JAIST Repository
https://dspace.jaist.ac.jp/

Title	実数型格子ガス法による三次元数値シミュレーションに関する研究
Author(s)	今村，太郎
Citation	
Issue Date	2002-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	author
URL	http://hdl.handle.net/10119/1572
Rights	
Description	Supervisor:松澤 照男，情報科学研究科，修士

JAIST
JAPAN
ADVANCED INSTITUTE OF
SCIENCE AND TECHNOLOGY

Japan Advanced Institute of Science and Technology

修 士 論 文

実数型格子ガス法による
三次元数値シミュレーションに関する研究

北陸先端科学技術大学院大学
情報科学研究科情報システム学専攻

今村 太郎

2002 年 3 月

修 士 論 文

実数型格子ガス法による
三次元数値シミュレーションに関する研究

指導教官　松澤照男 教授

審査委員主査　松澤照男 教授
審査委員　敷田幹文 助教授
審査委員　堀口進 教授

北陸先端科学技術大学院大学
情報科学研究科情報システム学専攻

010010 今村 太郎

提出年月: 2002 年 2 月

Copyright © 2002 by Imamura Taro

概 要

本稿では、格子ガス法を拡張した手法のひとつである実数型格子ガス法を用いた三次元モデルを構築し、シミュレーションを行った。二次元モデルから三次元モデルへと拡張するにあたり、境界条件や粒子の初期速度や衝突過程における回転角などを構築した。計算対象にはクエット流れとキャビティ流れを用いた。

クエット流れの結果から、周期境界条件が正しく機能していることを示した。また、格子点数や粒子数密度を上げることにより精度が向上することを示した。

キャビティ流れでは、ベクトル線図や流線図から、中心部やや上方に渦が発生していることを確認することができた。また、中心部の速度分布図から格子点数を増やすことで定量的にも満足するであろうことを示した。

また、計算実行時間の短縮のために、実数型格子ガス法に適した並列化手法を考えた。本稿では、この並列化手法として、粒子を各 PE で均等に割り振る粒子分割法を採用した。粒子分割法を用いることで通信しなければならないデータは、粒子の衝突過程計算に必要な格子点毎の平均速度と回転角である。回転角は乱数の種を同一にすることで全格子点の回転角を通信しなくとも乱数の種のみを通信することで通信データ量を減らした。したがって通信しなければならないデータは格子点毎の平均速度である。この平均速度を通信する方法として本稿で検討した手法は次の通りである。

- 系全体を全 PE 間で通信
- 格子点毎に通信が必要な PE 間でのみ通信
- 計算領域を 64 ブロックに分割し、ブロック毎に通信が必要な PE 間でのみ通信
- 計算領域を 8 ブロックに分割し、ブロック毎に通信が必要な PE 間でのみ通信

これらの手法を分散メモリ型並列計算機である CRAY T3E に実装し、実行時間、計算時間、通信時間を比較した。その結果、系全体を全 PE で通信する手法がもっとも実行時間を短縮できることがわかった。また、この手法では格子点数が増えるほど、また粒子数密度が大きくなるほど、速度向上比を向上させることができることを示した。

目 次

第 1 章　はじめに **1**

第 2 章　格子ガス法 **3**
2.1　HPP モデル 3
2.2　FHP モデル 4
2.3　粗視化 5

第 3 章　実数型格子ガス法 **7**
3.1　並進過程 7
3.2　衝突過程 9
3.3　平衡状態 11
3.4　境界条件 12
3.4.1　滑りなし境界条件 12
3.4.2　周期境界条件 12
3.4.3　温度を持つ壁の境界条件 13
3.5　衝突境界の判別 15
3.6　境界衝突後の粒子位置 15
3.7　実数位置の適用 16
3.8　粗視化 16
3.9　格子点の配置 17
3.10　粒子に与える初期条件 18
3.11　計算の流れ 18
3.12　物理量 18

第 4 章　実験 **22**
4.1　3 次元クエット流れ 22
4.2　3 次元キャビティ流れ 29
4.3　考察 34

第 5 章　並列化 **35**
5.1　並列化手法の検討 35

5.2 粒子分割法 35
5.3 回転角 36
5.4 並列化効果 36
5.5 格子点単位での通信 42
5.6 ブロック毎での通信 45
5.7 ブロック数の変更 46
5.8 考察 50
5.9 並列プログラムによる計算 51

第 6 章 結言 **54**
6.1 まとめ 54
6.2 課題 55

第1章　はじめに

従来からの流体現象を解明する手段として、差分法や有限要素法がある。これらは、実在の流れをまず定式化、すなわち、微分方程式などの数式で表示することが必要である。問題を簡単にするために様々な近似解法を用いることで支配方程式が作られ、これを適切な数値解法によって代数方程式に置き換え、コンピュータ上で計算させることで、現象を解明する。したがって、流れを表す、数式モデルが非常に重要な意味を持つ。

格子ガス法は、流れ場を規則的な格子で区切り、仮想的な粒子を運動させ、それらの運動を追跡することによって、系全体の流れ場を解明する手法である。このため、系を表す支配方程式は必要なく、流れ場を粒子に直接作用する境界条件や衝突則を決めることで解明する。つまり、流体現象をマクロな立場から数値的に解析する手法とは異なり、ミクロなレベルから流れ場を解析する非圧縮性流れの解析手法である。

この手法は、空間と速度を離散化するため、粒子の速度方向の制限、同一格子上には同じ速度を持つ粒子は存在しない、という排他原理が生じる。そのため、粒子の衝突ルールに特別な配慮をする必要があり、また、3 次元においては格子の対称性のため、複雑な格子を用いる必要がある等の問題点がある。

実数型格子ガス法は 1997 年に A.Malevanets 氏によって提唱された非圧縮性流れの解析手法 (文献 [1]) である。この手法は、従来の格子ガス法とは異なり、粒子の速度を実数値で持つ。これにより、従来の方法で必要であった排他則が必要なくなるため、粒子数を制限なく持つことができる。また、温度を粒子の速度として与えることができ、熱流動を伴う流れ場において、従来の解析手法では必要であったエネルギー方程式がこの手法では必要としない。つまり、熱流動を伴う計算を行う場合でも特別な配慮を必要としない。

また、衝突過程は同一格子点上に存在する全ての粒子の運動量を、その重心の回りで回転させるという単一な操作で記述される。また、等方性が成り立つために、二次元において、計算対象に用いられる格子には正方格子を用いる。これらは、三次元計算に適した計算方法であると考えられる。

この手法は格子点上にいくつかある仮想的な粒子 1 つ 1 つに関して計算を行うため、計算領域が大きくなることや粒子密度が大きくなるに従い、計算時間が大きくなっていく。したがって、三次元計算へと拡張した場合、計算時間の増加が大きな問題となる。しかし、粒子の移動や衝突は、系で一斉に計算ができるため、この手法は原理的に並列計算に適していると考えられ、並列化による計算時間の短縮が行えると考えることができる。

しかし、この手法による 3 次元における具体的な並列計算を扱った研究はまだなされていない。そこで、本稿では、実数型格子ガス法による三次元モデルの開発から、実数型格

子ガス法に適した並列アルゴリズムを考え、それらを用いて、数値シミュレートと、その考察を行う。

第2章　格子ガス法

格子ガス法の計算法について簡単に説明する。

計算で取り扱う変数が 0 と 1 の Bool 変数であるというのが大きな特徴である。このことは、コンピュータのビット演算を用いれば、数 bit で 1 格子点の状態を記述できる。つまり、実数を扱う数値計算法に比べ、この点については記憶容量を小さくとれるし、計算の効率化を図ることもできる。また、極めて並列化に向いており、実際にハードウェアで計算を行う LGA チップも製作された。そのうえ、計算に伴う丸め誤差および打ち切り誤差も計算の過程では生じないなど、大きな利点がある。

しかし、当然予想されたように、計算値は時間、空間的にばらつき (ノイズ) が極めて大きく、このままでは、巨視的に見てどのような流れになっているかわからない。そこで、粗視化 (平均化) を行う必要があり、そのために非常に多くの格子点を取らねばならず、全体として多くの記憶容量を必要とする。したがって、計算時間もそれほど短縮することができないし、平均化を行うので、結果の誤差評価は難しくなる。

これらは、これまでの流体の数値計算法にない特色を持っており、一見極めて初歩的なモデルのように思われる。しかし、このモデルにより計算される連続体としての流体の持つ保存則や、等方性といった性質は、粒子の衝突則や格子の形状に依存している。これらを正確に決めなければ流体の計算にはならないのであって、これらの関係を明らかにする十分な論理的基礎と、応用に関して広い一般性を持った計算法である。

2.1　HPP モデル

格子オートマトンを流体の数値計算に応用するにあたり、最初に考えられたモデルは、Hardy,Pomeau,Pazzis らによって提唱された HPP モデルである。このモデルは、二次元空間を正方形の格子で細かく区切り、その格子点を粒子が動き回るが、この運動を追跡することにより、流体の運動をシミュレートしようと考える。

この粒子は、流体を構成する分子ではなく、この数値計算手法に都合のいいように考えられた、全くの仮想的なモデル粒子である。ここで、導入された粒子はすべて同じ質量をもつ質点として取り扱われる。格子幅も単位長さとし、時間も離散的に整数であるものとする。そして、格子ガス法に特有の排他律を適用する。この排他律は、1 つの格子点上で粒子は、上下左右の 4 方向の速度を持つことができるが、ある方向の速度粒子は 2 つ以上あってはならないというものである。この排他律は Bool 演算を用いるために便宜上導入したものであって、物理的な意味は全くない。

具体的な粒子の運動は、気体の分子運動と同じく、衝突と移動を繰り返す。その際、衝突は格子点のみで生ずるとする。また、衝突は図に示すような、2 つの粒子の正面衝突のみを考える (2 つの粒子の衝突は、2 体衝突と呼ばれる)。衝突後の粒子はそれぞれ、それまで粒子のなかった方向へ跳ね返る。衝突と跳ね返りは瞬間的に起こり、次に粒子の移動により次のステップには粒子は常に格子点上にあり、隣の格子点に移った粒子はそこで衝突をするならば衝突をし、しないならば、そのまま次の時間ステップでその次の格子点に移動する。

この粒子の衝突において、質量と運動量が保存されるのは明らかである。また、各粒子の速度の 2 乗の半分を運動エネルギーとすると、運動エネルギーも保存されることがわかる。しかし、運動エネルギーの保存則は、他の 2 つの保存則と独立でなく、何ら意味を持たない。また、このモデルの大きな欠点は、Navier-Stokes 方程式を導く際に必要となる 4 階のテンソルが等方的にはならないということである。したがって、このモデルでは、流体の正しい運動を再現することは不可能である。

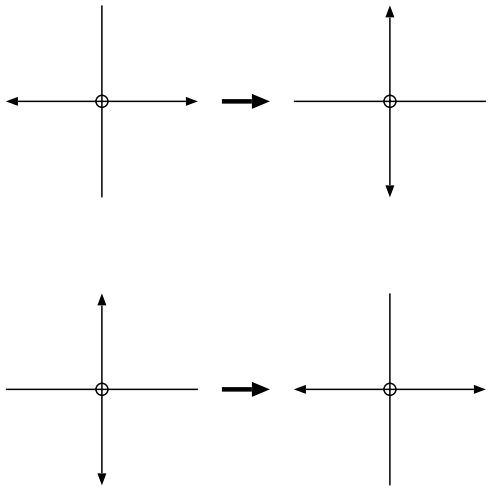

図 2.1: HPP モデル

2.2 FHP モデル

HPP モデルの 4 階のテンソルに関する問題点を解決するモデルとして、Frish,Haslacher,Pomeau らが提唱したのが、正六角形状の格子を用いて空間を離散化するモデルで、FHP モデルと呼ばれる。この手法は、二次元空間を図のように、単位長さ 1 の辺を持つ正六角形で離散化する。この格子線に沿って、単位質量の粒子がもっとも近接した格子点へ単位長さ 1 で移動する。時間は整数値を取り、各時間で、すべての粒子は格子点上に存在するとする。つまり、格子線の途中に粒子が存在するようなことはない。これらの性質は HPP モデルと同様である。

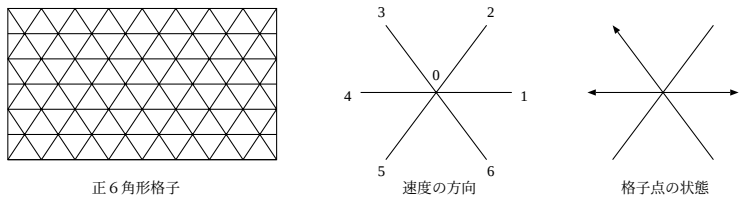

図 2.2: FHP モデル

2.3 粗視化

密度や流速といった連続体としての変数は、多数の格子点を含む有限領域での粒子の平均化として表せる。

今、格子点 r_* を含む有限領域において、i 方向の速度を持つ粒子の数の平均値 N_i を考え、

$$N_i(t_*, r_*) =< n_i(t_*, r_*) >$$

とかくと、この領域では粒子数および運動量の平均値はそれぞれ、

$$\rho(t_*, r_*) = \Sigma_i N_i(t_*, r_*)$$
$$j(t_*, r_*) = \Sigma_i c_i(t_*, r_*)$$

と表される。

また、この領域での流速は粒子の平均速度として次式で定義される。

$$u(t_*, r_*) = \frac{j(t_*, r_*)}{\rho(t_*, r_*)}$$

以上の手順から、Bool 変数で記述される各格子点の微視的状態から、連続体としての巨視的変数である密度と流速 (図の例では (u,v)) を求めることができる。なお、平均の操作としては、ある格子点上での時間についての平均操作でも良いし、空間および時間平均を組み合わせたものでも良い。

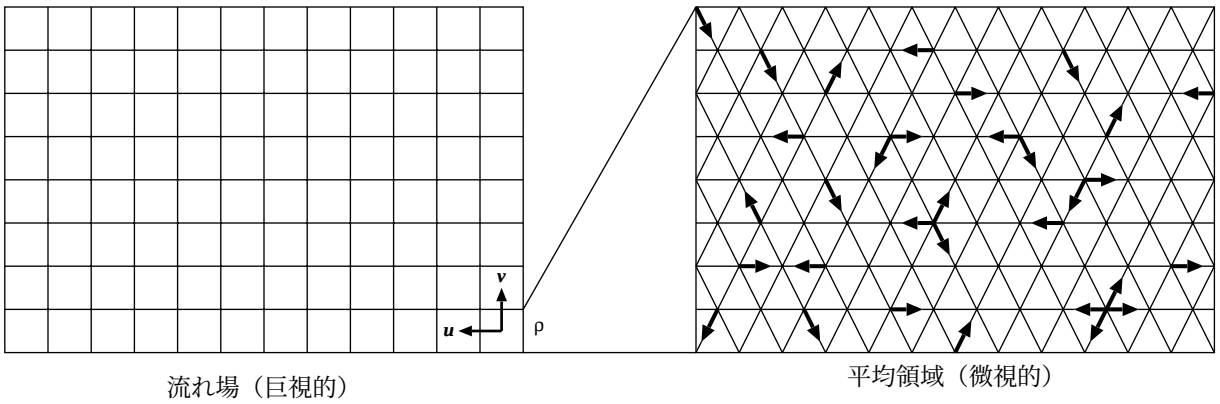

図 2.3: 粗視化

第3章　実数型格子ガス法

実数型格子ガス法は、従来の格子ガス法と同様に、粒子の並進と衝突を繰り返すことにより計算が進行する。粒子の衝突と並進は、それぞれ乱数を用いて確率的に計算が行われる。

また、対象となる気体は、理想気体を仮定している。

3.1　並進過程

粒子が格子から格子へ移動する過程である。1ステップ毎に粒子はその粒子が持つ速度分だけ移動する。衝突は格子上で行われるため、実数座標を整数座標に変換して、格子上に移動する必要がある。

整数座標 $\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_D)$ (D は次元数) に存在する粒子が速度 $\boldsymbol{v} = (v_1, \cdots, v_D)$ を持つとき、速度成分 v_i を整数部分 $[v_i]$ と 小数部分 $\{v_i\}$ に分離する。

$$v_i = [v_i] + \{v_i\}$$

移動後の座標 $\boldsymbol{x}' = (x'_1, \cdots, x'_D)$ の成分は、$[0, 1)$ の一様乱数 ξ_i を用いて

$$x'_i = \begin{cases} x_i + [v_i] & (\xi > \{v_i\}) \\ x_i + [v_i] + 1 & (\xi < \{v_i\}) \end{cases}$$

と表すことが出来る。

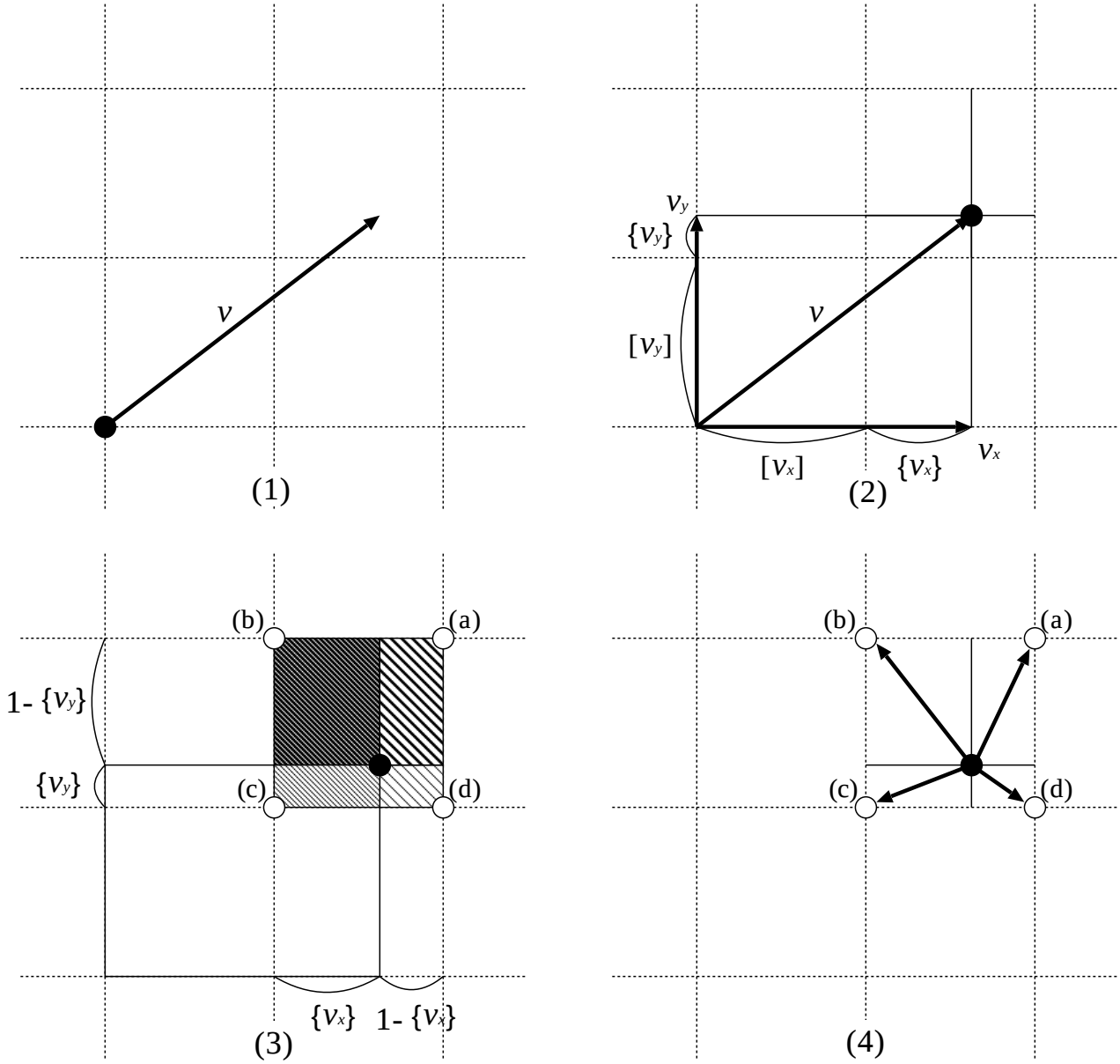

図 3.1: 並進過程の計算順序

1. 速度 **v** を持つ粒子がある場合を考える。
2. **v** の各成分を整数部分と小数部分に分ける。
3. 各格子点に移動する確率を計算する。2 次元の場合は、格子点へ移動する確率は、対角成分の面積で表される。
4. 3 で求めた確率に従って、粒子は a,b,c,d のいづれかの格子点に移動する。

3.2 衝突過程

同一格子上にある粒子同士が衝突を行い、運動量と運動エネルギーを交換する過程である。衝突過程において、運動量と運動エネルギーは保存される。衝突過程は、運動量の重心を中心として、各粒子への速度とのベクトルとの差をとり、その差をランダムな回転角で回転させることにより表現される。$\boldsymbol{v}_i$ と $\boldsymbol{v'}_i$ を衝突前と衝突後の衝突粒子の速度、$\boldsymbol{V}$ は同一格子点上の粒子の平均速度とする。ランダムな回転行列 $\boldsymbol{\sigma}$ は格子ごとに異なる。

$$\boldsymbol{v'}_i = \boldsymbol{V} + \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{V}) \tag{3.1}$$

3 次元における回転は、3 軸に関する回転で表現する。x、y、z 軸に関する回転を表す行列 $\boldsymbol{R_x}$、$\boldsymbol{R_y}$、$\boldsymbol{R_z}$ は、

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{R_x} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & cos\theta \end{pmatrix} \\
\boldsymbol{R_y} &= \begin{pmatrix} \cos\phi & 0 & -\sin\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\phi & 0 & cos\phi \end{pmatrix} \\
\boldsymbol{R_z} &= \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

であるので、$\boldsymbol{\sigma}$ は

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{R_x} \cdot \boldsymbol{R_y} \cdot \boldsymbol{R_z} \\
&= \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
R_{11} &= \cos\phi\cos\varphi \\
R_{12} &= \cos\theta(\sin\phi\cos\varphi + \sin\varphi) \\
R_{13} &= \sin\theta(\sin\phi\cos\varphi - \sin\varphi) \\
R_{21} &= \cos\phi\sin\varphi \\
R_{22} &= \cos\theta(\sin\phi\sin\varphi - \cos\varphi) \\
R_{23} &= \sin\theta(\sin\phi\sin\varphi + \cos\varphi) \\
R_{31} &= \sin\phi \\
R_{32} &= \cos\theta\cos\phi \\
R_{33} &= \sin\theta\cos\phi
\end{aligned}$$

である。

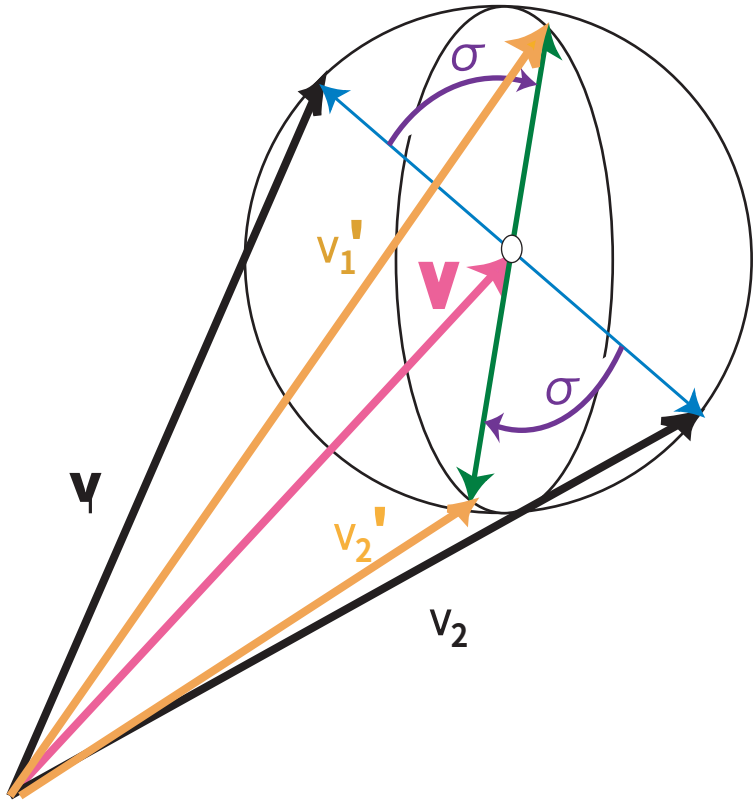

図 3.2: 衝突過程

例として、この回転角を用いて 2 つの粒子間の衝突を行う過程は、

(1) 衝突を起こす粒子の速度 $v1, v2$ から平均速度 V を求める。

(2) 平均速度と各粒子自身の速度との差を差分ベクトル dv_1, dv_2 とする。

(3) 求めた差分ベクトルを回転角 σ で dv_1', dv_2' に回転させる

(4) 回転後の差分ベクトル dv_1', dv_2' と平均速度 V を加えることで、衝突後の粒子の速度 v_1', v_2' が求められる。

となる。

また、この衝突過程において、また、運動量保存則が成り立つことは、平均速度が不変であることから自明である。また、今、2 つの粒子が衝突した場合、衝突前後の速度を、それぞれ、$\boldsymbol{v_1}$、$\boldsymbol{v_1'}$、$\boldsymbol{v_2}$、$\boldsymbol{v_2'}$ とすると、衝突前後の運動エネルギーは、

$$\boldsymbol{v_1}^2 + \boldsymbol{v_2}^2 \quad = \quad 2|\boldsymbol{V}|^2 + 2\boldsymbol{V}\cdot(\boldsymbol{v_1} - \boldsymbol{V}) + |\boldsymbol{v_1} - \boldsymbol{V}|^2$$

$$
\begin{aligned}
& + 2\boldsymbol{V}\cdot(\boldsymbol{v_2}-\boldsymbol{V}) + |\boldsymbol{v_2}-\boldsymbol{V}|^2 && (3.2)\\
\boldsymbol{v_1'}^2 + \boldsymbol{v_2'}^2 &= 2|\boldsymbol{V}|^2 + 2\boldsymbol{V}\cdot\sigma(\boldsymbol{v_1'}-\boldsymbol{V}) + |\sigma(\boldsymbol{v_1'}-\boldsymbol{V})|^2 \\
& + 2\boldsymbol{V}\cdot\sigma(\boldsymbol{v_2'}-\boldsymbol{V}) + |\sigma(\boldsymbol{v_2'}-\boldsymbol{V})|^2 && (3.3)
\end{aligned}
$$

となる。式 (3.2)、式 (3.3) の第 3 項、第 5 項は、回転により長さが変わらないので

$$
\begin{aligned}
|\boldsymbol{v_1}-\boldsymbol{V}|^2 &= |\sigma(\boldsymbol{v_1'}-\boldsymbol{V})|^2 \\
|\boldsymbol{v_2}-\boldsymbol{V}|^2 &= |\sigma(\boldsymbol{v_2'}-\boldsymbol{V})|^2
\end{aligned}
$$

である。また、第 2 項、第 4 項は

$$
\begin{aligned}
2\boldsymbol{V}\cdot(\boldsymbol{v_1}+\boldsymbol{v_2}-\boldsymbol{V}) &= 0 \\
2\boldsymbol{V}\cdot\sigma(\boldsymbol{v_1}+\boldsymbol{v_2}-\boldsymbol{V}) &= 0
\end{aligned}
$$

となるので、式 (3.2)、式 (3.3) は等しい。したがって、運動エネルギー保存則が成り立つ。

3.3 平衡状態

実数型格子ガス法では、平衡状態において粒子の速度分布は、Maxwell-Boltzmann 分布

$$
\begin{aligned}
& \left(\frac{1}{2\pi T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{x^2+y^2+z^2}{2T}\right) dxdydz \\
&= \frac{1}{2\pi T\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{x^2+y^2+z^2}{2T}\right) dxdydz && (3.4)
\end{aligned}
$$

に従う。ここで、

$$
\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2T}\right) = \sqrt{2\pi T} \tag{3.5}
$$

であることを考慮し、

$$
g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{x^2}{2T}\right) \tag{3.6}
$$

同様に

$$
\begin{aligned}
h(y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{y^2}{2T}\right) && (3.7)\\
i(z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{z^2}{2T}\right) && (3.8)
\end{aligned}
$$

とすれば、

$$
g(x)\cdot h(y)\cdot i(z) dxdydz \tag{3.9}
$$

となる。したがって、粒子の速度は、次のように与えてやれば良い。

$$u = \sqrt{-2T\ln R_1}\cos(2\pi R_2) \tag{3.10}$$

$$v = \sqrt{-2T\ln R_3}\cos(2\pi R_4) \tag{3.11}$$

$$w = \sqrt{-2T\ln R_5}\cos(2\pi R_6) \tag{3.12}$$

ここで $R_1 \sim R_6$ は [0,1) の一様乱数である。

3.4 境界条件

格子ガス法において境界条件の与え方は、流れ場の性格を決める重要な要素である。今回の計算においては、球界条件を以下のように与える。

3.4.1 滑りなし境界条件

滑りなし境界条件とは、流体と壁面との間に摩擦があり、壁面における流速の垂直方向成分と水平方向成分がともに 0 になる境界条件である。したがって、

$$(v_x, v_y, v_z) \to (-v_x, -v_y, -v_z) \tag{3.13}$$

とすることで、この境界条件を満たすことができる。

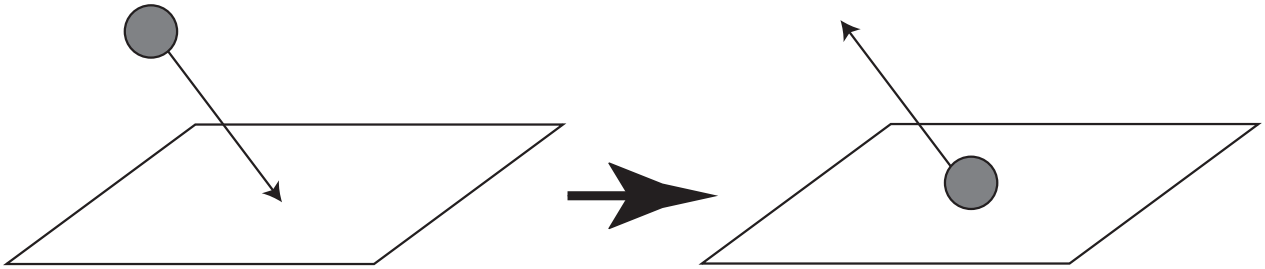

図 3.3: 滑りなし境界に当たった場合の粒子の挙動

3.4.2 周期境界条件

周期境界条件は、境界の外に飛び出した粒子が、その境界に相対した境界から入ってくることで表すことができる。この境界により、その境界方向に無限の広がりを持つ計算空間を作成することができる。

計算空間の境界方向の大きさを L とすると、

$$x = \begin{cases} x + L & (x < 0) \\ x - L & (x > L) \\ x & \text{else} \end{cases}$$

とすることにより、周期境界条件を表すことができる。

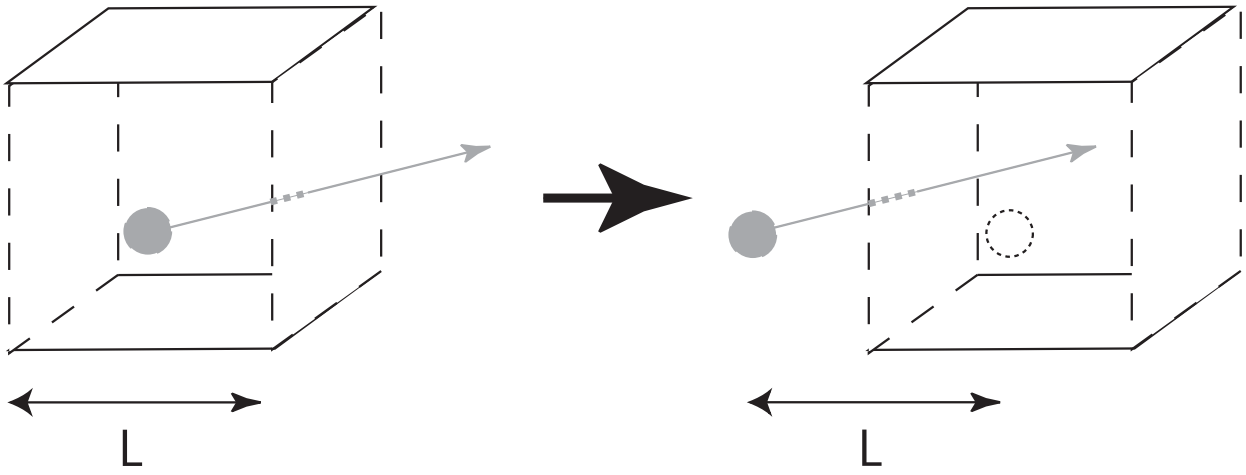

図 3.4: 周期境界に当たった場合の粒子の挙動

3.4.3 温度を持つ壁の境界条件

温度を持つ境界条件として、今回の計算では、分子動力学における壁面への衝突と同様の手法、つまり、cosine 法則に従う速度分布を粒子に与える。

表面に入射した気体分子が完全に表面温度の平衡状態になった後に表面から散乱される分子群の速度分布は、表面温度 T_0 の平衡状態にある気体が孔から流出する分子群のそれと同様に与えられる。分子群の速度分布関数がマクスウェル分布で与えられるとき、速さ $c \sim c + dc$ で移動する分子の単位体積当りの個数は、数密度を n とすると、$nf_c(c)dc$ となる。今、面積 dA の孔から、dA の法線から θ の角度を有する立体角 $d\Omega$ の方向に dt 時間内に流出する分子数を考える。速さ $c \sim c + dc$ で $d\Omega$ の方向に流出する分子の個数は、図 3.5 中の傾いた円柱内（体積 $dAcdt\cos\theta$）に存在するこれらの分子が $d\Omega$ 方向に $d\Omega/4\pi$ の確率で流出すると考えれば、$n(dAcdt\cos\theta)(d\Omega/4\pi)f_c(c)dc$ で与えられる。したがって、単位面積、単位時間当りの $d\Omega$ 方向に流出する速さ c∼c+dc の分子数は $nc\cos\theta(d\Omega/4\pi)f_c(c)dc$ となる。これを $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi, \int_0^\infty cf_c(c)dc = \bar{c'}$ であることを考慮して積分すれば、単位時間当りに単位面積から流出する分子数は $n\bar{c'}/4$ となる。したがって $n\bar{c'}/4$ で規格化した孔から流出する分子群、すなわち固体表面から散乱する分子群の速度分布関数は次のよう

になる。

$$f_0(c)dc = \frac{2}{\pi}\left(\frac{1}{2T}\right)^2 c^3 \exp\left(-\frac{1}{2T}c^2\right)\cos\theta d\Omega dc \tag{3.14}$$

この速度分布を満たすような反射速度 (u, v, w) は、[0,1) の一様乱数 R_7、R_8、R_9 を用いて、

$$u = \sqrt{-2T\ln R_7}\cos(2\pi R_8) \tag{3.15}$$

$$v = \sqrt{-2T\ln R_7}\sin(2\pi R_8) \tag{3.16}$$

$$w = \sqrt{-2T\ln R_9} \tag{3.17}$$

と表すことができる。

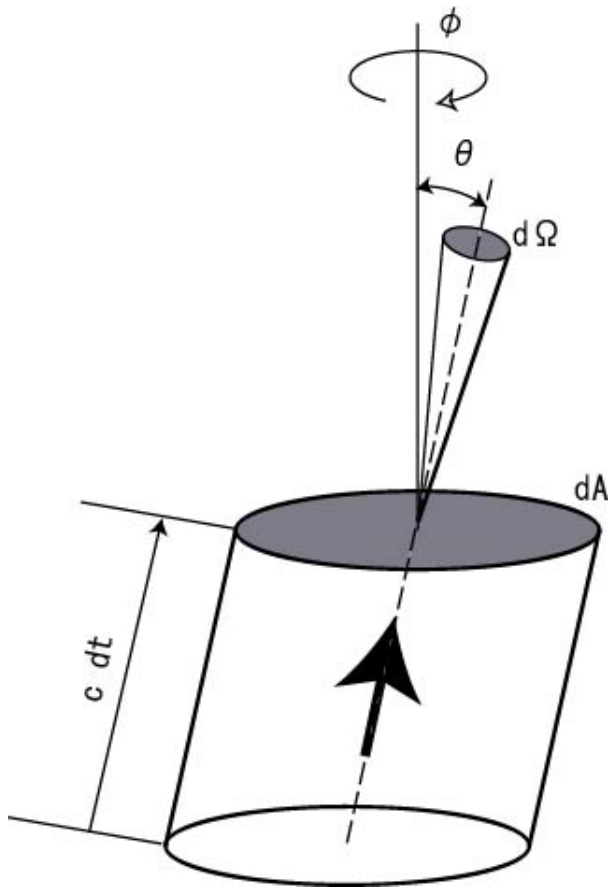

図 3.5: コサイン散乱

3.5 衝突境界の判別

並進過程において、粒子をその位置成分に速度成分を加えることで移動させているが、この際、境界との衝突があるか判定しなければならない。これは移動後の実数位置の x,y,z 座標が計算領域内にあるかどうかで判定する。この際、2 つ、または、3 つの成分が計算領域外にある場合は、先に衝突する境界を探さなければならない。これは、粒子の速度成分の傾きと粒子の移動前の座標と計算領域の頂点を結ぶ直線の傾きを比較することで決定する。

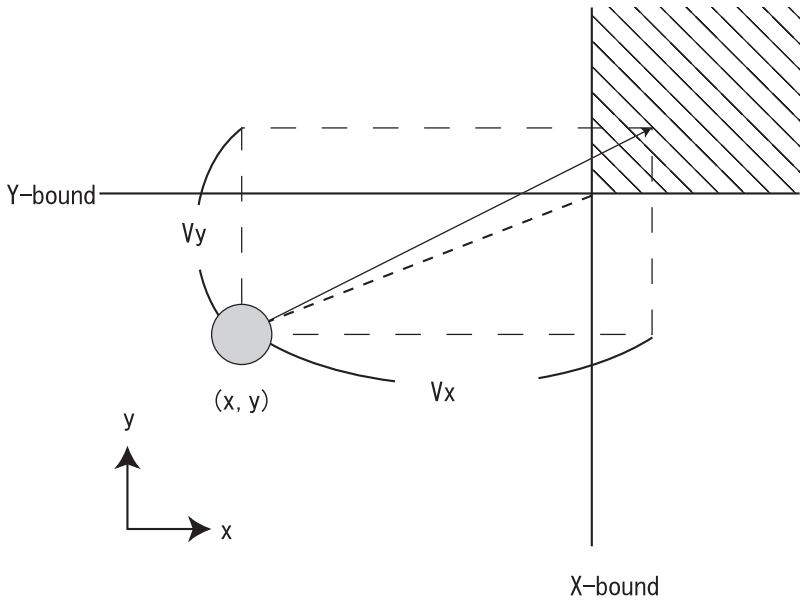

図 3.6: 境界衝突前後の時間

3.6 境界衝突後の粒子位置

境界で反射した粒子の位置については、粒子と壁面との衝突が瞬間で起こるものと仮定し、1 ステップの時間割合を考慮することにより、粒子位置を決定する。

説明のため、境界は $z = L(L > 0)$ とし、$t = t_0$ での粒子の位置を (x_0, y_0, z_0)、速度を (c_x, c_y, c_z) とし、境界衝突後の粒子の速度を (c'_x, c'_y, c'_z)、$t = t_0 + 1$ での粒子の位置を (x_1, y_1, z_1) (ただし,$z_1 < L$) とする。粒子が境界に衝突しない場合、1 タイムステップ後の粒子の位置は

$$x_1 = x_0 + c_x$$

$$y_1 = y_0 + c_y$$

$$z_1 = z_0 + c_z$$

となる。

$t = t_0$ から $t = t_0 + 1$ 間の粒子間の衝突は考慮しないが、境界との衝突は考慮する必要がある。境界と衝突した後の粒子の位置は、

$$
\begin{aligned}
z_1 &= L + c'_z\left(1 - \frac{L - z_0}{c_z}\right) \\
x_1 &= x_0 + c_x\frac{z_0 - L}{c_z} + c'_x\left(1 - \frac{L - z_0}{c_z}\right) \\
y_1 &= y_0 + c_y\frac{z_0 - L}{c_z} + c'_y\left(1 - \frac{L - z_0}{c_z}\right)
\end{aligned}
$$

となる。ここで、$\frac{y-L}{c_y}, (1 - \frac{y-L}{c_y})$ は、それぞれ粒子が 1 タイムステップに対しての境界と衝突するまでの時間の割合と境界と衝突した後に移動する時間の割合を示している。

3.7 実数位置の適用

実数型格子ガス法では、ステップ毎に衝突を発生させる必要があるため、確率を用いて実数位置を整数位置 (格子点上) に移動させている。この衝突を発生させるための確率を用いる移動を行わずに、粒子は位置を整数ではなく実数で保持し、粒子が最寄りの格子点において衝突ルールに従い、速度を交換するというルールを用いた場合でも、整数位置を用いた場合と物理量は変化しないと言う報告がなされている (文献 [5])。

つまり以下の図において、斜線部の内部にある粒子について、衝突過程では、同一格子点上にあるものとして衝突ルールにより衝突を行い、並進課程では、各粒子が持つ速度分の移動のみを行い、確率を用いた移動は行わない。この移動ルールを用いることで、確率を用いて粒子を格子点上に移動させる計算が省略でき、粒子の移動過程での計算量が減ることにより全体の計算速度が上がる利点がある。そのため、本研究では、粒子の位置を実数位置で持つこのルールを適用した。

3.8 粗視化

従来の格子ガス法と同様に、空間平均をとることで、その地点での流れ場の物理量を表す。

空間平均には移動平均を適用した。平均をとる格子点を中心にして、一辺 $2n + 1$ 立方体領域内にある格子に存在する粒子について空間平均をとる。この平均の取り方は、境界付近では平均をとるための格子が少なくなるため、境界付近の物理量の十分な平均を取ることができないという欠点がある。しかし、普通の空間平均に比べて、サンプル点を多くとることができるという利点がある。そのため、速度について調べる流れ場に関しては、この条件を採用した。

格子ガス法は統計的なばらつき (ノイズ) が発生する。そのため、流れ場の平衡状態に

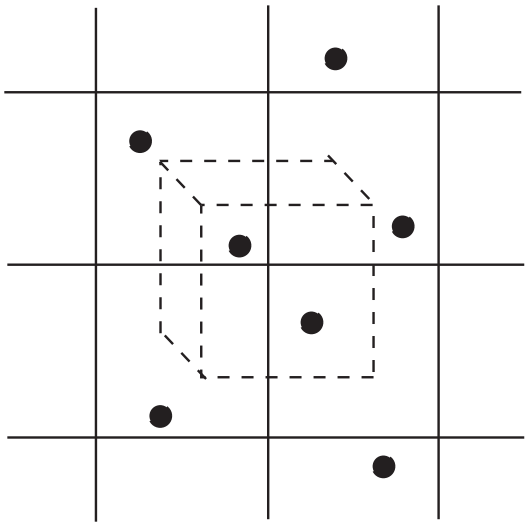

図 3.7: 実数位置

おいては、必要であれば時間平均をとることにより、統計的ノイズを取り除くことができる。

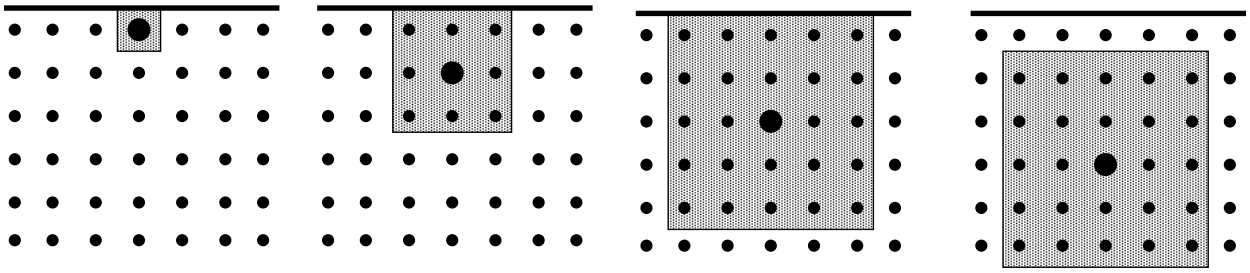

図 3.8: 空間平均

3.9 格子点の配置

実数型格子ガス法では、三次元において、格子は立方格子を用いる。格子点については、境界上に格子点を配置した場合、境界上での物理量、例えば密度や温度などが領域内の物理量に比べて低くなる。これにより、空間平均を取る際に影響を及ぼす可能性がある。そのため、境界においては、境界上に格子点を配置せず、格子点で境界を挟むように配置した。

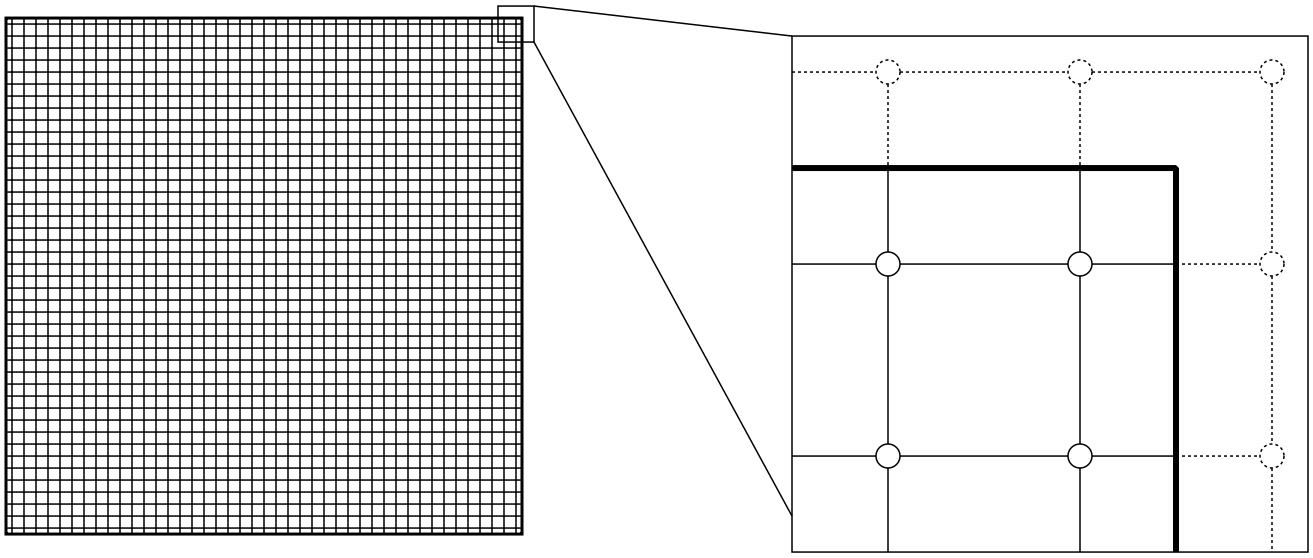

図 3.9: 格子点の配置

3.10 粒子に与える初期条件

粒子に与える初期条件は、

- 各格子点において密度 (粒子数) を一定に与える
- 粒子の速度は温度 、平均速度 0 の Maxwell 分布に従う乱数を生成し、与える

とする。

3.11 計算の流れ

図 3.10 に実数型格子ガス法を用いた計算のフローチャートを示す。

計算対象を変更する場合、図中の境界条件の考慮の部分を変更するだけで良い。そのため、実数型格子ガス法を用いた計算では、プログラムの変更部分が少なくて済むという利点を持つ。

3.12 物理量

動粘性係数 ν は、T を系の平均温度、ρ を格子点あたりの平均数密度とすると、

$$\nu = \frac{1}{12} + T\frac{1-e^{-\rho}}{2(\rho-1+e^{-\rho})} \tag{3.18}$$

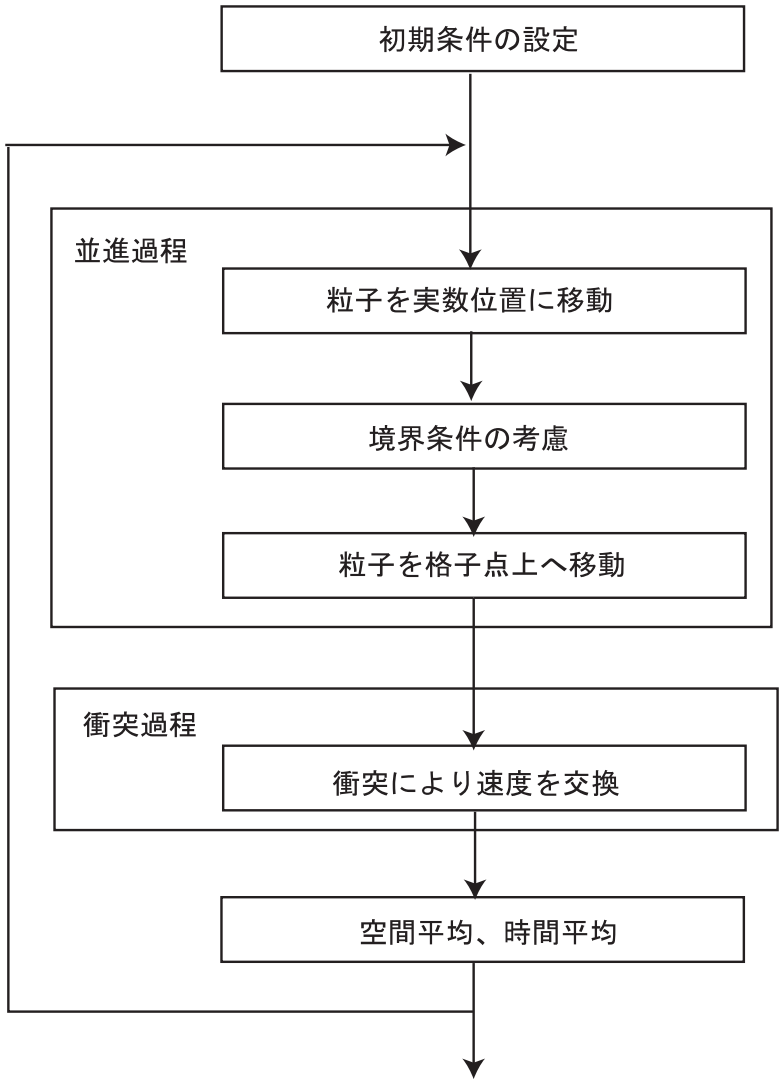

図 3.10: 実数型格子ガス法の基本フローチャート

で与えられ、Reynolds 数は代表長さを L、代表速度を U とすると

$$Re = \frac{LU}{\nu} \tag{3.19}$$

で与えられる。ここで T は系の平均温度、ρ は粒子の格子点あたりの平均数密度である。

格子点 l における物理量 (密度 ρ、運動量 μ、運動エネルギー ε）については、計算空間全体の粒子数を N とすると、以下のように与えられる。

$$\rho(l) = \sum_{i=1}^{N} m_i \delta(l - \xi_i) \tag{3.20}$$

$$\nu(l) = \sum_{i=1}^{N} m_i \zeta_i \delta(l - \xi_i) \tag{3.21}$$

$$\varepsilon(l) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m_i \parallel \zeta_i \parallel^2 \delta(l - \xi_i) \tag{3.22}$$

ζ_i、ξ_i はそれぞれ i 番目の粒子の速度と位置である。今回は、1 種類の粒子だけを扱うので、粒子の質量は $m_i = 1$ に正規化している。

系内の温度は、全粒子の運動エネルギーの平均を用いて、系内粒子数を N とすると、

$$T = \frac{2}{3} \sum_i \frac{v_i^2}{2} \tag{3.23}$$

と与えられる。

流体の音速 c_s は、

$$c_s = \sqrt{\frac{5}{3} T} \tag{3.24}$$

で与えられる。

圧力は理想気体を仮定しているため、

$$p = \rho T_{local} \tag{3.25}$$

となる。ここで、T_{local} は局所温度である。

熱流動の計算の評価を行うために、熱伝導率を求める必要がある。今回は、熱伝導率 κ について

$$\kappa = \mu C_v \tag{3.26}$$

という関係を用いることにした。μ は粘性係数であり、密度 ρ と動粘性係数 ν に関して

$$\mu = \rho \nu \tag{3.27}$$

という関係がある。また、C_v は定積比熱であり、実数型格子ガス法では、$C_v = \frac{\xi}{2}$ である。ξ は粒子運動の自由度であり、3 次元では $\xi = 3$ である。したがって

$$\kappa = \frac{2}{3}\mu \tag{3.28}$$

と計算できる。

熱伝導率を用いて、熱流動におけるレイリー数 Ra は

$$Ra = \frac{\lambda g L^3 \Delta T}{\nu \kappa} \tag{3.29}$$

$$= \frac{g L^3 \Delta T}{\nu^2 \rho} \tag{3.30}$$

と計算できる。ここで、λ は熱膨張係数、g は重力加速度、ΔT は温度差であり、λ は実数型格子ガス法では常に 1 である。

第4章　実験

4.1　3次元クエット流れ

3次元におけるクエット流れのシミュレーションを行った。上壁に移動壁を、その対面に当たる下壁に固定壁を配置し、2つの平板間での流れの様子をシミュレートした。ここで、移動壁に移動境界条件を、また、固定壁に滑りなし境界条件を、それ以外の境界には周期境界条件を用いた (図 4.1)。

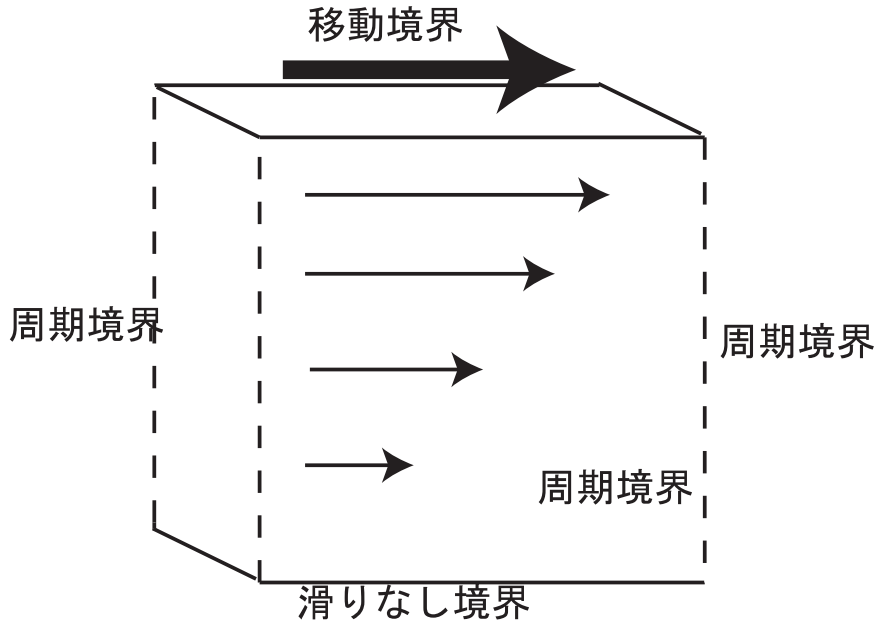

図 4.1: クエット流れ

このような平板間の流れをクエット流れと呼ばれる。このクエット流れにおいて境界の移動方向への流速 u は固定壁における流速を 0 として、移動壁における流速 U まで直線的に変化する分布が得られることがわかっている (図 4.2)。

すなわち、固定壁からの距離を l としたとき、流速 u は

$$u = \frac{U}{L} l$$

である。

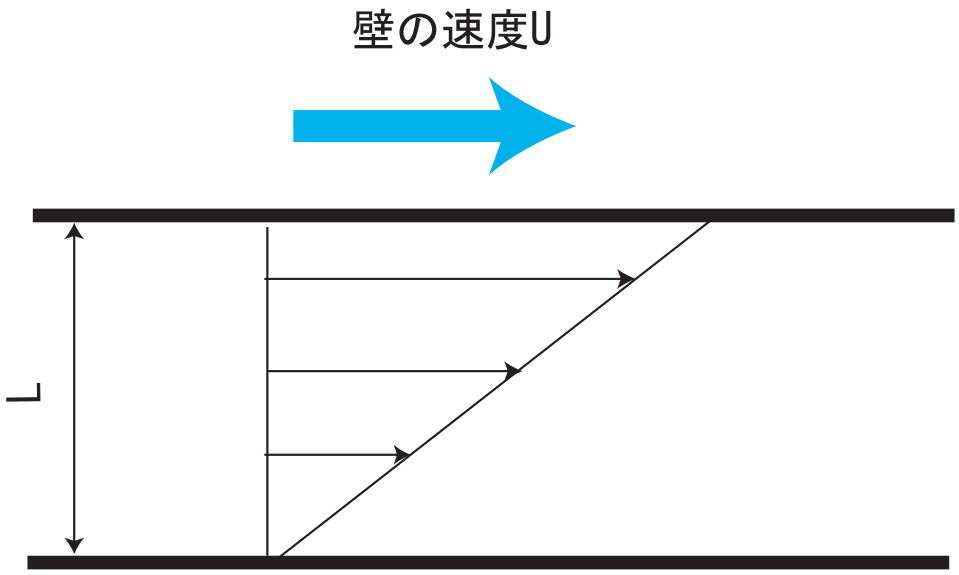

図 4.2: クエット流れの解析解

表 4.1: クエット流れの計算条件

格子数	64×64×64
粒子数密度	4
ステップ数	10000
空間平均をとる最大格子点サイズ	7
時間平均をとるステップ数	2000
初期条件として与える温度	1.5
移動境界に与える温度	1.5
移動境界に与える速度	0.5

計算条件として、表 4.1 の数値を与え、計算を行った。
得られた結果から図 4.3 に中心部垂直位置の x 方向の速度分布を示す。

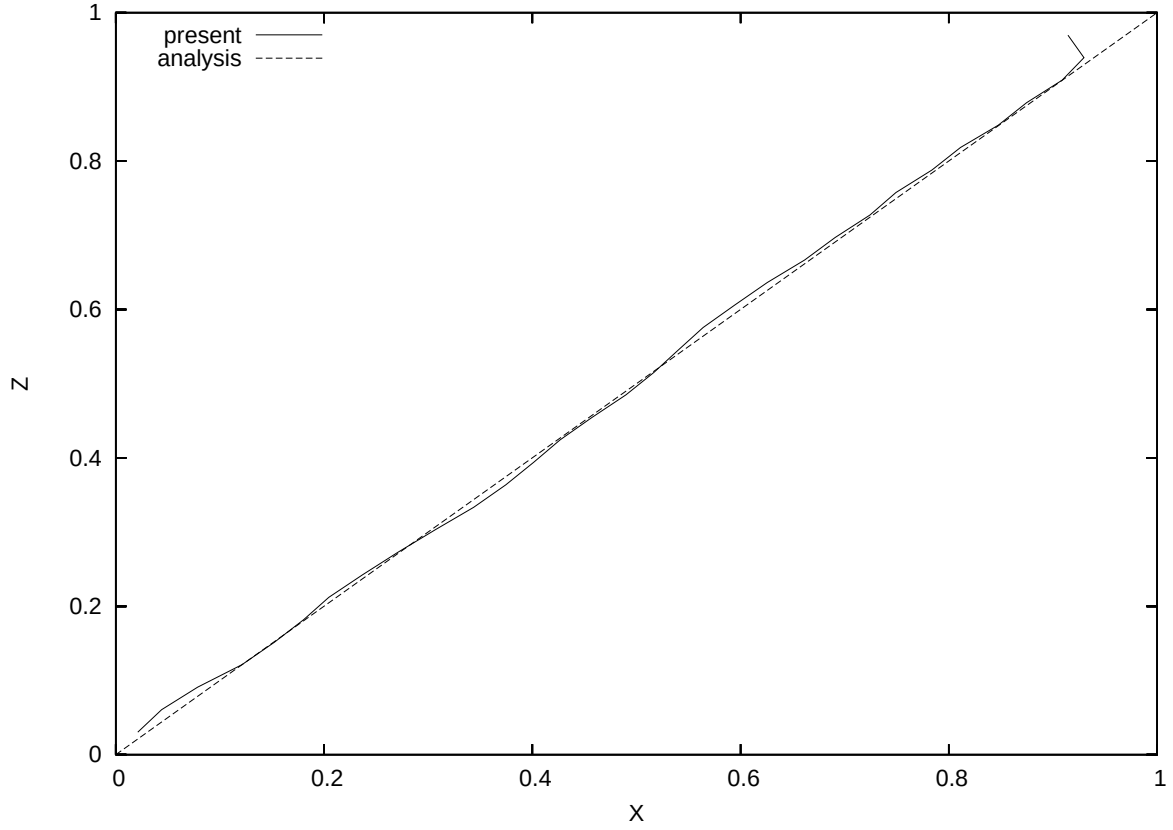

図 4.3: 中心部における x 方向速度成分

得られた結果から、解析解と比較して、上の境界近傍で解析解から大きくはずれているものの、その他の部分ではほぼ一致しているのがわかる。
また、z 軸に平行な平面には周期境界条件を用いているため、それら平面の近傍でも同じ結果が得られるはずである。したがって、空間平均が与えた最大の値をとることができる x 方向のもっとも小さい位置と大きい位置での x 方向の速度分布を図 4.4 に、同じく y 方向のもっとも小さい位置と大きい位置での x 方向速度成分を図 4.5 示す。
これらにより、どちらもほぼ中心部での速度分布と同じ分布が得られていることが確認でき、周期境界条件が有用であることがわかった。
また、表 4.2 のように、格子点数や数密度を変えて計算を行い、その比較を行った。
それぞれの中心部の x 方向速度成分を比較し、図 4.6 に示す。
上境界近傍を大きく描いた図を 4.7 に示す。
格子点数、粒子数密度が高いほど解析解と一致することがわかる。特に上境界近傍では D がよく一致している。

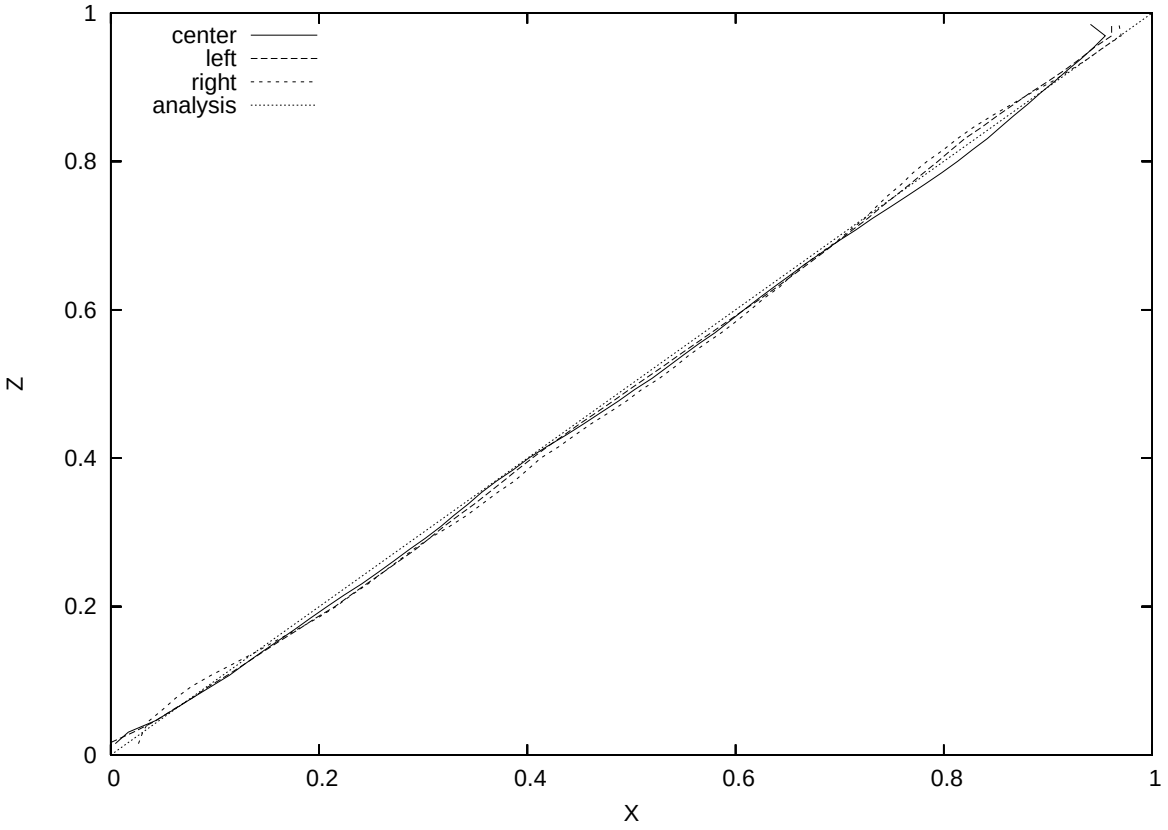

図 4.4: x 方向のその他の位置での x 方向速度成分

表 4.2: クエット流れの計算条件

プログラム	格子点数	粒子数密度
A	16×16×16	4
B	16×16×16	8
C	32×32×32	4
D	32×32×32	8
E	64×64×64	4

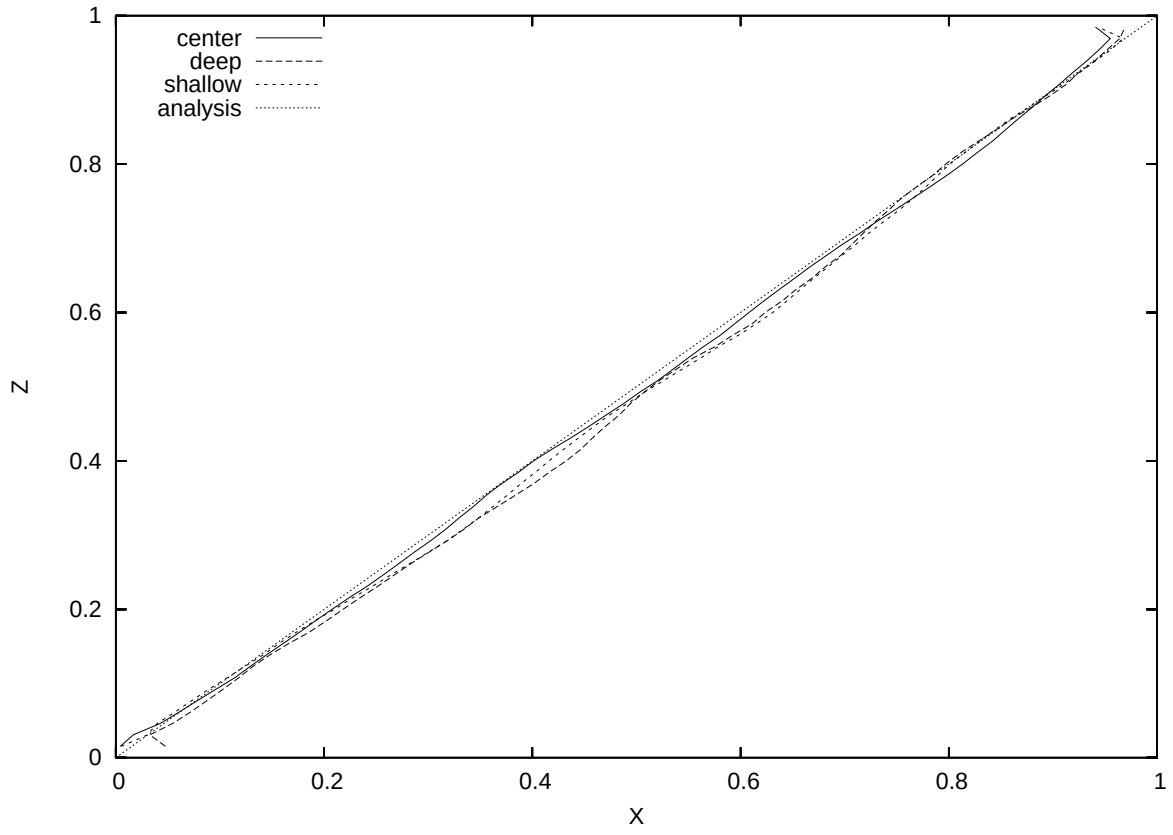

図 4.5: y 方向のその他の位置での x 方向成分

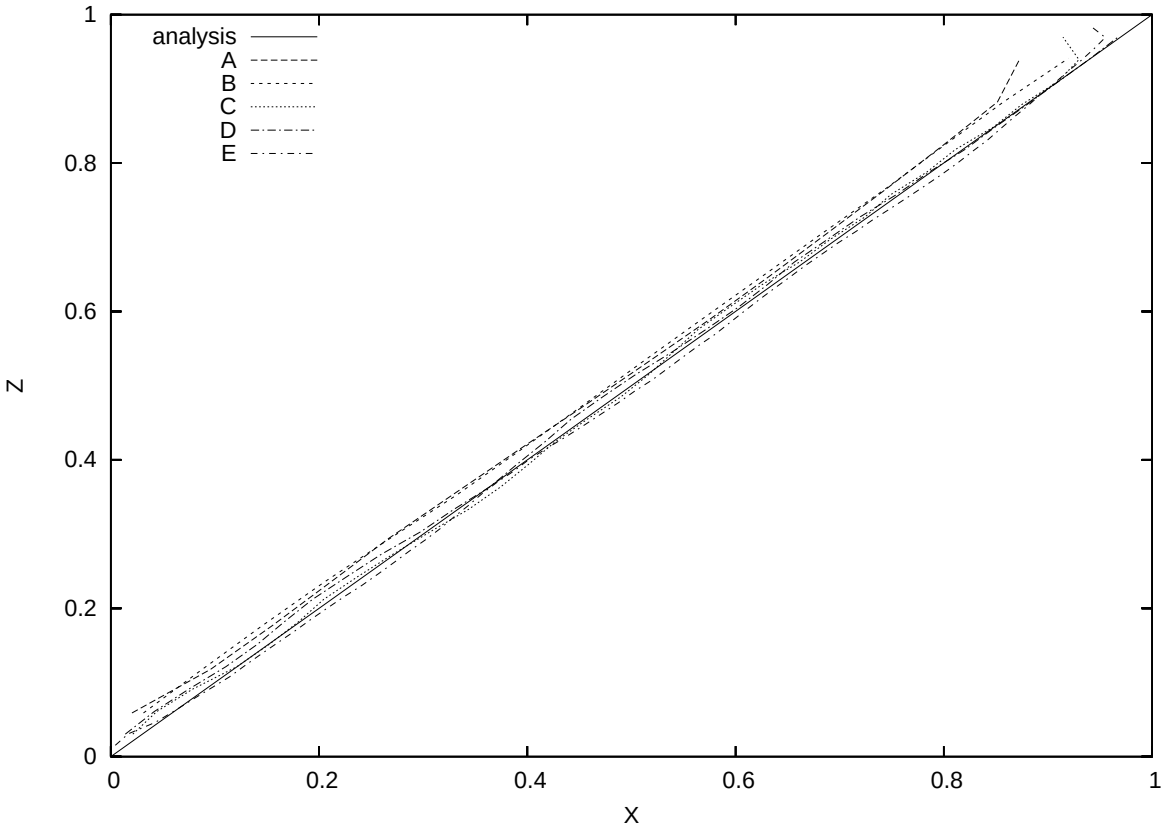

図 4.6: 格子点数と粒子数密度の関係

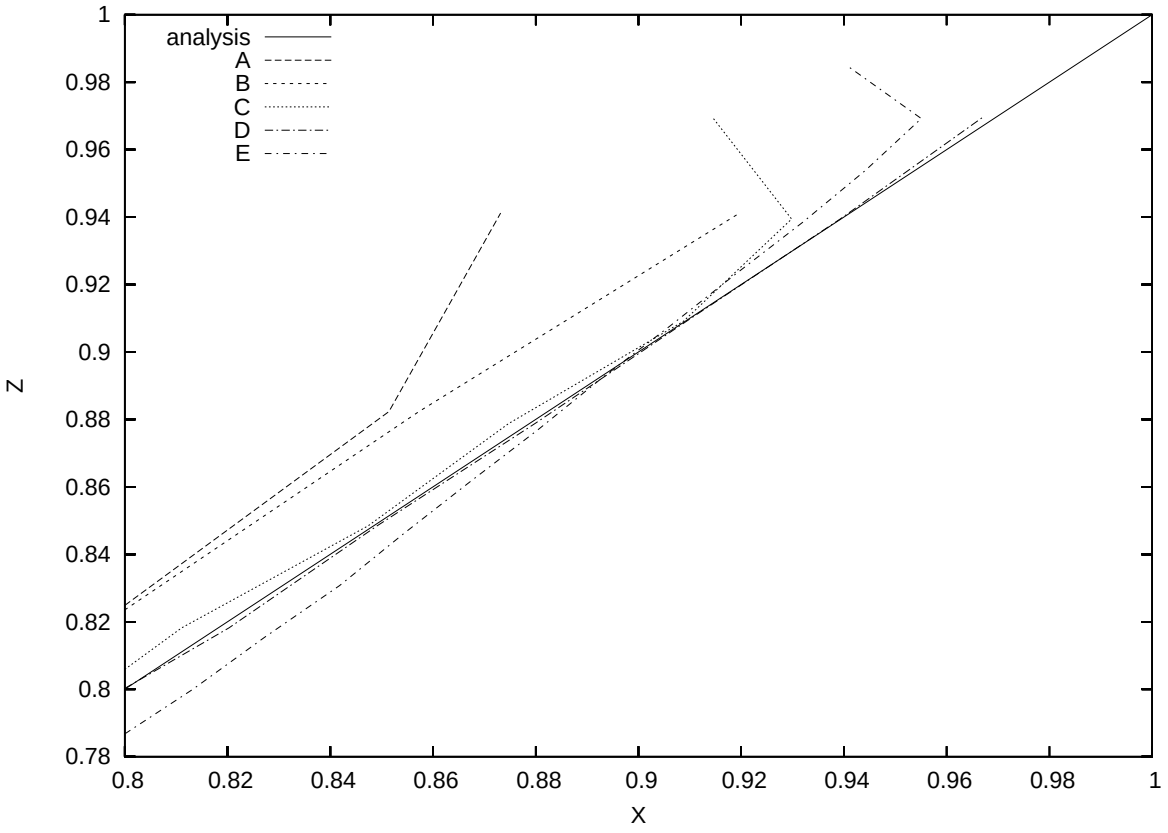

図 4.7: 格子点数と粒子数密度の関係 (境界近傍)

4.2　3次元キャビティ流れ

三次元キャビティ流れのシミュレートを行った。キャビティ流れは、流れ場を境界で囲み、あるひとつの境界を一定速度で水平方向に移動させることによって、立方体計算空間に渦が生じる流れである。図 4.8 のように移動する境界は上境界とし、その上境界には移動境界条件を、その他の境界には滑りなし境界条件を与えた。

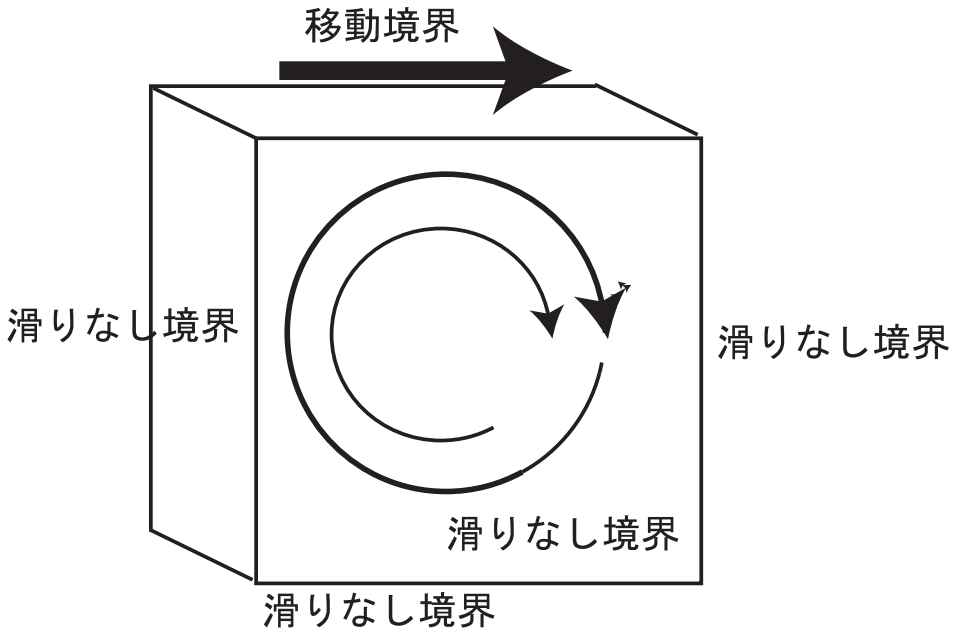

図 4.8: キャビティ流れ

このモデルに、計算条件として、表 4.3 の数値を与え、計算を行った。

表 4.3: キャビティ流れの計算条件

格子数	64×64×64
粒子数密度	4
ステップ数	10000
空間平均をとる最大格子点サイズ	13
時間平均をとるステップ数	2000
初期条件として与える温度	1.5
移動境界に与える温度	1.5
移動境界に与える速度	0.5

この条件で得られる Reynolds 数は $Re \simeq 25$ である。

計算によって得られた結果から、図 4.9 にベクトル線図を示す。また、図 4.10 に流線図を示す。

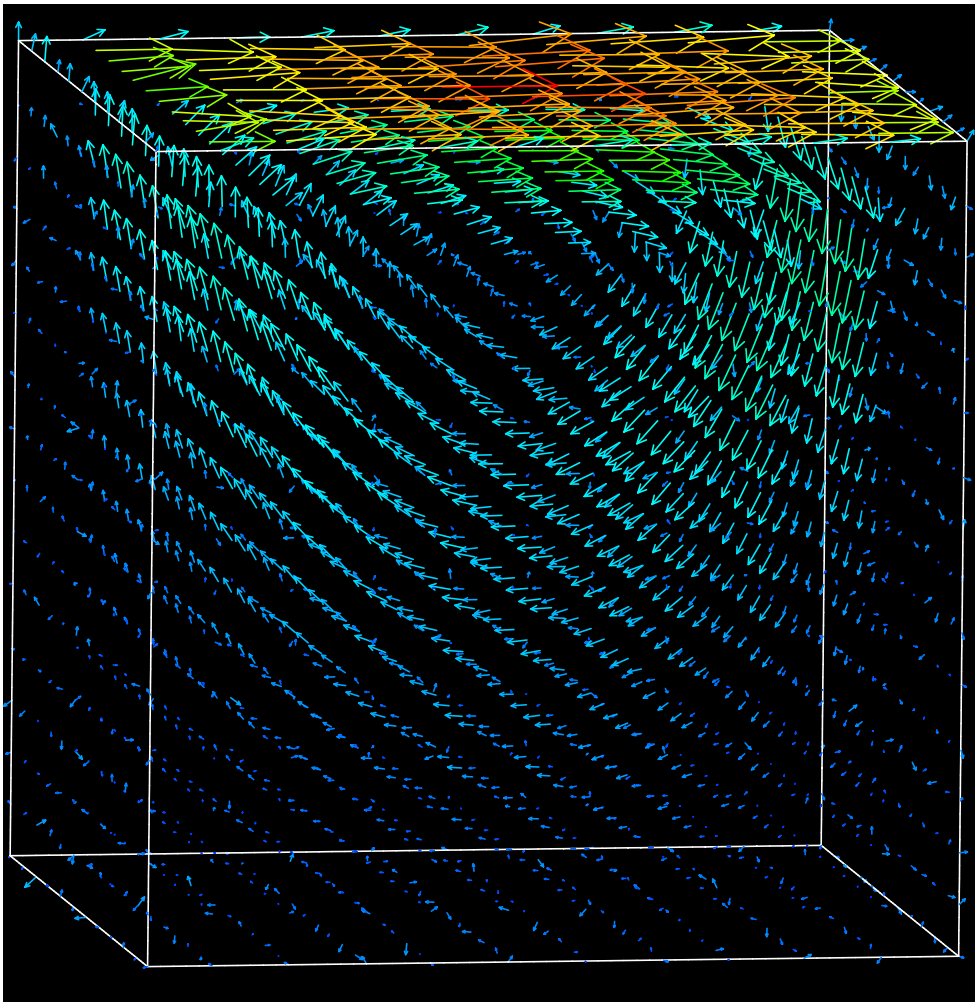

図 4.9: ベクトル線図

これらから、中心部やや上方に渦が発生しているのがわかる。したがって定性的に満足していることが言える。

また、中心垂直方向における x 方向速度成分と中心水平方向における z 方向速度成分を図 4.11、4.12 に示す。ここで、比較のために、同じプログラムで格子点数が 32×32×32、数密度が 4 で、レイノルズ数が約 13 のキャビティ流れを計算したものと Hwar C.Ku らの差分法により得られたレイノルズ数 100 の速度分布値も記載する。

どちらの図でも格子点が大きいレイノルズ数 25 の方がレイノルズ数 100 の結果に近づいているのが確かめられた。

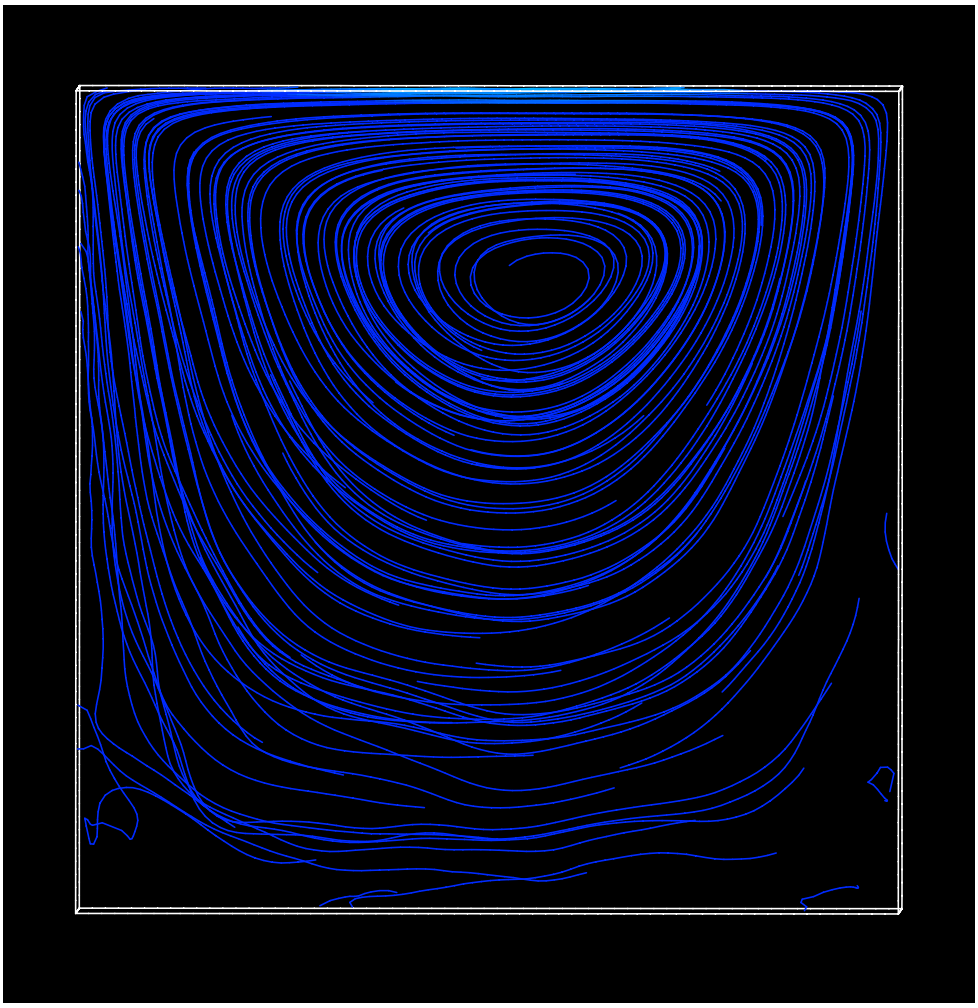

図 4.10: 流線図

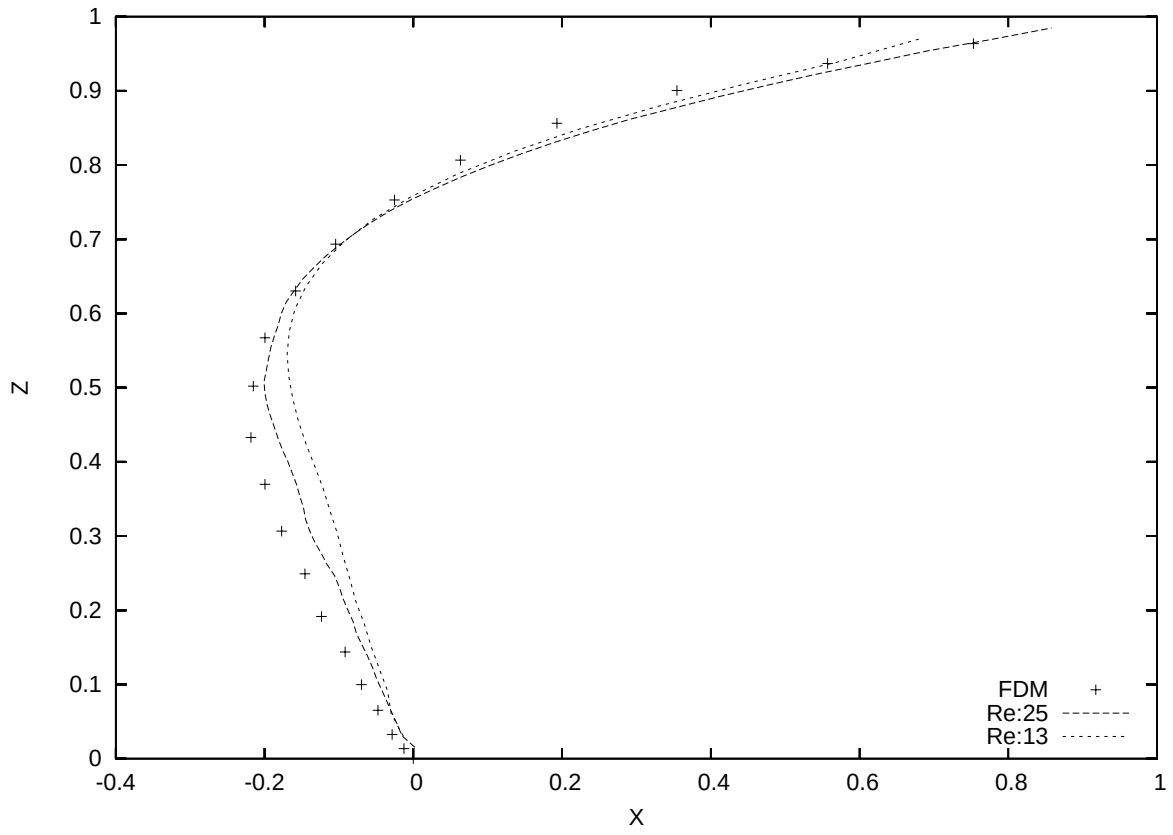

図 4.11: x 方向速度成分

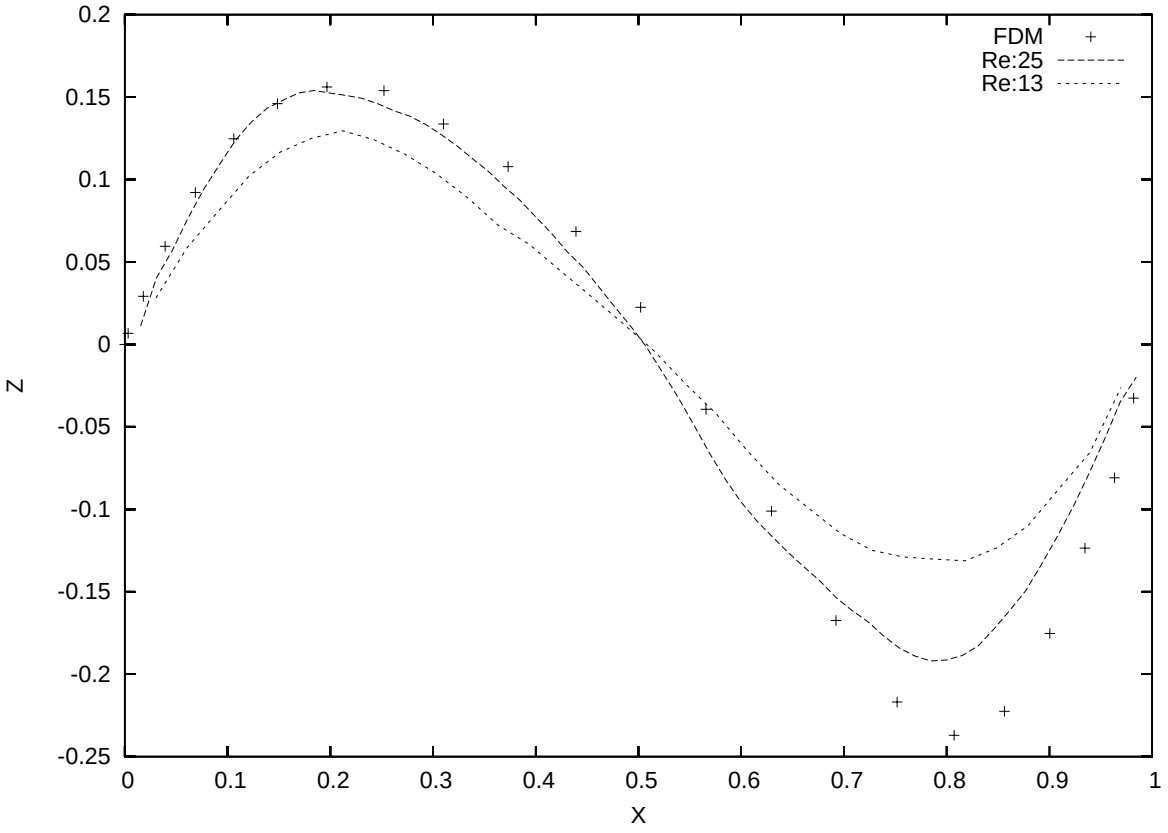

図 4.12: z 方向速度成分

4.3 考察

クエット流れの結果から、格子点数が多いほど、また、粒子数密度が多いほど、解析解に近づくことを示すことができた。特に、境界近傍の図 4.7 から、粒子数密度が多いほど、境界近傍の値も解析解に近づくことがわかった。つまり、格子点数や粒子数密度を大きくすると精度が上がることがわかった。

また、キャビティ流れでは、ベクトル線図と流線図によって中心部やや上方に渦が発生しているのを確認することができ、定性的に満足する結果を得ることができた。

また、キャビティ流れでは格子点数が多いほど、レイノルズ数が 100 に近づくため、速度分布もそれに近づくはずであるが、図 4.11 および 4.12 より、レイノルズ数 100 に近づいているのが確認できた。つまり、より大きなモデルの計算を行うことで、レイノルズ数を増やすことができ、差分法の値に近づくのではないかと予測することができる。

しかし、数密度が同じ値でレイノルズ数を 2 倍にするには、1 辺における格子数を 2 倍にしなければならない。つまり、三次元計算において、格子点数や粒子数が 8 倍になる。したがって、レイノルズ数の大きなモデルの計算を行う場合、計算時間が問題となってくる。

第5章　並列化

3次元モデルを計算するにあたり、粒子数や格子点数の増加による計算時間、消費メモリーの増大などが考えられる。また、レイノルズ数は一辺の格子点数に比例し、また、粒子密度が大きいとその値も大きくなる。したがって、大きなレイノルズ数を計算するためには格子点数の大きなモデルを計算しなければならない。

そこで、本研究では、格子数や粒子数の大きなモデルにも対応できる並列化モデルの開発を行い、それをメッセージ通信ライブラリ Message Passing Interface を用いて実装し、分散メモリ型並列計算機 CRAY-T3E 上で実行する。

また、より効率の良いアルゴリズムを検討することで計算速度を上げることを目ざす。

5.1　並列化手法の検討

並列化の手法には静的および動的領域分割法、または粒子分割法が考えられる。

静的領域分割法では、計算を始める前に全領域および全粒子を均等に分割し、各 Processor Element(以下 PE) に割り当てる。しかし、実数型格子ガス法では、計算が進行する際、粒子が移動することによる粒子密度の不均一性が存在する。したがって、計算が進行するに従い、各 PE での計算負荷の差が大きくなることが考えられる。

また、各 PE に与える粒子の数を均一に負荷分散する方法として動的に領域を変化させる動的領域分割法が考えられるが、この方法では各 PE での計算量がある程度均一になるものの、粒子数密度が高いところでは計算領域が小さくなるため、粒子が並進した際に他の PE 領域に移動する粒子が増えてしまう。このことにより、計算が進行するにしたがって、PE 間の通信量が増えてしまうことが考えられる。

粒子分割法は、粒子数が各 PE で均一になるように分配する方法である。この方法では、粒子の配置や格子点の配置を変えないため、各 PE での計算負荷はほぼ均一に保たれるという利点がある。

したがって、本研究では粒子分割法による並列化を行う。

5.2　粒子分割法

本研究では各 PE に均一に粒子数を割り振った。また、格子点情報は各 PE にすべての領域を持たせた。このように配置することで、PE 間の通信が必要な情報は、衝突過程

における格子点ごとの粒子平均速度、回転角となる。また、物理量を求めるための空間平均や時間平均は使用 PE 数で均一に領域分割し、計算を行った。

格子点ごとの平均速度は、まず、各 PE がそれぞれ自身の保持している粒子に関して格子点ごとの速度の和、および、粒子数を計算する。次に得られた速度の和および粒子数を全 PE 間で通信することにより、その総和を得る。その得られた速度の各成分を粒子数で割ることにより、格子点での平均速度を求めることができる。

粒子分割法では、各 PE での計算量はある程度均一に保たれるため、計算速度を向上させるためには各 PE 間での通信時間、つまり通信する情報を減らすことが重要となる。本研究では、通信する情報を減らすために以下の方法を考えた。

5.3 回転角

各ステップ各格子点毎で一定な回転角は一様乱数で与えられるが、計算機上で発生させる乱数は、規則に基づいて並べられた数列である。その規則を決めているのが乱数の種である。したがって、各 PE で同じ乱数の種を与えることで、PE 間で通信しなくとも、同じ乱数列を取り出すことができるため、同じ回転角を得ることができる。つまり、この方法を用いると、各ステップ毎に格子点数分の回転角を通信しなければならなかったものが、各 PE で乱数の種が同じになるように通信すれば良くなるため、通信量を大幅に削減することができる。この方法を用いることで、PE 間の通信を格子点毎の平均速度、格子点毎の粒子数、および乱数の種だけに抑えることができる。また、設定する乱数の種には乱数を用いて値を与える。

このフローチャートを図 5.2 に示す。図中、角が丸くなっている長方形で囲まれた部分は、他の PE との通信を表している。

5.4 並列化効果

構築したアルゴリズムに基づき並列処理プログラムを作成し、CRAY-T3E 上で実行した。

まず、格子数と計算時間の関係を調べるために、一辺の格子数 8、16、32 の立方体を用い、１格子あたりの粒子数を 4 として、10000 ステップの計算を行った。次に、数密度が増えた場合の計算時間の比較のため、一辺の格子数 16 の立方体で 1 格子点あたりの粒子数を 2、4、8、16 のそれぞれについて 10000 ステップの計算を行った。それらについて、PE 数が 1、2、4、8、16、32、64、128 の場合について計算を行い、PE 数とプログラム実行時間の関係を調べた。その結果を図 5.3 に示す。

図 5.3 中、grid は一辺における格子点数を、density は粒子数密度を示している。

粒子数密度が 4 の場合を見てみると、格子点数が多いほど、PE 数が増えた場合に速度向上比が上がっているのがわかる。また、一辺における格子点数が 16 の場合を見ると、粒子数密度が高いほど、PE 数が増えるにつれ、速度向上比が上がることがわかる。また、

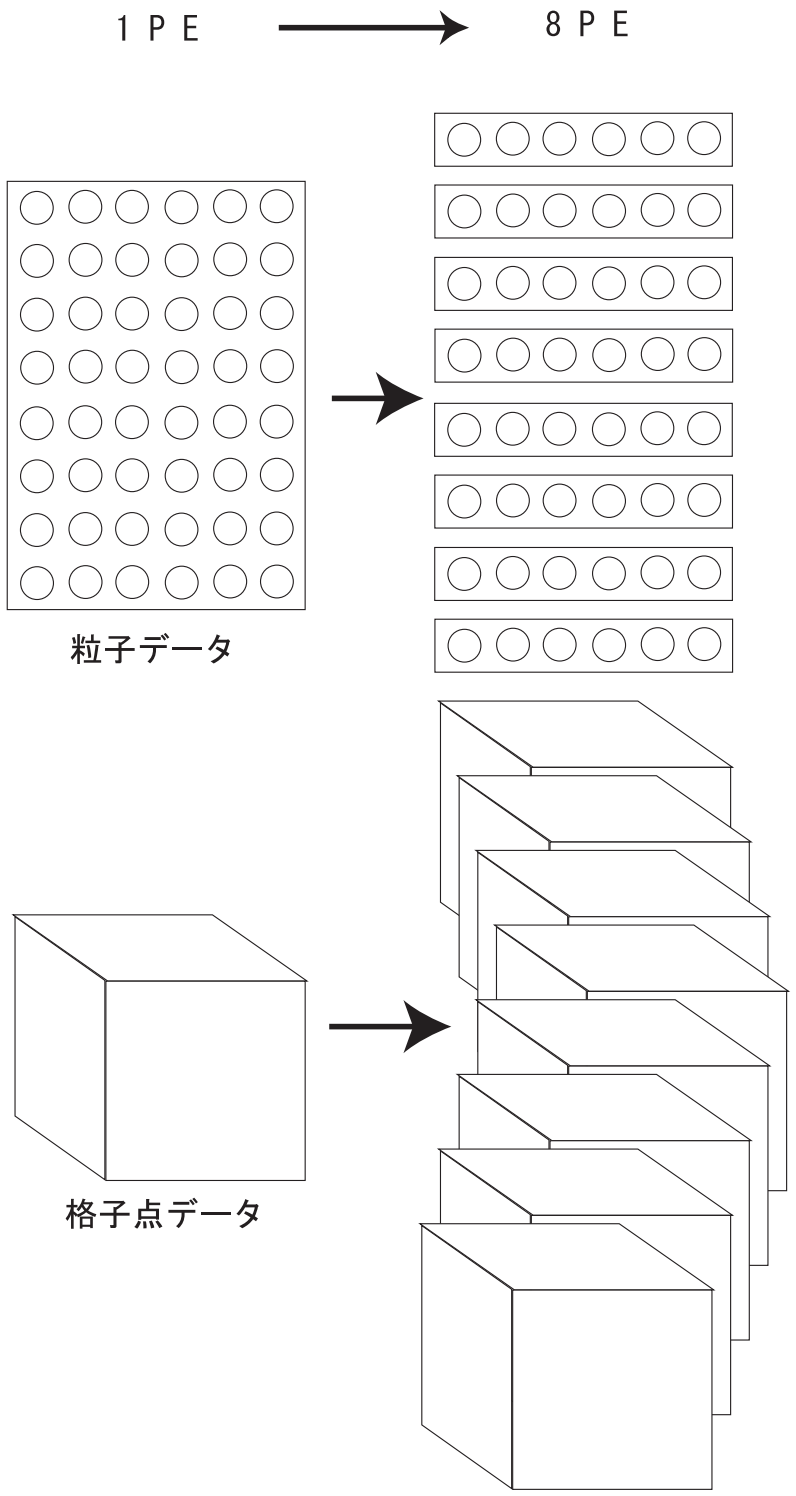

図 5.1: データ分割

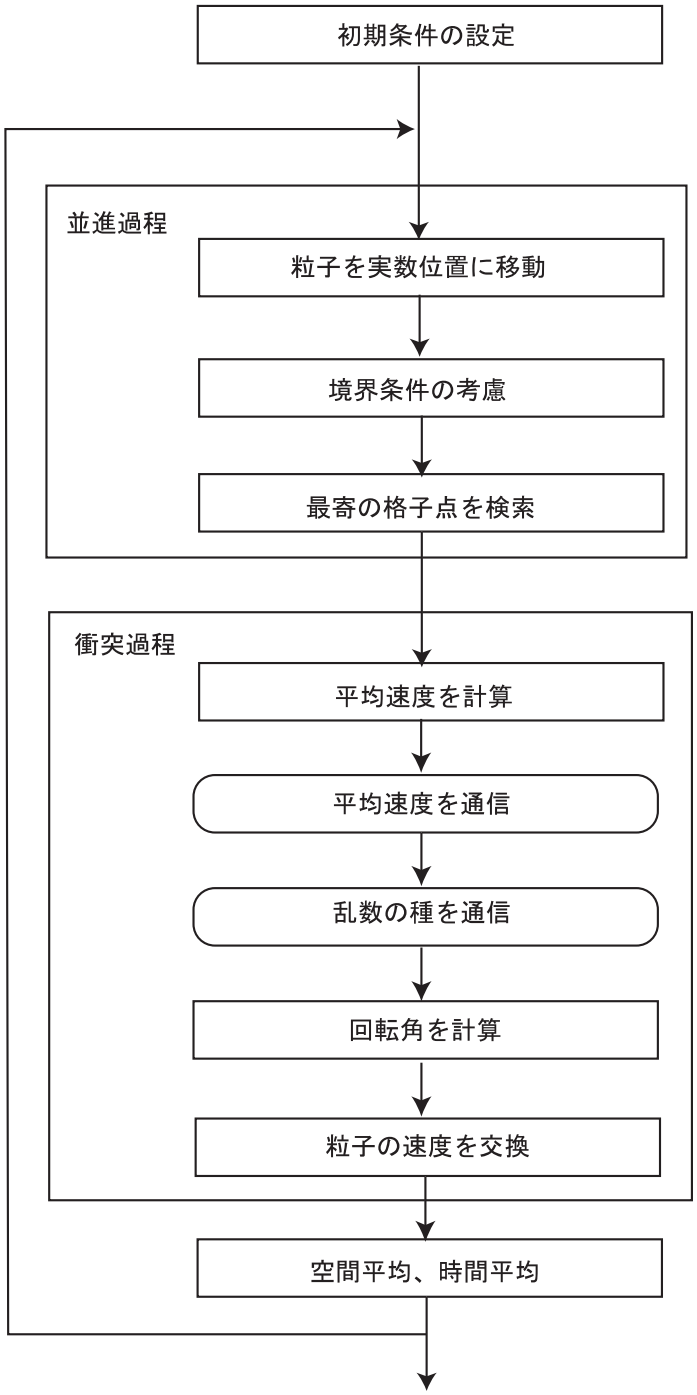

図 5.2: 並列計算のフローチャート

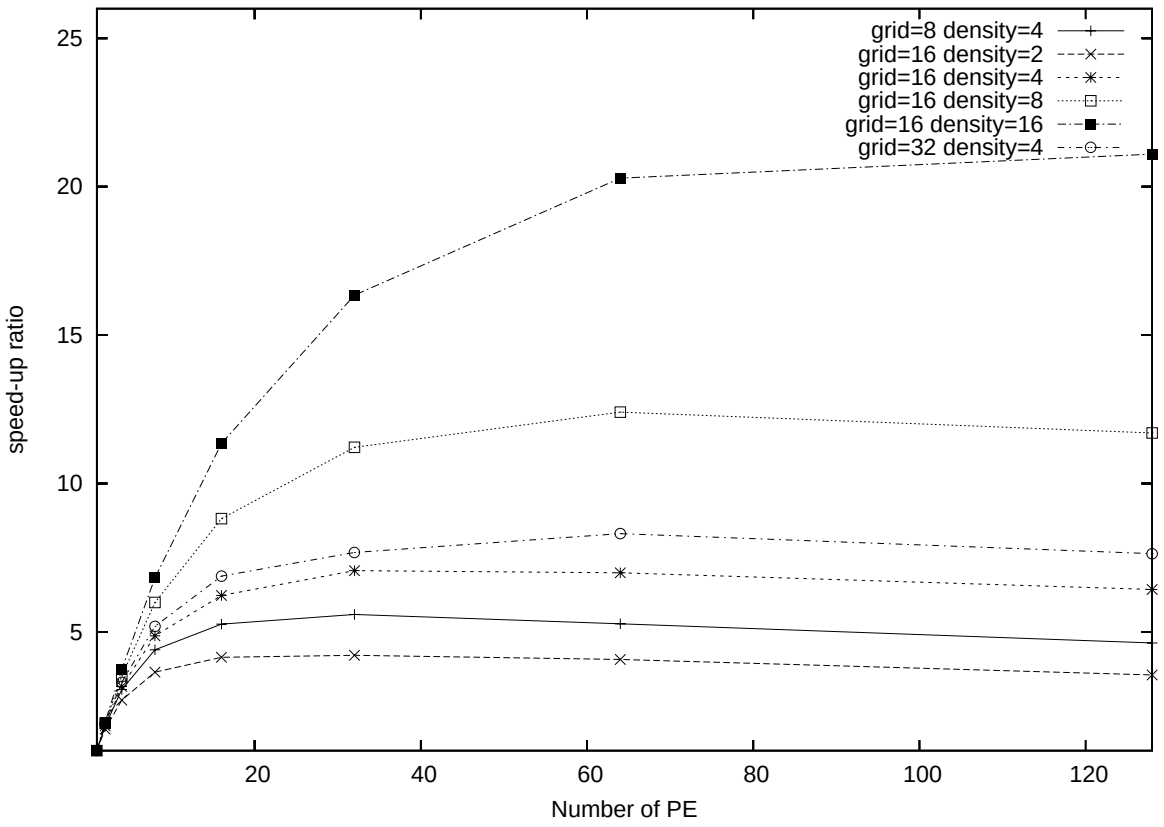
grid=8 density=4
grid=16 density=2
grid=16 density=4
grid=16 density=8
grid=16 density=16
grid=32 density=4
speed-up ratio
Number of PE
25
20
15
10
5
20
40
60
80
100
120

図 5.3: 速度向上比

全体としてPE数が多くなるほど速度向上比が上がらなくなっている事がわかる。

この原因を調べる目的で、格子点数16×16×16、数密度4のキャビティ流れの計算に関して、プログラム実行時間を、計算時間であるCPU時間と通信時間および通信する際にかかるむだ時間であるnetwork時間とに分けて出力させ、その関係を調べた。その結果を図5.4に示す。

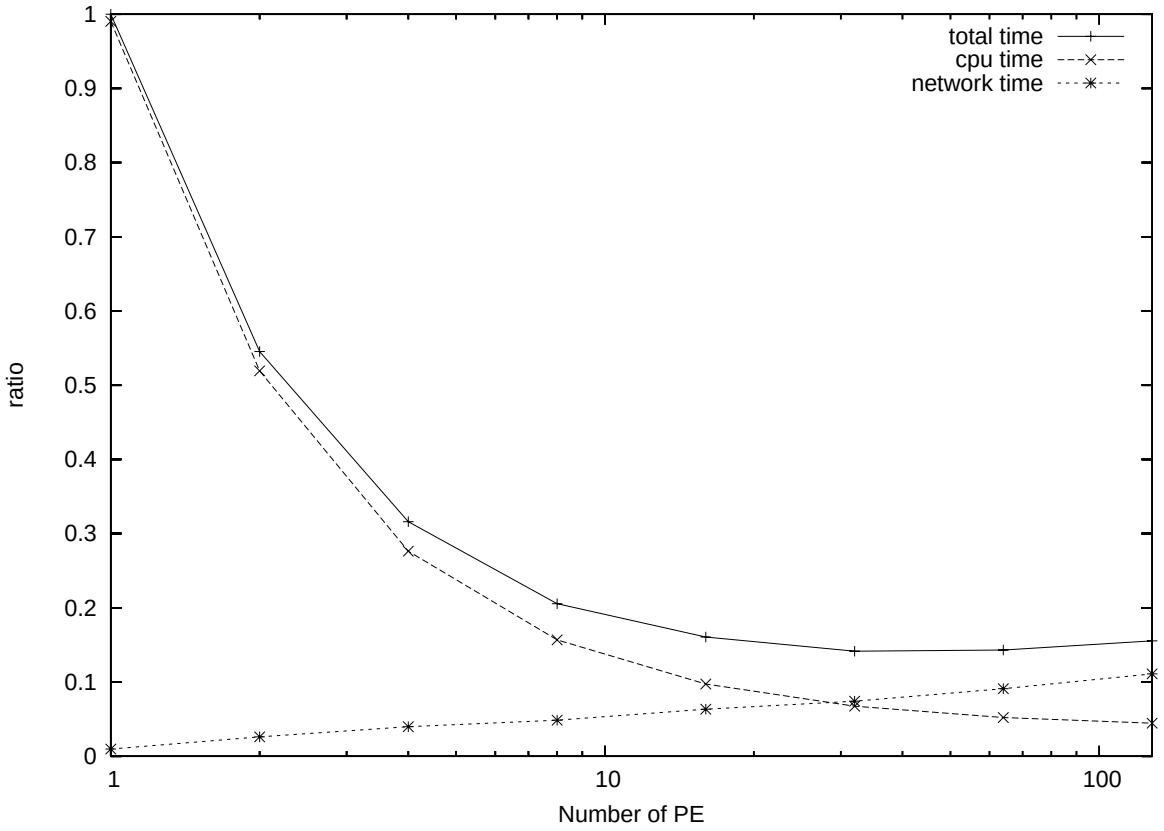

図 5.4: 実行時間、計算時間、通信時間の関係

PE数が少ないときは計算時間の減少幅が通信時間の増加幅に比べ大きく、その結果、全実行時間が大きく減少していることがわかる。しかし、PE数が大きくなるにつれ計算時間の減少幅が少なくなっている。それにくらべ、通信時間はほぼPE数の倍数に比例している。この結果、PE数が16以上の場合で通信時間の方が計算時間よりも多くかかっている。

他の計算領域について、実行時間内の通信時間の割合を実行した。その結果を図5.5に示す。

この結果から、格子点数が少ないほど、また、粒子数密度が少ないほど、PE数を増やした際に、通信量が占める時間が多くなっていることがわかる。このことからPE数を増やした場合ほど速度向上比が上がらなくなるのは、実行時間に対して通信時間の割合が増

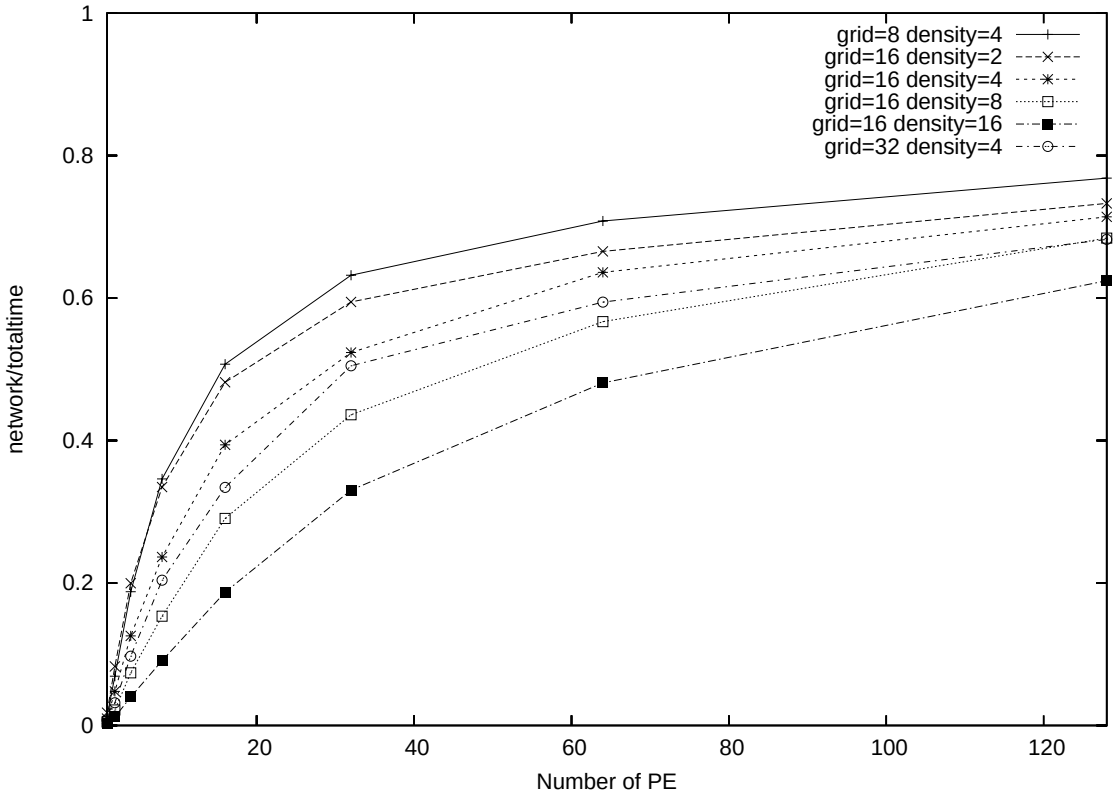

図 5.5: 通信時間の占める割合

えているためであると考えられる。

また、速度向上比は格子点数を増やすよりも数密度を増やした計算の方が良くなっている。これは、格子点あたりの粒子数は通信時間に無関係であるため、粒子数密度が大きいほどPEを増やす効果が現れるためであると考えることができる。

以上より、格子点数、数密度が高い流れ場ほど速度向上比が良くなることを示すことができた。

さらに、粒子分割法を採用した理由の1つに計算負荷が均一に分散できることがあるが、実際に、格子点数16×16×16、数密度4のキャビティ流れの計算に関して、各PE間でのプログラム実行時間差の実行時間に対する割合は、最大で2%、最小で0.5%となった。これにより、計算負荷がほぼ均一に行われていることが確かめられた。

5.5 格子点単位での通信

先の結果から、速度向上比がなまるのは全実行時間に対する通信時間の割合が大きくなるからであると考えることができた。したがって、速度向上比を上昇させるためには、通信時間を減らさなければならない。そこで、通信時間を減らすために通信しなければならないデータ量を減らすことを考えた。その通信データ量のほとんどは衝突過程において必要なデータ、つまり、格子点毎の速度和と粒子数である。

そこで、前アルゴリズムでは、PEがそれぞれ全領域を通信しているが、これを格子点毎で通信するように変更する。初期状態において、各格子点上に粒子密度分だけ、粒子が存在している。もし、格子点毎に通信した場合、そのそれぞれの粒子が異なるPE上に存在した場合でも、通信の対象となるPEは粒子密度分となる。例えば、使用するPE数64、粒子密度4で均一に粒子が存在する場合、前アルゴリズムでは通信対象となるPE数は64であったものに対して、格子点毎に通信した場合、通信対象となるPEは4となる。したがって通信データ量が $\frac{1}{16}\left(=\frac{4}{64}\right)$ となる。

ただし、PEが持つ格子点での平均速度が粒子が存在する格子点のみとなるため、物理量を求める際に必要な空間平均をとることができなくなる。したがって、空間平均を求めるPEを通信対象に必ず加えて、通信を行うようにする。この際、空間平均を行う領域を変更する。前プログラムでは、格子点の位置関係を考えず、単純に均一になるように各PEに分散させていたが、この方法では、通信対象となるPEをなるべく減らすために各PEに立方体領域を持たす。

この手法でのフローチャートを図5.6に示す。衝突過程における平均速度を求める過程において、自身の持つ粒子について平均速度を求めた後、各格子点において、通信が必要なPEを探し、そのPEおよび空間平均でその値が必要となるPE間でのみ、平均速度を通信し、全体の平均速度を求める。この指定したPE間での通信は、指定したPEのみを含むコミュニケータを各格子点毎に生成し、そのコミュニケータ内で値を交換し合うことで成立する。

これを格子点数 $32 \times 32 \times 32$、粒子数密度4、最大空間平均格子数5でPE数が8の場

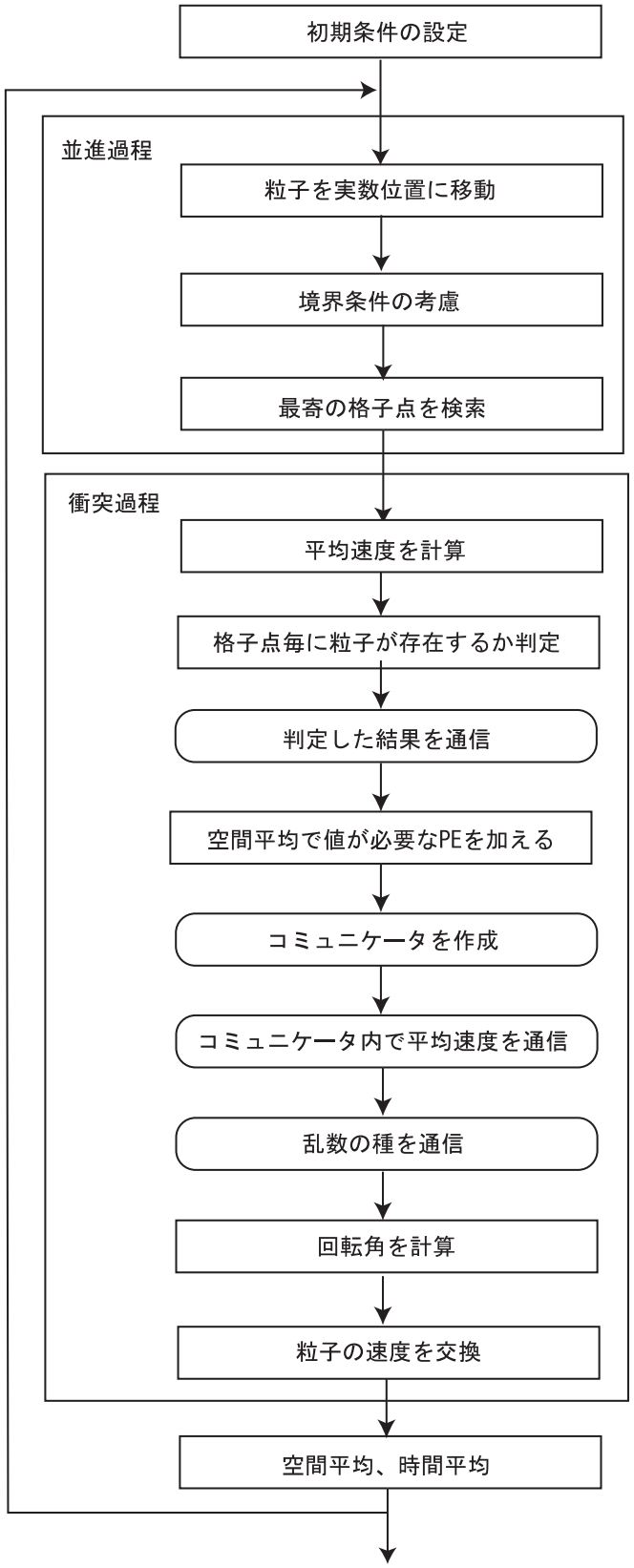

図 5.6: 格子点単位で通信する場合のフローチャート

合と 64 の場合で計算を行った。同じ条件で、全領域を通信する、前プログラムを実行し、計算時間を比較した。比較した結果を表 5.1 に示す。ただし、表中、A は全 PE で通信を行うプログラム、B は格子点毎に通信を行うプログラムである。また、実行時間は計算が開始されてから終了するまでの時間、計算時間は実行時間から通信時間を除いた時間、通信時間は通信が行われている時間および同期通信における待ち時間である。

表 5.1: 格子点毎通信の計算時間

プログラム	実行時間	計算時間	通信時間
A(8PE)	1.000	0.7084	0.2916
B(8PE)	72.13	1.389	70.74
A(64PE)	0.6426	0.2309	0.4117
B(64PE)	118.1	4.278	113.9

8PE、64PE のどちらの場合も B は A に比べて、計算時間も通信時間も多くなっている。64PE の場合、計算時間は約 20 倍となっているが、特に通信時間の増加分は大きく、約 250 倍になっている。

そこで、通信時間における各 MPI 通信にかかる時間を調べ、表 5.2 に示す。表中、Allreduce は格子点毎の平均速度を計算するために速度和と粒子数を通信するために用いられた MPI_Allreduce の実行時間、Allgather は通信に参加する PE を決定するために格子点毎に粒子が存在するかを判定するための MPI_Allgather の実行時間、Communicator は通信に参加する PE 間のグループであるコミュニケータをつくるための通信時間である。

表 5.2: 格子点毎通信の通信時間

プログラム	通信時間	Allreduce	Allgather	Communicator
A(8PE)	0.2916	0.2905		
B(8PE)	70.74	20.06	0.1537	50.40
A(64PE)	0.4117	0.4105		
B(64PE)	113.9	5.956	1.298	106.5

特にコミュニケータを作成する時間が多いことがわかる。これは、コミュニケータを作成するコマンドは 1 ステップ中、格子点数回分呼び出されるため、呼び出し回数が多いことによるものであると考えられる。また、Allreduce もコミュニケータ同様、格子点数回分呼ばれるが、この時間と比べると、コミュニケータを作成するのにかかる時間は、非常に大きいと考えられる。

また、格子点に粒子が存在する PE を調べるために用いる MPI_Allgather にかかる時間は、64PE の場合、その時間だけで、A の全体の通信時間を超えてしまっている。これは

各 PE で全領域 × PE 数のデータを集めるため、通信データが大きいことによる時間の増加と考えられる。

さらに、通信量が減るために減少するであろうと考えた MPI_Allreduce にかかる時間も増えている。この原因として考えられるのは、これもその他の通信同様、呼び出し回数が多いためであろう。

5.6 ブロック毎での通信

格子点毎に通信を行う手法では、MPI の呼び出し回数が増えることや集めるデータ量の増加などによる通信時間の増加によって、実行時間を減らすことができなかった。

そこで、全領域を格子点をいくつか集めたブロックで区切り (図 5.7)、そのブロック単位で格子点の平均速度が必要な PE 間の通信を行う。また、ブロックは立方体になるように形成する。これは、平均速度を考えなければならない領域をなるべく減らすためである。

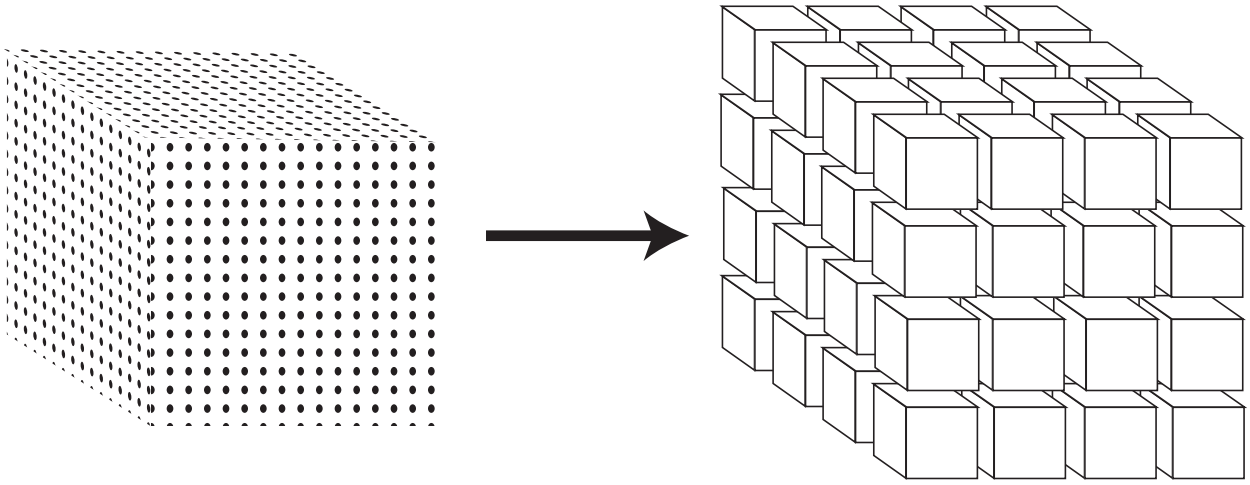

図 5.7: ブロック分割

つまり、粒子の計算を開始する前に全領域をいくつかの立方体ブロックで領域分割し、各ステップ毎に各ブロックで通信が必要な PE を判定し、通信を行い、計算を進行させる。このようにブロック単位通信することで、先の格子点毎に対して通信量が増えるものの、MPI_Allreduce の呼び出し回数を減らすことができ、コミュニケータを呼び出す回数も減らすことができる。また、MPI_Allgather は、呼び出し回数は同じだが、通信するデータ量を減らすことができる。

ブロック数を 64 で実装し、これを格子点数 $32 \times 32 \times 32$、粒子数密度 4、最大空間平均格子数 5 で PE 数が 8 の場合と 64 の場合で計算を行った。同じ条件で、全領域を通信する、全プログラムを実行し、計算時間を比較した。比較した結果を表 5.3 に示す。ただし、表中、A は全 PE で通信を行うプログラム、C はブロック毎に通信を行うプログラム

である。

表 5.3: ブロック毎通信の計算時間

プログラム	実行時間	計算時間	通信時間
A(8PE)	1.000	0.7084	0.2916
C(8PE)	1.362	0.8568	0.4484
A(64PE)	0.6426	0.2309	0.4117
C(64PE)	1.815	0.3517	1.463

8PE、64PE のどちらの場合も C は A に比べて、計算時間も通信時間も多くなっている。計算時間は、A に比べて、ブロックに粒子が存在するか判定する部分や空間平均をとるために必要な部分が含まれるため、時間が増加したと考えられる。しかし、通信時間の差は約 1.1 倍と、B に比べて、その差を大きく縮めることができた。

そこで、通信時間の MPI 通信にかかる時間を表 5.4 に示す。

表 5.4: ブロック毎通信の通信時間

プログラム	通信時間	Allreduce	Allgather	Communicator
A(8PE)	0.2916	0.2905		
C(8PE)	0.4484	0.3764	0.01550	0.05393
A(64PE)	0.4117	0.4105		
C(64PE)	1.463	1.070	0.02113	0.3654

8PE の場合、C は A に比べ、通信時間が約 50%増加した。また、この通信内の MPI_Allreduce が約 30%増加している。まだ、A よりも通信時間が大きくなっているが、B の場合よりも増加分は大幅に減った。つまり、MPI_Allreduce の呼び出し回数が減った効果を確認できた。

したがって、MPI_Allreduce をさらに減らすことで通信時間を A よりも短くすることができる可能性があると考えられる。

5.7 ブロック数の変更

前々節で、呼び出し回数が通信時間を大きくしている原因であると確認することができた。また前節から、呼び出し回数を減らすことで通信時間を減らすことができることができることを確認することができた。

そこで分割するブロック数を 8 にする。このとき、通信するデータ量は増えることが予想されるが、呼び出し回数は 64 ブロックの場合と比べて $\frac{1}{8}$ になる。

ところが、これを 8PE で実装した場合、空間平均のためにブロックに空間平均で値が必要となる PE を入れると、全ブロックで全 PE を含むことになってしまう。そのため、ブロックに空間平均を取る PE を含めて通信することはできない。

この問題を解決する方法として、空間平均を計算する直前で、空間平均を計算する上で必要な格子点情報を持っている PE から、その値を通信によって得る操作を加える。この手法をとることで、衝突過程における平均速度の通信で、空間平均を計算する PE を加えなくとも良くなる。

このフローチャートを図 5.8 に示す。

これを格子点数 $32 \times 32 \times 32$、粒子数密度 4、最大空間平均格子数 5 で PE 数が 8 の場合と 64 の場合で計算を行った。同じ条件で、全領域を通信する、全プログラムを実行し、計算時間を比較した。比較した結果を表 5.5 に示す。ただし、表中、A は全 PE で通信を行うプログラム、D はブロック数 8 でブロック毎に通信を行うプログラムである。

表 5.5: ブロック毎通信の計算時間 (8 ブロック)

プログラム	実行時間	計算時間	通信時間
A(8PE)	1.000	0.7084	0.2916
D(8PE)	1.362	1.109	0.25360
A(64PE)	0.6426	0.2309	0.4117
D(64PE)	1.152	0.6029	0.5495

また、通信時間に対する MPI 通信にかかる時間を表 5.6 に示す。ここで、Sendrecv は空間平均で必要となる格子点情報を通信するための時間である。

表 5.6: ブロック毎通信の通信時間 (8 ブロック)

プログラム	通信時間	Allreduce	Allgather	Communicator	Sendrecv
A(8PE)	0.2916	0.2905			
D(8PE)	0.2536	0.2276	0.01277	0.01003	0.001088
A(64PE)	0.4117	0.4105			
D(64PE)	0.5495	0.5068	0.01056	0.02957	0.00087

D を 8PE で実行した場合に、A よりも通信時間を約 13%減らすことができた。しかし、計算時間が約 50%増えてしまっているために、全体として実行時間は増加した。また、8PE から 64PE に PE 数を増やして計算を行った結果、計算時間が約 46%減ったが、通信時間は

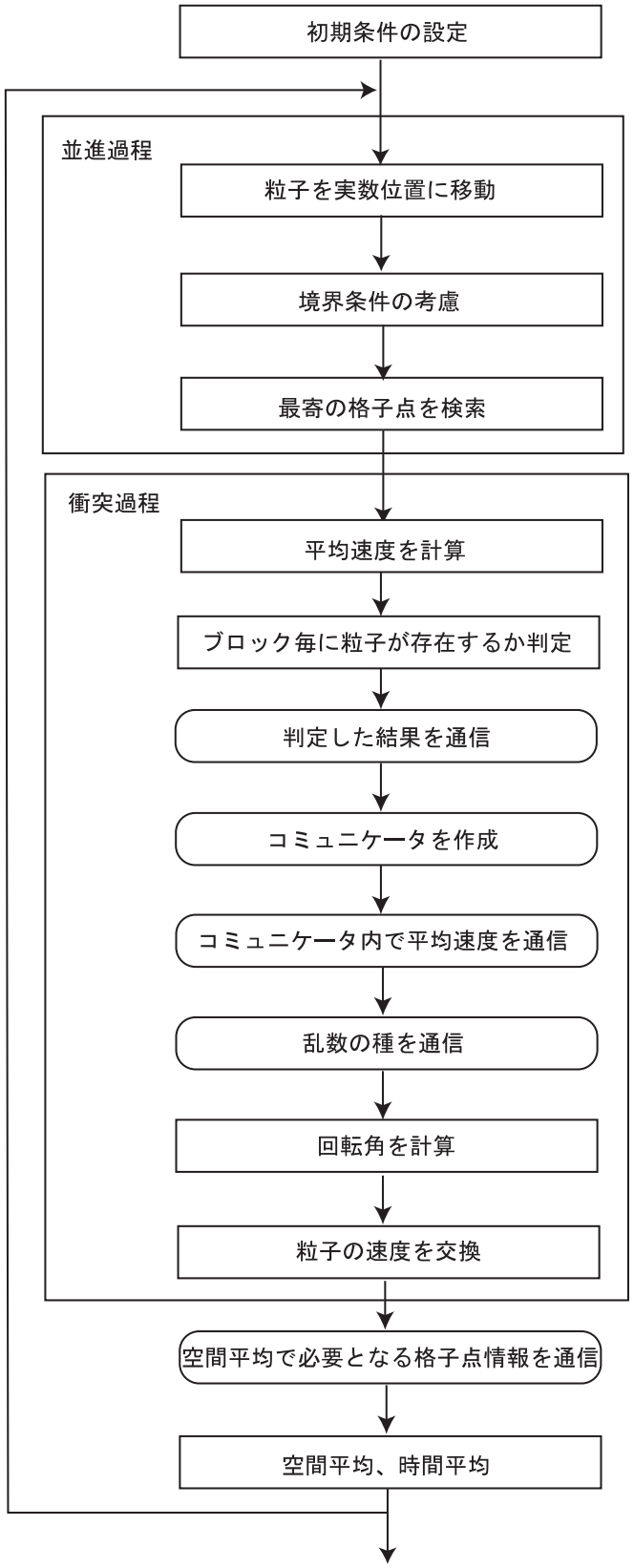

図 5.8: 8 ブロックで通信を行う場合のフローチャート

約 115%増加した。A では 8PE から 64PE に PE 数を増やした結果、計算時間が約 68%減り、通信時間は約 40%増加した。したがって A の方が PE を増やす効果が大きく、速度向上比が上がることがわかる。

5.8 考察

得られた全結果を表 5.7 に示す。

表 5.7: 実行時間の比較

プログラム	実行時間	計算時間	通信時間
A(8PE)	1.000	0.7084	0.2916
B(8PE)	72.13	1.389	70.74
C(8PE)	1.362	0.8568	0.4484
D(8PE)	1.362	1.109	0.25360
A(64PE)	0.6426	0.2309	0.4117
B(64PE)	118.1	4.278	113.9
C(64PE)	1.815	0.3517	1.463
D(64PE)	1.152	0.6029	0.5495

また、それらの通信時間に対する MPI 通信にかかる時間を表 5.8 に示す。

表 5.8: 通信時間の比較

プログラム	通信時間	Allreduce	Allgather	Communicator	Sendrecv
A(8PE)	0.2916	0.2905			
B(8PE)	70.74	20.06	0.1537	50.40	
C(8PE)	0.4484	0.3764	0.01550	0.05393	
D(8PE)	0.2536	0.2276	0.01277	0.01003	0.001088
A(64PE)	0.4117	0.4105			
B(64PE)	113.9	5.956	1.298	106.5	
C(64PE)	1.463	1.070	0.02113	0.3654	
D(64PE)	0.5495	0.5068	0.01056	0.02957	0.00087

通信量を減らす観点から、格子点毎やそれをいくつかまとめたブロック毎で通信を行うアルゴリズムを実装、実行し時間を計測したが、計算領域を 8 ブロックに分割し、8PE で実行した D を除き、A より通信時間を減らすことはできなかった。また、8 ブロックで分割した場合でも、PE 数が増えることによる通信時間の増加分が、A の方法に比べて大きくなるため、PE を増やすことによる効果が少なかった。

このような結果となる原因として考えられるのは、領域を分割して通信を行うと、データ量が減る量よりも、その通信回数の増える量が多くなることである。MPI_Allreduce において、64PE を使用した計算を行った場合、B は A よりも全通信データ量は最小で $\frac{1}{16}$ に

なる。しかし、呼び出し回数は格子点数倍になるため、今回の計算対象となる格子点数 32768($= 32 \times 32 \times 32$) 倍になる。この呼び出し回数の多さが、MPI_Allreduce にかかる時間が約 14 倍になってしまった原因であると考えられる。これは B のその他の MPI 通信にも同じことが言える。したがってすべてのプログラムの中でもっとも通信時間が多くかかっている。

C は B に比べ MPI の呼び出し回数が $\frac{1}{512}\left(= \frac{64}{32768}\right)$ となるが、A よりは 512 倍分 MPI を呼び出している。しかし、Allreduce にかかる時間は 8PE 使用時で A の 1.3 倍程度と通信量を減らした効果が出ている。

以上から、試したアルゴリズムの中で A が一番効率が良いアルゴリズムであることが検証された。これは A の MPI 呼び出し回数がもっとも少ないこと、また、空間平均について新たに通信を発生させる必要がないため、それにかかる通信時間や計算時間がないといったことが原因であると考えられる。

また、A 以外の方法は、通信データ量が A に比べ少ない。したがって、通信データ量が実行時間に大きく影響を及ぼす用な通信速度が遅い並列計算機では、これら通信データ量が少ないプログラムの方が時間を短縮できる可能性がある。

5.9 並列プログラムによる計算

並列プログラムをキャビティ流れに対して実行した。計算条件は $128 \times 128 \times 128$、数密度は 4 で計算を行った。この場合、レイノルズ数は約 50 となる。

得られた結果を中心垂直方向における x 方向速度成分と中心水平方向における y 方向速度成分を図 5.9 および図 5.10 に示す。

どちらの図でも格子点が大きい、つまりレイノルズ数が 100 に近いほど、レイノルズ数 100 の結果に近づいていることがわかる。

つまり、レイノルズ数が 100 となる、より大きな格子点で計算を行えば、定量的にも合う可能性が高いことを示すことができた。

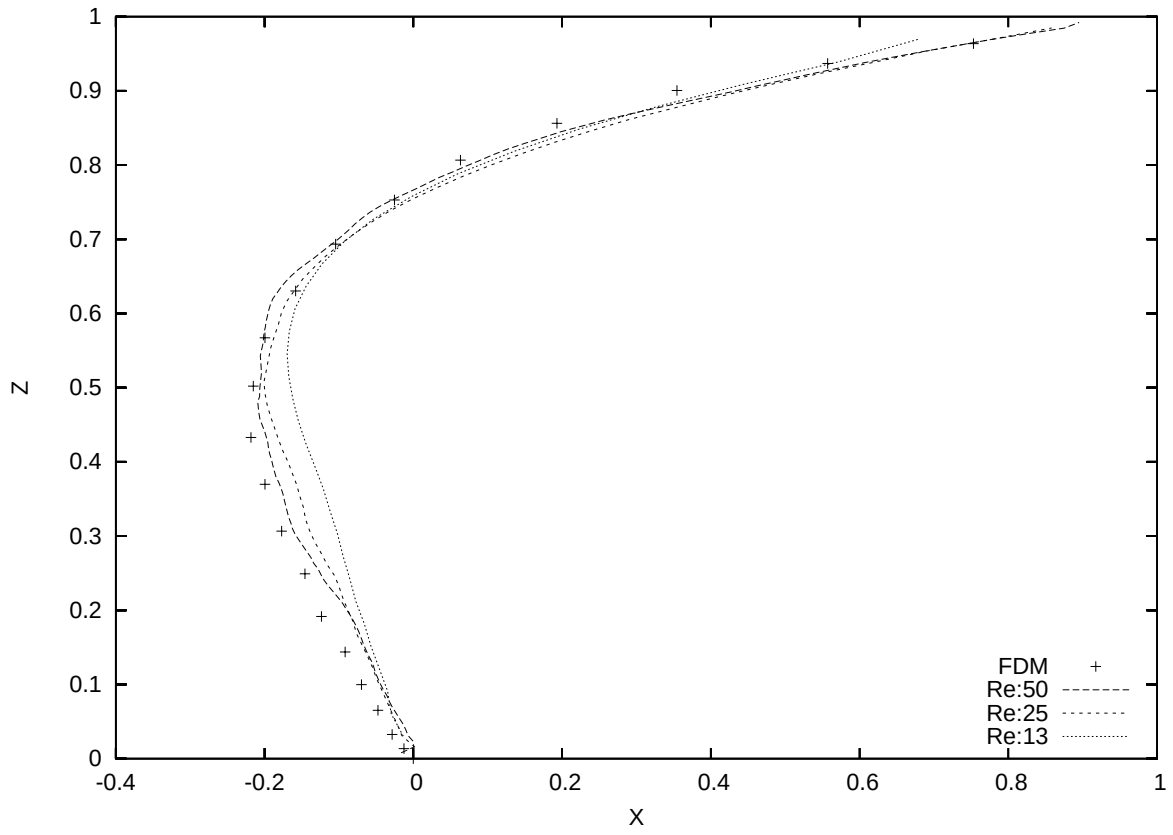
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
Z
-0.4
-0.2
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
X
FDM
Re:50
Re:25
Re:13

図 5.9: x 方向速度分布

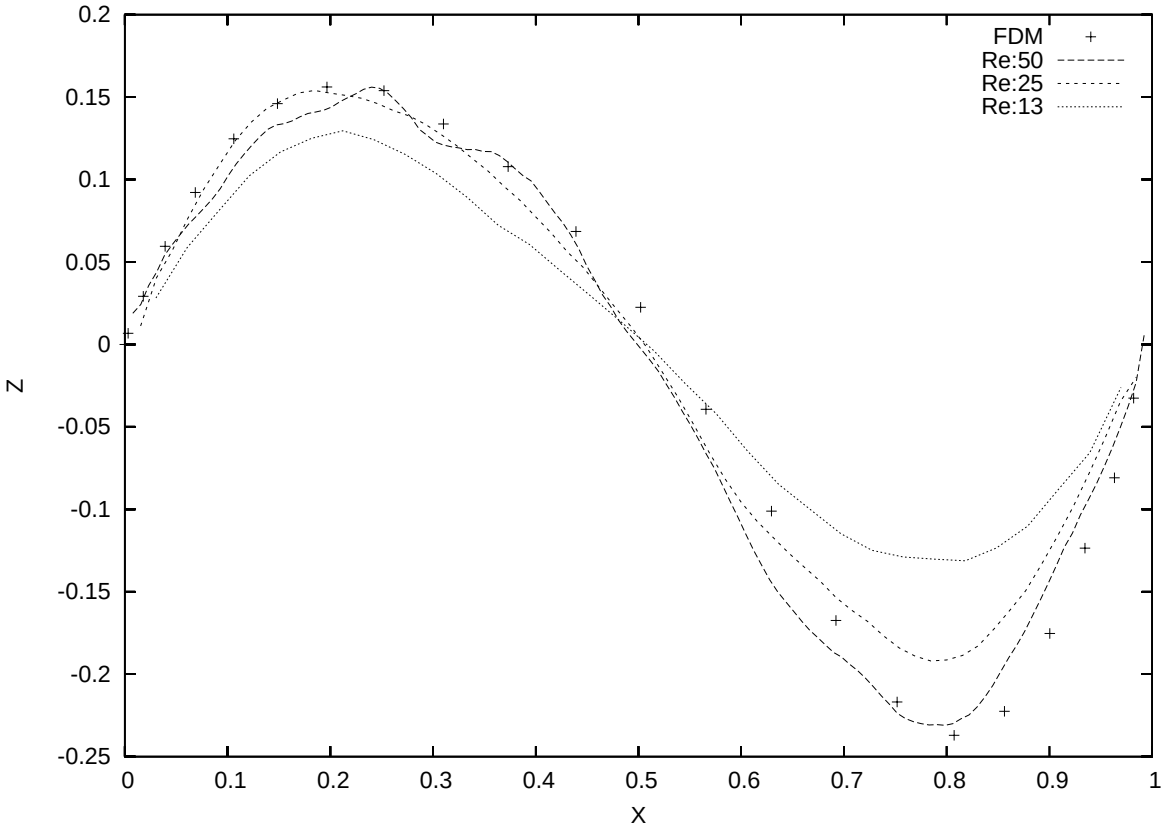

図 5.10: z 方向速度成分

第6章　結言

6.1　まとめ

本稿では、実数型格子ガス法の三次元モデルを構築した。また、その際、計算時間短縮のために並列化を行った。

三次元モデルへの拡張では、今川により構築された実数型格子ガス法の二次元モデルを基に、粒子、格子点、衝突過程における回転角や境界条件を三次元に拡張した。

次に構築した三次元モデルを計算機上に実装し、シミュレートした。計算に用いる流れはクエット流れとキャビティ流れを用いた。

クエット流れでは、上境界に移動境界条件を、下境界にすべりなし境界条件を、その他の境界には周期境界条件を用いた。計算を行った結果、中心部の垂直方向の水平速度成分を解析解と比較したところ、ほぼ一致する結果を得ることができた。また、中心部以外の位置でも同様に解析解とほぼ一致する結果を得ることができた。したがって、クエット流れでは定性的にも定量的にも満足する結果を得ることができ、また、周期境界条件が正しく機能していることを確かめることができた。また、格子点数や粒子数密度を変化させて計算した結果、格子点数や粒子数密度が大きいほど精度を良くすることができることがわかった。

キャビティ流れでは、上境界に移動境界条件を、その他の境界には滑りなし境界条件を用いた。その結果、ベクトル線図や流線図から渦の発生が確認でき、定性的に満足する結果を得ることができた。また、レイノルズ数を変えて計算を行った結果、レイノルズ数が大きいほど、中心部における速度変位が大きくなっており、定量的にも満足する結果が得られる可能性を示すことができた。

次に計算時間を短縮するために、並列化を行い、分散メモリ型並列計算機 CRAY T3E で実行した。

並列化の手法として、各 PE で粒子数を分割し、計算領域は各 PE が全領域を持つ粒子分割法を用いた。この手法で通信しなければならないデータは、衝突過程の計算で用いられる各格子点の平均速度と回転角である。この平均速度を求めるためには粒子の速度を他の PE と通信しなければならない。

この粒子の速度を通信する方法として、次の方法を考えた。

(A) 系全体を全 PE 間で通信

この手法を実装し、格子点数、粒子数密度、使用 PE 数を変化させたときの実行時間、

計算時間、通信時間を比較し、速度向上比を計算した。その結果、格子点数や粒子数密度が大きい場合ほど、速度向上比が良くなることがわかった。また、すべての場合においてPE数が増えるほど、その効率が悪くなることがわかった。この効率が悪くなる原因としてPE数が増えるほど、実行時間に対する通信時間の占める割合が高くなることが考えられた。

そこで、次に、通信時間を減少させることで実行時間を減少させることを考えた。通信時間を減らす手段として通信データ量を少なくすることや通信に関わるPE数を減らすことを考えた。そこで、次の3つの場合を考えた。

(B) 格子点毎に通信が必要なPE間でのみ通信

(C) 計算領域を64ブロックに分割し、ブロック毎に通信が必要なPE間でのみ通信

(D) 計算領域を8ブロックに分割し、ブロック毎に通信が必要なPE間でのみ通信

これら3つの方法は(A)よりも通信するデータ量が少ないが、通信のコール回数が多い。また、計算量も若干ではあるが(A)より多い。

この3つの方法を実行し、実行時間、計算時間および通信時間を(A)も含めて比較した。その結果、(B)(C)(D)のいずれの場合よりも(A)の方が実行時間が少ないことがわかった。つまり、通信時間には通信データ量よりもMPIのコール回数が大きく影響することがわかった。これにより、CRAY T3Eに関しては系全体で速度を交換し合うアルゴリズムがもっとも適している結果が得られた。

6.2 課題

実数型格子ガス法において、レイノルズ数は流れ場の代表長さ、つまり、一辺の格子点数に比例する。したがって、レイノルズ数の大きなモデルを計算するためには、格子点数を増やさなければならない。また、クエット流れのシミュレーションでの結果から、格子点数や粒子数密度が大きいほど、精度を良くすることができることがわかった。つまり、レイノルズ数が大きい流れの計算を行うことや精度の高いシミュレーションの計算を行うには、より多くの計算時間を必要とする。したがって、計算時間をより短縮する必要がある。そのためには、速度向上比がより良くなるような並列アルゴリズムを考えなければならない。

現在、速度向上比の上昇を妨げているのは、PE数が増えるにしたがって通信時間が多くなってしまうからである。計算負荷の均一な分散は確立されているので、通信時間を減らすことができれば、速度向上比を上げることができる。

したがって、今後の課題は、通信時間を減らすような並列アルゴリズムを開発することでレイノルズ数の大きなモデルを計算を行うことが挙げられる。

また、実数型格子ガス法は温度の概念を粒子の速度で与えている。このため、熱流動を伴う計算をするにあたり、特に用意しなければならないものはなく、粒子の運動を追跡す

ることで流れ場の温度を算出することができる。この点から、実数型格子ガス法は熱流動解析に適した手法であることが言える。

　したがって、サーマルキャビティ流れなど、実数型格子ガス法を用いた三次元における熱流動解析を行うことも今後の課題として挙げられる。

謝辞

本研究を行うにあたり、常に親切なご指導を賜りました 北陸先端科学技術大学院大学 松澤照男教授に感謝の意を表し、ここに厚く御礼申し上げます。

また、本研究を進めるにあたり、多くのご協力をいただいた、渡辺正宏氏、上野博芳氏、堀井宏祐氏、黒川原佳氏、永田啓吾氏、河原洋祐氏、熊迫功二氏、Chi Donghwan 氏、Chin Yuanmeng 氏、広川雄一氏、増田武範氏、渡辺丈展氏に心より感謝を申し上げます。

参考文献

[1] 今川 洋造, 実数型格子ガス法による熱流動解析に関する研究, 北陸先端科学技術大学院大学修士論文, 2001.

[2] A.Malevanets, Statistical mechanics of hydrodynamic lattice gases, Thesis for the degree of Ph.D, Dept. of Chemistry, Univ. of Tronto, 1997.

[3] A.Malevanets,R.Kapral, Continuous-velocity lattice-gas model of fluid flow Europhys.Lett.44(5), pp552–558, 1998.

[4] Hwar C.Ku,Richard S.Hirsh,Thomas D.Taylor, A Pseudospectral Method for Solution of the Three-Dimensional Incompressible Navier-Stokes Equations, JOURNAL OF COMPUTATIONAL,pp439–462, 1987.

[5] 日本機械学会編, 原子、分子の流れ -希薄気体力学とその応用-, 共立出版, 1996.

[6] F.O.Goodman,H.Y.Wachman,Dynamics of Gas-Surface Scattering, ACADEMIC PRESS, 1976.

[7] 曾根 良夫, 青木 一生, 分子気体力学, 朝倉書店, 1994.

[8] 保原 充, 大宮司 久明, 数値流体力学 -基礎と応用, 東京大学出版会, 1992.

[9] 秋丸 春夫, 鳥脇 淳一郎, 現代 確率論の基礎, オーム社, 1983.

[10] 阿部 龍蔵, 統計力学 [第 2 版], 東京大学出版会, 1966.

[11] 神山 新一, 佐藤 明, モンテカルロ · シュミレーション, 朝倉書店, 1997.

[12] 宮武 修, 脇本 和昌, 乱数とモンテカルロ法, 森北出版, 1978.