots (5)$$

ただし、

N : 総シミュレーション分子数

N_{pth} : p 台のプロセッサに理想的に均等配分されたシミュレーション分子数

N_{pmax} : あるタイムステップにおいて、 p 台のプロセッサ中で実際に一つのプロセッサが担当する最大のシミュレーション分子数

流入・流出境界のない閉じた系を問題にする場合には、 N_{pth}, N は定数である。

3.2 通信によるロスタイム t_c 領域分割型並列処理による通信は、各タイムごとに領域分割を通過する分子情報を隣り合うプロセッサ同士が交換することにより生じる。ここで、

t_{m1} : 分子1個あたりの情報伝達に必要な通信時間

N_c : タイムステップあたり領域分割境界を通過する気体分子の数(双方向), 熱平衡状態を仮定

T_s : 計算タイムステップ数

とすると、各プロセッサ間の通信処理がプロセッサごとに順次シリアスに行われるとすれば、

$$t_c/t_{pth} = (p-1) \cdot t_{m1} \cdot N_c \cdot T_s/t_{pth}, \dots\dots\dots (6)$$

3.3 数値実験 そこで、本報告では四方を固体壁で囲まれた空間に一樣に分布した熱平衡状態にある気体分子の運動をシミュレーションする。すなわち、初期条件として解析空間に一樣かつランダムに気体分子を配置してその分子の熱速度による分子運動および分子間衝突をシミュレーションする。各セルの諸量は揺らぎの範囲でのみ変化し総分子数 N は一定である。セル数は960個、シミュレーション分子数は48000個とする。Knudsen数は0.1、タイムステップは平均自由時間の1/10で計算開始時の分子速度分布はMaxwell分布を仮定した。

$$Kn = \lambda/L = 0.1, \dots\dots\dots (7)$$

$$\Delta t = \tau/10, \dots\dots\dots (8)$$

$$\tau = \lambda/C, \dots\dots\dots (9)$$

$$C = (8RT/\pi)^{1/2}, \dots\dots\dots (10)$$

ただし、 λ は気体分子の平均自由行程、 L は代表長さである。計算時間を計測するとともに、式(5)における N_{pmax} をタイムステップごとに計測して同期待ちによる効率低下を予測する。

ここで、通信によるロスタイム t_c を検討する。二次元問題で1個の分子に必要な情報は、分子位置(x, y)、分子速度(V_x, V_y, V_z)およびその分子の属するセル番号の6変数である。単精度を用いているので1変数4バイトであるから、送信すべき情報量は分子1個あ

たり 24 バイトである。通信リンクの転送速度は実測によれば

$$t_{m1}=24/129\,600=1/54\,000, (\text{sec}) \quad \cdots \cdots (11)$$

巨視的な流速がないときの分子数束は

$$F=n \cdot [R \cdot T/(2\pi)]^{1/2}, \quad \cdots \cdots (12)$$

N_c を双方向で考えれば、式(7)～(9)および式(10)より

$$N_c=2 \cdot F \cdot \Delta t=(1/20)n \cdot \lambda=100 \text{ [個]}, \quad \cdots (13)$$

$$\therefore t_c/t_{pth}=(p-1)/540 \cdot T_s/t_{pth}, \quad \cdots \cdots (14)$$

次に同期待ちによるロスタイム T_s について検討する。DSMC 法において、揺らぎの割合は標本される分子数 M に対して $1/(M)^{1/2}$ に比例するといわれている。そこで、本流れ問題において各プロセッサにおけるその揺らぎ量である $(N_{p\max}-N_{pth})$ と N_{pth} の関係が揺らぎの割合を満足すると仮定する。数値実験結果によれば、

$$\therefore t_s/t_{pth}=(N_{p\max}-N_{pth})/N_{pth}, \sim 4/(N_{pth})^{1/2}, \quad \cdots \cdots (15)$$

式(3)、(14)および式(15)を仮定すれば、任意の p に対する並列性能を予測することができる。

上述の条件で 4 000 タイムステップまでの DSMC 計算を実行した際の並列化性能を図 9 に示す。図 9 の実線は式(15)を用いた。図 9 中の○および△は数値実験の計測結果である。 p が増加すると N_{pth} が少なくな

るので揺らぎが大きくなるが、数値実験結果とよく一致している。

式(3)から推測できるように、式(3)の右辺第 2 項および第 3 項は、それぞれ同期待ちと通信時間による並列化効率の低下の割合を表している。式(3)、(4)、(15)を用いた並列化効率と実際に計測した数値実験結果の比較を図 10 に示す。図 10 中の○は数値実験の計測結果、△は本研究における予測理論値、実線は理想値である。効率の予測値は数値実験結果をほぼ表している。

次に並列度の限界までプロセッサ台数が増加した場合 ($p=960$) について考察してみる。プロセッサ台数が 10^1 オーダの予測法を 10^2 オーダまで拡張するのには問題はあるが、予測結果を図 11, 12 に示す。図 11, 12 中のカッコ付きの番号は、それぞれ本論文における式番号を表す。 p の増加により飛躍的に t_c/t_{pth} が増加し、その結果、 S_p の値も $p=70$ 付近で最大値を示す。さらに p が増加すると S_p は減少してしまう。これは、式(14)で通信処理はシリアルに行われるものとして取扱ったことに原因がある。タイムステップごとの通信処理を順次シリアルに行えば、通信ステップ ($p-1$) が必要になる。そこで、プログラム変更により、例えば (1 番めプロセッサ) ↔ (2 番めプロセッサ), (3 番めプロセッサ) ↔ (4 番めプロセッサ), …,

図 9 プロセッサ台数による同期待ちおよび通信時間の変化

図 11 プロセッサ台数による同期待ちおよび通信時間の変化の予測

図 10 プロセッサ台数による並列化効率の変化

図 12 プロセッサ台数による加速率の予測

…、の通信をまず行い、次の通信を(2番めプロセッサ)←→(3番めプロセッサ)、(4番めプロセッサ)←→(5番めプロセッサ)、…、…、の通信を行えば、パイプライン型接続マルチプロセッサコンピュータでは、 p が増加しても原理的には2回の通信ステップですむことになる。したがって、式(6)は

$$\therefore t_c/t_{pth} = 2 \cdot t_{m1} \cdot N_c \cdot T_s/t_{pth},$$

$$(p \geq 3), \dots\dots\dots (16)$$

と改めることができる。図11, 12中に、式(6)を用いた場合を(6)、式(16)を用いた場合を(16)で示す。 p が飛躍的に増加した場合でも、領域分割型並列処理によるDSMC計算によって計算の高速化を図ることが可能になる。ただし、以上述べた推測法は、式(1)から与えられるパイプライン型領域分割DSMC法並列処理の並列度を無視して推定しているので、概念的である。しかし、大規模な問題(例えば、 N や p_{max} が大きな問題)を扱う場合や格子型のプロセッサ配置などへ発展させる際の基本概念となりうるであろう。

4. あ と が き

気体分子の円管通過確率、密閉空間内の希薄気体流れ解析などにマルチプロセッサ型並列計算機を用いたDSMC法並列処理を適用した場合の並列処理性能の変化に関する本研究により以下の結論が得られた：

8台および16台のトランスピュータから成る並列計算機システムを用いた場合、領域分割型並列処理法に動的割当法を適用すれば、0～3000タイムステップのDSMC計算では約87%の並列化効率を得られた。しかし、(1)シミュレーション分子数の差が最大

の境界を、その差を緩和する方向に移動させる、(2)1回の境界移動で1本の部分境界が1セル分だけ右か左に移動する(10タイムステップごとに)などから成る本研究における動的割当法は、最初の部分境界は流れ状態を十分考慮して決定しなければ、高効率を得られない場合もある。数多くの仮定をしなければならぬが、本研究によるDSMC法並列処理の性能予測法は実測値と比較的よく一致した。

並列処理型DSMC法は、解くべき希薄気体流れ問題の種類、タイムステップ数や部分領域分割法などによりその並列処理性能は変化する。今後、数多くのDSMC法並列処理性能についての報告がなされるべきである。大規模希薄気体流れ問題への適用や動的割当法の改良も必要であろう。

本研究を遂行するには数多くの方々にご助言をいただいた。特に、(株)コンカレントシステムズ 中井泰明社長、当時、東京都立大学大学院生の田中哲也君に感謝申し上げる。

文 献

- (1) Bird, G. A., *Molecular Gas Dynamics*, (1976), 118, Clarendon Press, Oxford.
- (2) Koura, K., *Phys. Fluids*, **29**-11(1986), 3509.
- (3) Nanbu, K., *Proc. 15th Int. Symp. Rarefied Gas Dyn.*, **1**(1986), 369.
- (4) 三好, 第8回航空技術研究所特別資料, SP-1(1990), 1.
- (5) 太田・田中, 機論, **57**-540, B(1991), 2696.
- (6) 太田・田中, 航空技術研究所特別資料, SP-14(1991), 39.
- (7) Long, L. N., *AIAA J.*, **29**-2(1991), 200.
- (8) Dagum, L., *Comput. Syst. Eng.*, **3**-1~4(1992), 301.
- (9) 福井, 情報処理, **28**-11(1986), 3509.
- (10) 太田・谷口・有富, 機論, **94**-0748.