

粒子分割法による実数型格子ガス法を用いた三次元並列計算

A 3-D parallel computation for the continuous-velocity lattice-gas Model using particle division method

今村 太郎, 北陸先端大, 石川県能美郡辰口町旭台 1-1, E-mail : tarou-i@jaist.ac.jp

松澤 照男, 北陸先端大, 石川県能美郡辰口町旭台 1-1, E-mail: matuzawa@jaist.ac.jp

Taro Imamura, JAIST, 1-1 Asahi-dai Tatsunokuchi Ishikawa, Japan

Teruo Matsuzawa, JAIST, 1-1 Asahi-dai Tatsunokuchi Ishikawa, Japan

The continuous-velocity lattice-gas Model is an analysis technique of the incompressible flow advocated by Mr.A.Malevanets. Thinking about the calculation of the three-dimensional model by this technique, a lot of computation time is needed because computation time increases in proportion to the number of lattice points and the particle number. However, the calculation in this technique is explicit, and computation time can be shortened by making the parallel calculation. Then, the particle division method to which the load is uniformly distributed is done.

1. 背景

実数型格子ガスは A.Malevanets 氏によって提唱された非圧縮性流れの解析手法である。この手法は、差分法や有限要素法といった流体運動を数値的に解析する手法とは異なり、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ることにより、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。また、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。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操作で記述される。

この手法による三次元モデルの計算を考えた場合、計算時間が格子点数と粒子数に比例して増大する。しかし、この手法における計算は陽的であり、計算を並列化することにより計算時間の短縮が行える。

しかし、この手法による3次元における具体的な計算を扱った研究はまだなされていない。そこで、実数型格子ガス法による3次元計算モデルを構築した後、各 Processor Element (以下 PE) で計算させる粒子数を均一に分割する粒子分割法を用いて三次元モデルの並列化を行い、その得られた結果からその考察を行う。

2. 理論

実数型格子ガス法は、粒子が衝突と並進を繰り返すことにより計算が進行する。また、対象となる気体は、理想気体を仮定している。

2.1 初期条件

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

$$f(c)dC = \left(\frac{1}{2\pi T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2T}\right) dx dy dz$$

$$= \frac{1}{2\pi T \sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2T}\right) dx dy dz$$

に従う。ここで、

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

であることを考慮し、

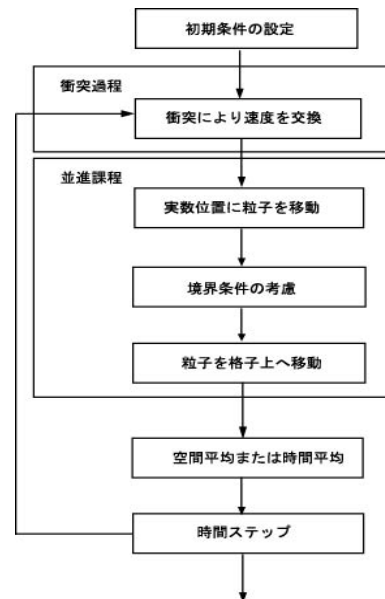


Fig1.flowchart

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

同様に、

$$h(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{y^2}{2T}\right)$$

$$i(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{z^2}{2T}\right)$$

とすれば、

$$f(C)dC = g(x) \cdot h(y) \cdot i(z) dx dy dz$$

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よい。

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

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

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

ここで、 $R_1 \sim R_6$ は $[0,1)$ の一様乱数である。

2.2 衝突過程

同一格子点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。 \mathbf{v}_i と \mathbf{v}'_i を衝突前と衝突後の衝突粒子の速度、 \mathbf{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 σ は格子ごとに異なる。

$$\mathbf{v}'_i = \mathbf{V} + \sigma(\mathbf{v}_i - \mathbf{V})$$

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 軸に関し、それぞれ θ 、 ϕ 、 ψ の回転を表す行列を σ_x 、 σ_y 、 σ_z とすると、回転行列 σ は、
 $\sigma =$

$$\begin{pmatrix} \cos\phi\cos\psi & b(\sin\phi\cos\psi + \sin\psi) & a(\sin\phi\cos\psi - \sin\psi) \\ \cos\phi\sin\psi & b(\sin\phi\sin\psi - \cos\psi) & a(\sin\phi\sin\psi + \cos\psi) \\ \sin\theta & b\cos\phi & a\cos\phi \end{pmatrix}$$

となる。ここで $a = \sin\theta$ 、 $b = \cos\theta$ である。

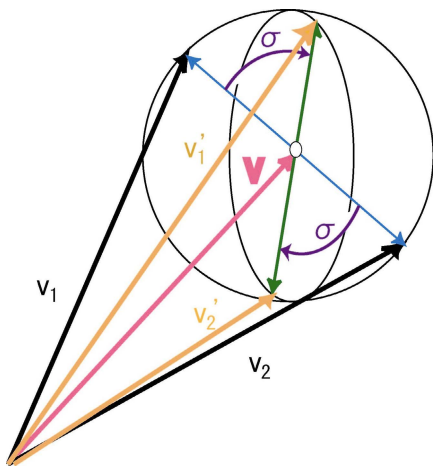


Fig.2 Collision transformation for two particles in 3-D

2.3 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。粒子は、1ステップ毎に必ず1回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)に移動させる。

しかし、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、最寄りの格子点において衝突ルールに従い、速度を変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いう報告がなされている。

本研究では、確率を用いて粒子を格子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り、計算速度が上がる利点があるため、この移動ルールを採用する。

2.4 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、球境界条件を以下のように与える。

2.4.1 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、

$$(v_x, v_y, v_z) \rightarrow (-v_x, -v_y, -v_z)$$

とすることで、この境界条件を満たすことができる。

2.4.2 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。

2.4.3 温度を持つ境界

温度を持つ境界条件として、今回の計算では、動分子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。

壁表面に入射した気体分子が完全に表面温度 T 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次のようになる。

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

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、

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

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

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

と表すことができる。

2.4.4 移動境界

移動境界では、境界がある速度で移動している。これは温度を持つ境界にその速度を加えることで実現できる。

2.5 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。

2.6 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。

2.7 格子点と境界の配置

実数型格子ガス法では、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、空間平均をとる際に影響をおよぼす可能性がある。そのため今回の計算では、格子点を境界上に配置せず、境界を挟むように配置した。

2.8 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 ρ (粒子数) を一定に与える
- 粒子の速度は温度 T 、平均速度 0 の Maxwell 分布に従う乱数を生成し、与えるとする。

2.9 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、

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

で与えられ、Reynolds 数は代表長さを L 、代表速度を U とすると、

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

で与えられる。

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。

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

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

$$\rho(l) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i \|\zeta_i\|^2 \delta(l - \xi_i)$$

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、

$$T = \frac{1}{T} \sum_i \frac{v_i^2}{2}$$

と与えられる。

流体の音速 c_s は、

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

で与えられる。

圧力は理想気体を仮定しているため、

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

となる。ここで、 T_{local} は局所温度である。

3. 並列化

並列処理を行うことで、計算の高速化を図り、格子数や粒子数の大きなモデルにも対応できるようにする。

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、粒子密度の不均一性から、各 PE での計算負荷の差が大きくなる。そこで、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方法が考えられるが、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、密度が高いところでは計算領域が小さくなり、他の PE 間との通信量が増えてしまうなど、均一な負荷分散を考えた場合、実現が困難な点が多い。

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 での計算負荷はある程度、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。

3.1 並列化手法

本研究では各 PE に均一に粒子数を割り振り、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。

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て。

格子点における平均速度は、各 PE が全領域を持っているため、まず、各 PE 毎に各格子点での平均速度を計算し、得られた平均速度を他のすべての PE で求められた平均速度と加えることで求めることができる。

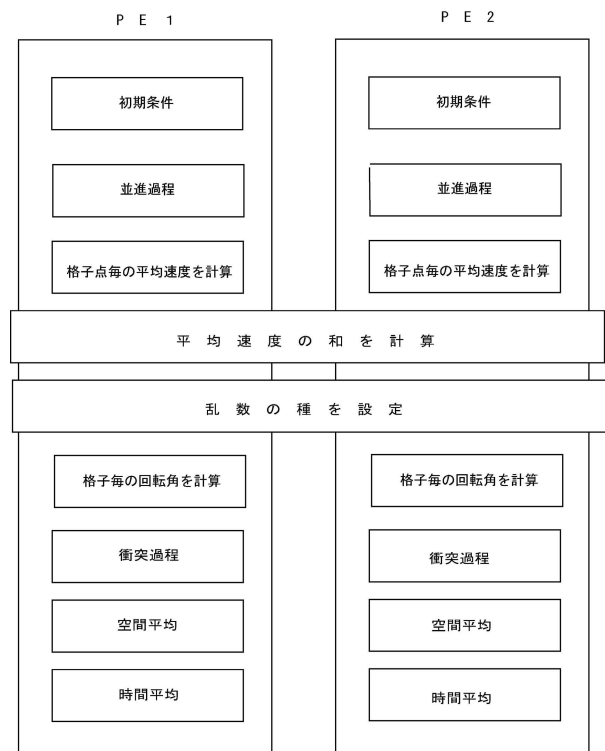


Fig.2. Particle Division Method

また、各格子点毎で決まる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、ある規則に基づいて並べられた数列である。つまり、乱数の種を明示的に与えることで、PE間通信をせずとも、同じ乱数列を取り出すことができる。この方法を用いると、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に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。

したがって、この方法を用いることで、PE間の通信を格子点ごとの平均速度、および乱数の種だけに抑えることができる。

また、空間平均を並進過程後ではなく衝突過程後に計算すると、衝突過程では平均速度は変わらないため、この平均速度を用いることで通信量および計算量を減らすことができる。

4. 計算条件

三次元キャピティ流れのシミュレーションを行った。用いた境界条件は立方体の上面の1境界に移動境界、その他の境界には滑りなし境界条件を用いた。また、移動境界の移動速度は0.5を与えた。

まず、格子数と計算時間の関係性を調べるために、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数と計算時間の関係性を調べた。

5. 結果および考察

計算によって得られた流れのベクトル図をFig.3に、流線を加えた図をFig.4に示す。これらの図で中心やや上方に渦が発生していることがわかる。また、並列計算の効果を見るために速度向上比をFig.5に示す。Fig.5の凡例で左の数値は格子点数、右の数値は数密度を示している。また、格子点16、数密度16の流れ場の各PEでの計算時間と待ち時間および通信時間の関係をPE1の場合の全計算時間(Total CPU time)を1としてFig.6に示す。

Fig.5からPE数が多くなるほど計算効率が上がらなくなっている事がわかる。また、計算効率が悪い流れ場ほどあるPE数から逆に計算時間が長くなってしまっていることがわかる。この原因は、PE数が多くなるほど、Fig.6の待ち時間および通信時間(Network time)を含めない計算時間(CPU time)に対し、通信時間の割合が大きくなるためであると考えられる。

そこで、各計算において全体の計算時間に対して通信時間が占める割合について格子点数を変化させた場合をFig.7に、数密度を変化させた場合をFig.8に示す。いずれもPEが1のときの全計算時間を1としており、図中の凡例はFig.5と同じ形式で描かれている。

Fig.7では、同じPE数で格子点数を比べた場合、格子点数が多いほど、全体の計算時間に対する通信時間の割合が少なくなっていることがわかる。

同様に、Fig.8では同じPE数で数密度を比べた場合、数密度が高いほど、全体の計算時間に対する通信時間の割合が少なくなっていることがわかる。

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られる。

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。

今後は、このモデルを用いてより計算空間が大きいモデルの計算を行う。また、速度向上比をより向上させるために、通信量が少なくなるアルゴリズムを考え、実装する。

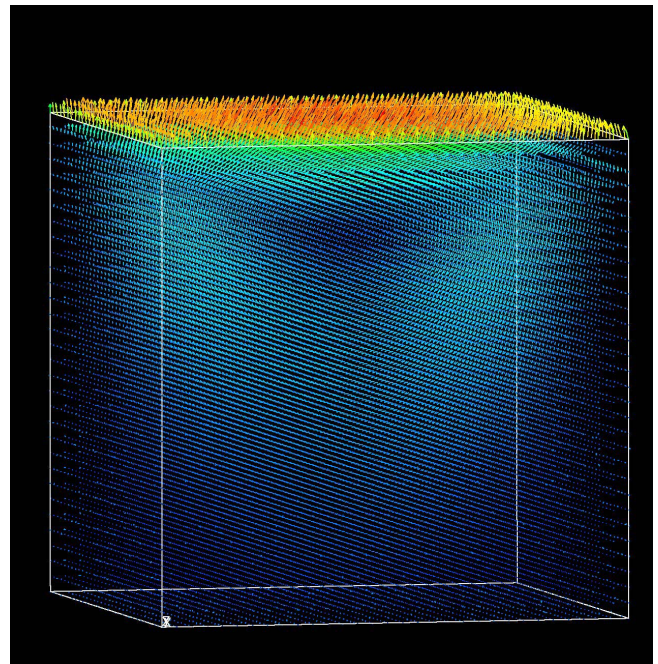


Fig.3 Velocity field

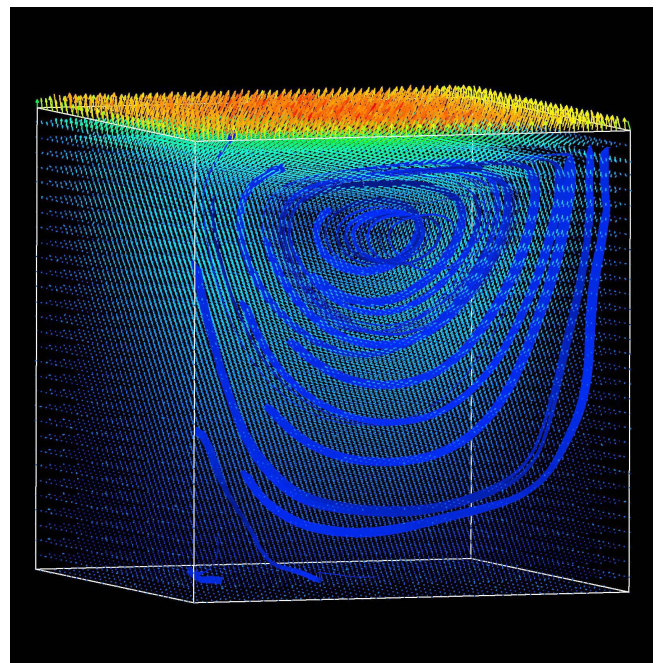


Fig.4 Streamline

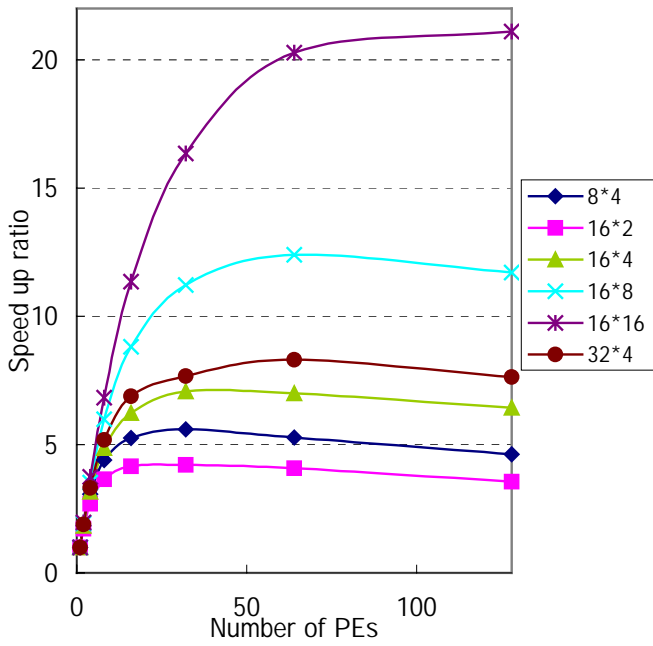


Fig. 5 Speed Up ratio

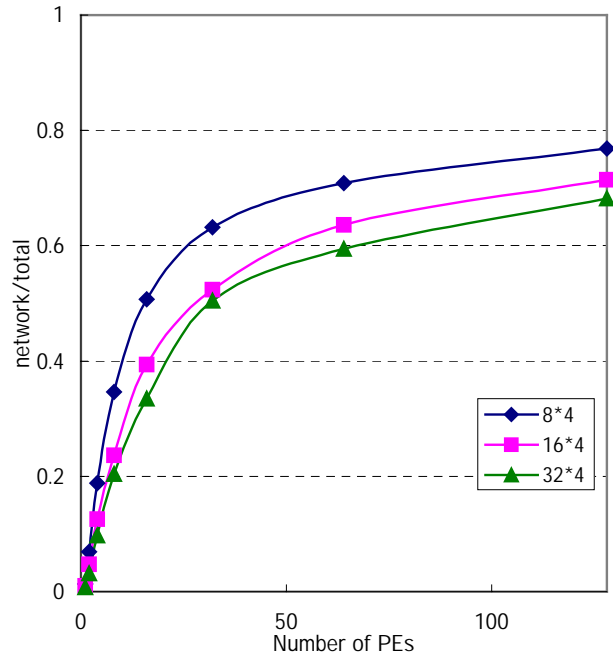


Fig.7 Network time per Total CPU time (1)

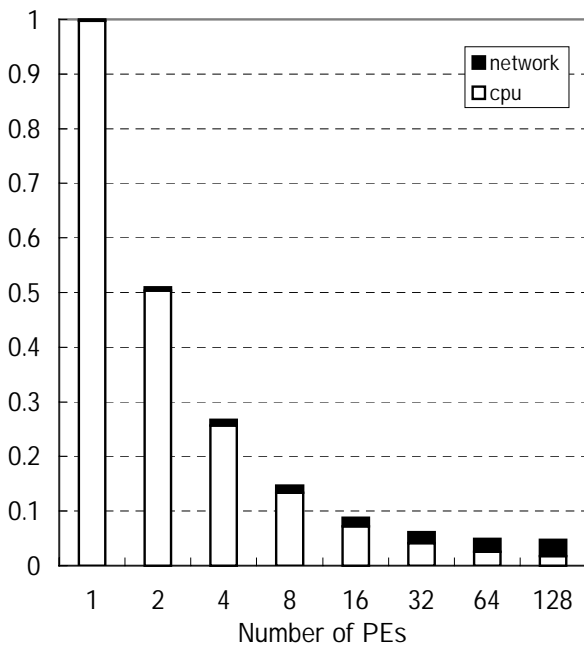


Fig.6 Relationship between CPU time and Network time

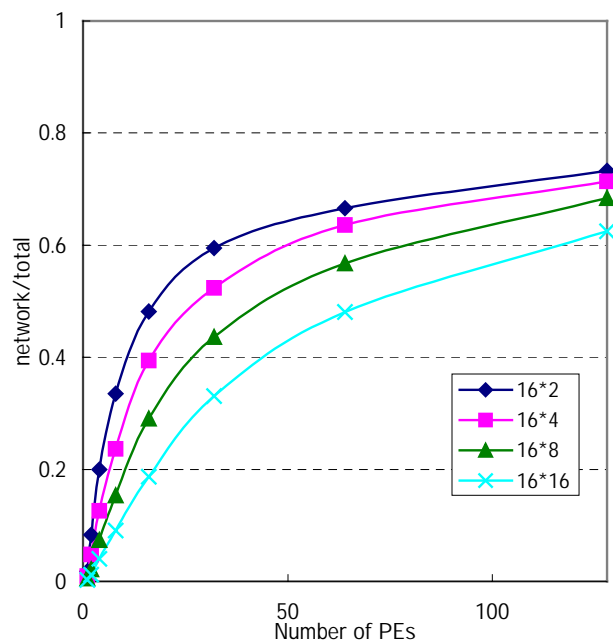


Fig.8 Network time per Total CPU time (2)

参考文献

- (1) A.Malevanets, "Statistical mechanics of hydrodynamic lattice gases" Thesis for the degree of Ph.D, Dept. of Chemistry, Univ. of Tronto (1997)
- (2) 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", 第14回数値流体力学シンポジウム.
- (3) 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)
- (4) 神山新一, 佐藤明, "分子動力学シミュレーション", 朝倉書店(1997)