

[研究開発公募の成果]

“多段 2 体衝突法” による流体粘性の制御効果

— 「超 SIMD ビット演算法による低消費電力流体シミュレーションコードの開発」における中間成果の定性的解説—

松岡 浩^{*1,*2}、菊池 範子^{*1,*3}

*1 東北大学電気通信研究所(情報社会構造研究分野)

*2 理化学研究所計算科学研究機構

*3 カストマシステム株式会社システム事業部

東北大学サイバーサイエンスセンターの研究開発公募制度を利用して、格子ガス法による流体シミュレーションコードの開発を行ってきた。とくに、平成 22 年度は、格子点数を増やさずに流体粘性を小さくして、より高いレイノルズ数領域の流体现象をシミュレーションできる、新しい流体粘性制御法の研究を行った。その結果、各格子点において、次の並進移動に進む前に、仮想粒子の 2 体衝突を何段階も行わせる“多段 2 体衝突法”によって、それなりの効果を発現できることを確認した。今回は、この事実を確認するために用いた 3 次元格子ガス法計算モデルの概要と、実際に SX-9、2 ノード(32CPU)を利用して行ったシミュレーション事例の結果について定性的な解説を述べる。

1. はじめに

筆者らは、平成 15 年度から格子ガス法シミュレーションコードの独自開発を進めてきたが、東北大学サイバーサイエンスセンターの研究開発公募制度を利用して、平成 20・21 年度に「揺動散逸モデル付き微小整数型格子流体法シミュレーションコードの開発」、平成 22・23 年度に「超 SIMD ビット演算法による低消費電力流体シミュレーションコードの開発」という課題を実施した。前者の課題では、2 次元流体シミュレーションコードを完成させ、現在実施中の後者の課題では、新しい粘性制御法の考案とそれを組み込んだ 3 次元流体シミュレーションコードの開発を目指している。今回は、我々が検討している新しい粘性制御法のひとつである“多段 2 体衝突法”について、これまでに得られた中間成果を定性的にご紹介したい。定量的な考察は現在推進中である。

2. 格子ガス法の魅力

一般に「流体シミュレーション」と言えば、ナビエ・ストークス方程式を差分法で解く方法^[1]が王道である。しかし、筆者らが、あえて“格子ガス法”にとどまって研究を続けている理由は、格子ガス法がもつ以下の魅力を捨てがたいからである。

① しっかりした理論的根拠と秘めた将来性

格子ガス法は、空間中に仮想的な格子を張り、その格子上で多数の仮想粒子が並進と衝突を繰り返しながら移動していく様子を平均化して流体運動を模擬する手法である。格子の目と同じ大きさのサブマクロのスケールでは、仮想粒子の移動が格子の張られた方向に限定されるなど、このモデルは、現実世界を忠実に模擬できていないことは明らかである。しかし、適切な格子形状と適切な粒子速度をモデルとして選択すれば、多数の仮想粒子の動きを平均化して得られるマクロのスケールにおいて、ナビエ・ストークス方程式など流体に関する現象論的な基

礎方程式を近似的に満足することが証明されている^[2] (証明例: チャップマン・エンソグ展開)。すなわち、格子ガス法は、近似的には、しっかりした理論的根拠をもつ流体シミュレーション手法である。このような手法は、マクロな物理現象の法則が解明されていない場合にも、ミクロな仮想粒子の衝突規則などに基づく自己組織化の結果として、マクロな現象を再現できる潜在的な可能性がある。これは、ある意味で、マクロな物理法則よりも深遠な物理の本質にせまるもので、不規則性の再現も含めた非平衡系統計力学のシミュレーションツールとして将来性が期待できると思われる。

②誤差のない数値計算と計算安定性

格子ガス法では、各格子点において仮想粒子が持ちうる速度の種類が限定(3次元シミュレーションの場合でも、例えば15~30個程度)されている。このため、各格子点の状態記述に当たっては、それぞれの速度ごとに、その速度をもつ仮想粒子が存在する(1)か、否(0)か?の2値情報を2値整数で表現すればよい。また、各格子点における仮想粒子の衝突による移動向き等の変更についても、2値整数に対するビット演算 (and, or, not, shift 等) を適用でき、時間発展計算に実数を使用しなくて済む。従って、実数演算の場合に生じる打ち切り誤差の蓄積がないので、格子ガス法の計算モデル自体は、誤差なく計算することができる。また、数値計算的にも安定である。

③極めて高い並列度の格子点計算の実現容易性

各格子点の状態を小さなメモリ容量で記述できるので、同一のメモリサイズでは、より多数の格子点状態をまとめて並列計算できる。従って、実時間を目指した高速計算に有利である。特に、筆者らが自主開発してきた格子ガス法シミュレーションコードでは、個々の格子点に関する一連のデータ処理を1ビット幅で実行できる。このため、SX-9のようなベクトル処理プロセッサでは、1回のベクトル命令発行で、64ビット/ワード×256ワード/命令=16384ビット/命令のデータがSIMD処理(Single Instruction Multi Data-stream)されることから、16384個の格子点に係る計算を1CPUで並列的に実行できることになる。我々の研究では、サイバーサイエンスセンターのSX-9、2ノード(32CPU)を頻繁に用いているが、この場合、16384×32=524288格子点についての超並列計算が可能になっている。このように非常に多数の格子点に関する並列的な計算を比較的小数のプロセッサさらには少数のノードで実行できることは、プロセッサ間通信またはノード間通信の相対的頻度を減らせる点でも有利である。

④トランジスタ数の少ない論理演算回路による低消費電力の達成

格子ガス法では、上述のとおり、ビット演算を主体にした計算処理を行えるので、VLSI上では、and, or, not, shiftなどの論理演算回路が継続的に動作すればよい。(cf. この特徴を活かしたハードウェア研究には、FPGAによる格子ガス法専用計算機の構成例^[3]や、過去に製品化された専用計算機CAM-8などの事例がある。)従って、これらの回路に比べて桁違いに多数のトランジスタから構成される浮動小数乗算演算回路などの動作を回避することができる。このため、VLSI内部の部分回路ごとに電源のオン/オフを制御できる将来のプロセッサでは、低消費電力のシミュレーションが可能になる。また、今後、大規模な流体問題を扱っていくためには、ますます大きな並列度の格子点並列計算を実現していく必要がある。このときの並列計算実行時には、個々の格子点に関する演算を行う電子回路は同時に動作しているはずであるから、ひとつひとつの格子点に係る演算回路は極めて低消費電力なものにしなければならない。この点、格子ガス法では、動作すべき演算回路を極めて単純なものにできるのでトランジスタ数を減らすという低消費電力化のための最も基本的で効果的なアプローチを採用できる。

⑤複雑形状の取扱い容易性とマルチフィジクス展開への将来性

格子ガス法では、例えば、各格子点が固体であるか液体であるかを指定するだけで、任意の

形状の境界条件を容易に与えることができる。これは、現実の複雑な体系の解析に適用しやすいことを意味しており、実用上大変有利である。さらに、格子ガス法は、仮想粒子のもつ質量や速度を、いろいろな意味でのエネルギーや運動量と解釈することにより、電磁場^[4]、音場^[5]、応力場など、流体解析以外にも幅広く利用できる可能性を秘めている。実際、いろいろな研究がなされている。これらの成果が出てくれば、いろいろなマルチフィジクスな問題を“仮想粒子の並進・衝突”というシングルフィジクスな問題として統一的に扱い、その結果、通常の連成計算よりもはるかに高速なシミュレーションを実現できる可能性がある。また、最近では、燃焼場^[6]、蒸気膜崩壊^[7]、多孔質固体内流動^[8]、シュレーディンガー方程式の電子波解析^[9]などにまで格子ガス法を応用した研究が発表されており、格子ガス法が適用できる物理現象はますます拡大される一方である。

以上、格子ガス法の利点ばかりを述べてきたが、重要な欠点もいくつか知られている。ここでは、大規模並列計算を実現していく観点からの考察として、計算すべき格子点数に関する欠点だけを以下に述べておく。

粗視化操作にともなう多数の格子点計算の不可避性

格子ガス法においては、ひとつの格子点に集まった仮想粒子の質量と運動量だけを合計して、その格子点位置にある流体の質量や運動量だということにしても、隣の格子点における同様に求めた値との間にランダムな変動が大きすぎてベクトルの向きがバラバラになり全体の流れ構造を把握できない。そこで、ある程度の広がりをもつ時空間領域内でその中にある全ての格子点に存在する仮想粒子の質量と運動量を合計して、その領域における質量や運動量を求める。この操作は、“粗視化(疎視化)”と呼ばれており、この操作を行うことによって、格子点ごとのランダムな変動が領域内で打ち消しあって、隣の領域における同様に求めた値との間に連続性が現れ、全体の流れ構造を知ることができる。ナビエ・ストークス方程式を差分法で解く通常の王道的流体解析と比較する場合は、格子ガス法の領域ひとつひとつがナビエ・ストークス法の格子点に対応しているため、格子ガス法では、通常の方法と比べて、何倍もの数の格子点について計算を行わなければいけないことがわかる。すなわち、ある解像度で流体の運動を求めようとする場合、格子ガス法では、求めたい流体運動の解像度よりもさらに一段細かい解像度で配置される格子点について計算を行う必要がある。従って、格子ガス法が非常に多数の格子点について効率的な並列計算が可能であるからと言っても、同じ解像度の流体解析を行う場合に、どちらの方が速く計算できるかは即断できない状況にある。

最後に、レイノルズ数との関係について触れておきたい。格子ガス法では、粗視化領域の時空間の大きさが大きいほどレイノルズ数が高い流体现象のシミュレーションが可能になる。これは、直感的に言えば、粗視化領域の大きさが大きくなるほど、隣どうしの粗視化領域の中心間距離が離れ、その間により多数の格子点が存在していろいろな衝突を経て運動量が伝わっていくことになるので、両者間の運動量の相関が低くなり、統計的には似た流体挙動をしなくなる、すなわち、流体としては、粘性が低下したことになる。その結果、流体挙動のレイノルズ数が高くなると解釈できる。流体解析の実用的な応用を考える場合、模擬できる流体现象のレイノルズ数は少しでも高くできることが望ましい。そのためには、上述のことから、できるだけ大きい領域での粗視化を行うため、格子ガス法シミュレーションによる格子点数を相当大きくする必要がある。従来からいろいろなところで研究課題にされていることではあるが、「格子点数を増やさずにレイノルズ数を高くする」という点が、筆者らのグループでも本質的な研究課題になっている。

そこで、今回は、平成22年度の研究開発公募による研究成果の中間報告を兼ねて、“多段2体衝突法”による粘性制御の効果について、定性的な範囲ではあるが、ひとつの事例をご紹介します。

3. 本研究で用いた3次元格子ガス法計算モデル

ここでは、例題として、静止している流体がある向きに流れはじめたとき、流れ方向に垂直に置かれた無限長円柱の後流にどのような3次元渦が過渡的に生じるのか？を計算してみる。一般に3次元の流体现象をシミュレーションするための格子ガス法については、いくつかの計算モデルが提案されているが、本研究では、1986年に d’Humières, Lallemand, and Frisch が提案した“面心超立方体格子モデル(Face-Centered Hyper Cubic モデル、FCHC モデル)”と呼ばれる計算モデル^[10]を利用した。

図1に、計算体系を示す。流体の流れの向きに+X軸を、無限長円柱の軸に平行に+Z軸を設定した。+Y軸は、3つの座標軸+X, +Y, +Zが右手系の直行座標系を成すように決めた。Y方向とZ方向には、周期的境界条件を適用し、無限にこの体系が繰り返されている状況を仮定している。3次元位置(X, Y, Z)のそれぞれには、図1の右上に示したような超立方体セルがひとつ存在する。このセルは4次元空間中の立方体で、4次元空間を利用するのが、FCHCモデルの特徴である。格子ガス法のモデルを粗視化して得られた結果が、ナビエ・ストークス方程式を解いて得られる結果と近似的に一致するためには、仮想粒子の衝突散乱にある程度の等方性が確保される必要がある。通常の3次元格子では、この条件を満足できないので、FCHCモデルでは、4次元空間中の格子を使うことにより、仮想粒子がいろいろな向きに移動できる状況を作り出して等方性を確保している。

また、ここでは、第4番目の次元をRで表し、具体的には、Rは、R=0, 1, 2, 3の4値のみしかとらないものと仮定した。Rが取り得る値は、現実の3次元空間に存在する体系からは制約を受けないので任意に決めることができる。また、R方向は、Rが3から1だけ増加すればR=0になり、Rが0から1だけ減少すればR=3になるという設定の“循環座標”とした。図1では、このR座標を3次元位置(X, Y, Z)の各位置にある球殻の半径で表現している。こうして、ひとつの3次元位置には、ひとつのセルがあり、その8つの頂点に位置する球は、それぞれ4つの球殻からなり、各球殻にたかだか1個の仮想粒子が存在するという4次元描写が可能になる。各球殻は、4次元位置(X, Y, Z, R)で表現できるので、これを“4次元格子点”と呼んでもよいであろう。

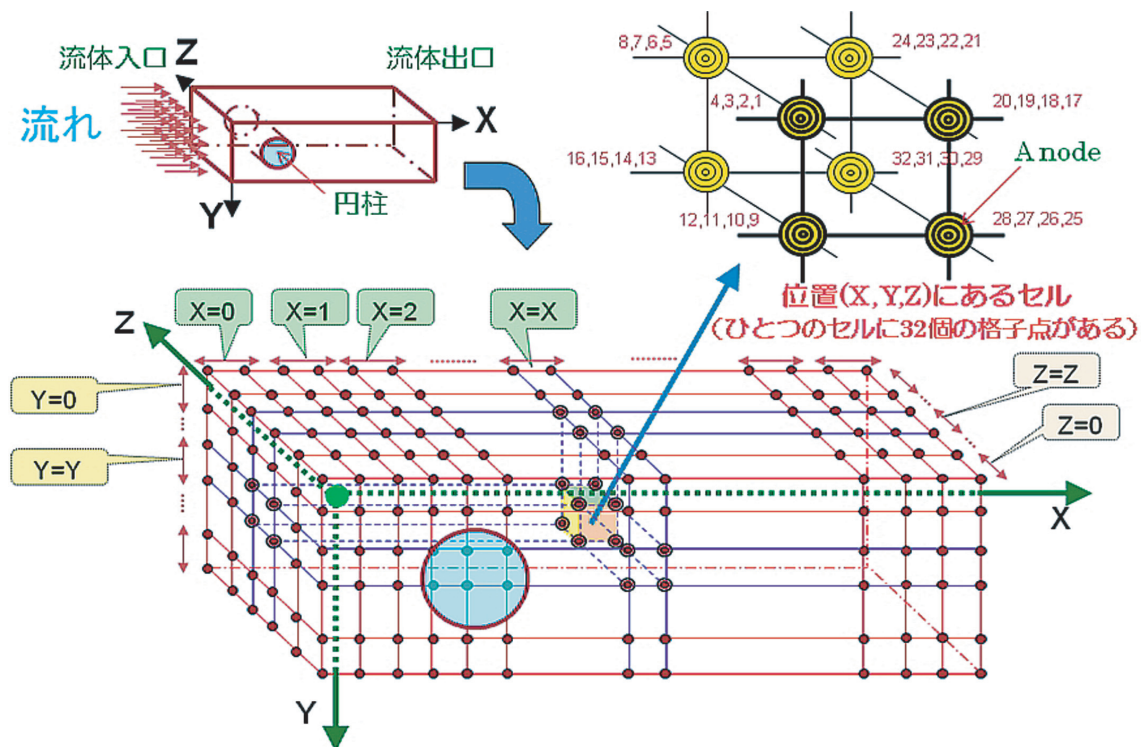
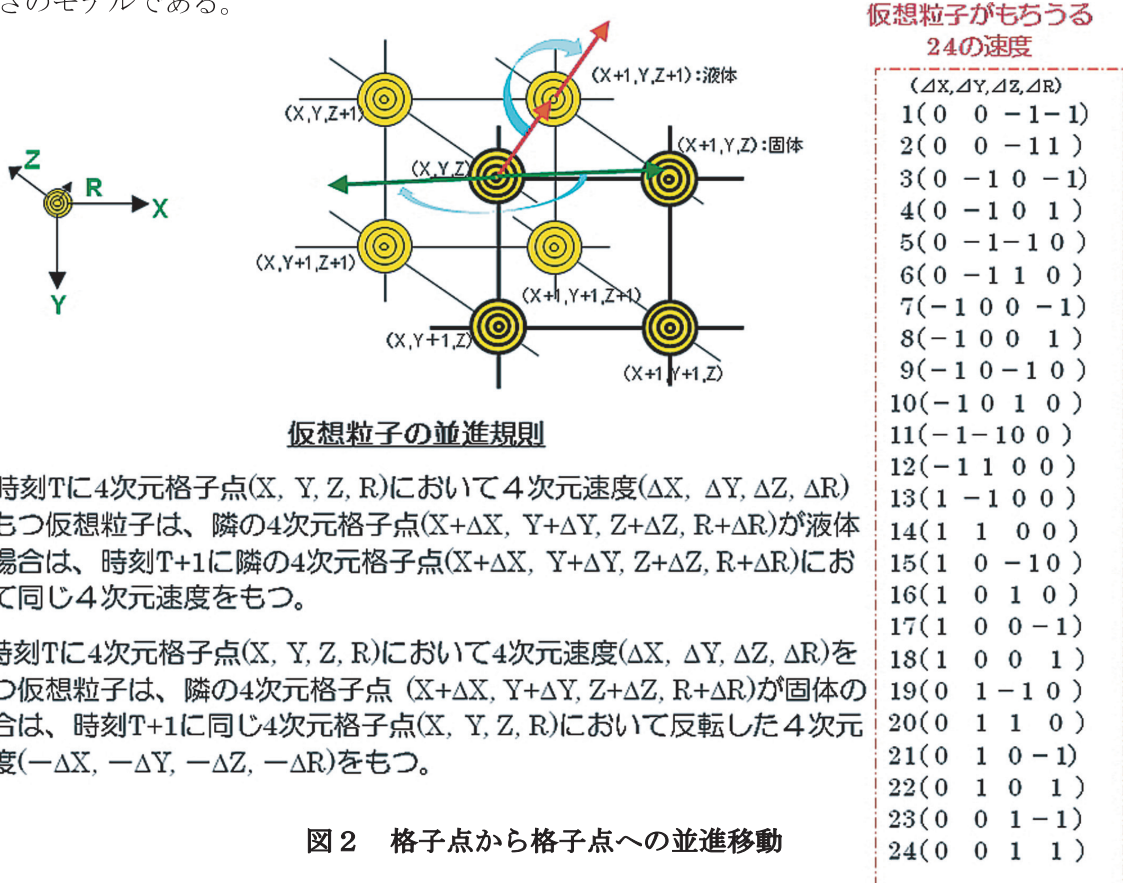


図1 円柱後流渦を計算するためのセルと格子点

図2には、4次元格子点間を仮想粒子が移動していく様子と、筆者らが用いた並進規則を示した。FCHCモデルでは、4次元格子点間を仮想粒子が移動していくので、仮想粒子の速度ベクトルも4つの成分(ΔX, ΔY, ΔZ, ΔR)から成り、4次元である。また、4成分のうち2つは必ず「0」で、残りの2つの成分は「+1」and/or「-1」とするのがFCHCモデルである。この結果、図2の右に示すように、仮想粒子は24種類の速度を持ち得ることがわかる。また、その4次元空間における大きさは、 $\{(\Delta X)^2 + (\Delta Y)^2 + (\Delta Z)^2 + (\Delta R)^2\}^{1/2} = \sqrt{2}$ となりすべて等しい、すなわち、単一速度のモデルである。



また、図3には、各4次元格子点における仮想粒子の衝突規則を示した。要点は、「仮想粒子の粒子数と、4つの各成分ごとの運動量の和が衝突の前後で変化しない」という“保存則”が成立すること、及び「同じ向きに移動する仮想粒子は、ひとつの4次元格子点にたかだかひとつしか存在できない」という“排他律”を仮定することである。

図3に示した例では、移動向きの識別番号が「5」「16」「17」「21」の速度をもつ4つの仮想粒子がある4次元格子点にやってきたとき、移動向きの識別番号が「1」「13」「14」「23」の仮想粒子に変化して、その4次元格子点から出ていく様子を示している。この衝突前後の変化では、“保存則”と“排他律”が満たされているが、これ以外の変化でも、“保存則”と“排他律”を満たすことが可能である。このような場合、その可能性があるすべての衝突パターンを等確率で生じさせる。しかし、このような衝突パターンは、全体として非常に多数存在するため、通常は、衝突して向きを変える仮想粒子が2つのみの場合を扱う“2体衝突法”が採用されている。詳細は省略するが、詳しく調べてみると、仮想粒子の識別番号が「a」と「b」の2粒子が衝突して、識別番号が「c」と「d」の2粒子になる衝突パターンを、「 $a + b \Rightarrow c + d$ 」という式で記載したとすると、282本の2体衝突式が書ける。通常は、各4次元格子点でたかだか1回の2体衝突、すなわち、282本の式のうち適用可能な2体衝突式がたかだか1本だけ適用される。(実際の計算では、体系の対称性などを利用して、できるだけ小さくしたルックアップテーブルが高速計算のために使用される。)

筆者らが試みた“多段2体衝突法”では、各4次元格子点において、たかだか1本の2体衝突式を適用したあと、次の並進移動の過程には進まず、衝突後の速度をもつ仮想粒子に対して、再び、そして何回も2体衝突式を適用する。適用する2体衝突式を選択をランダムに相当数繰り返して、はじめて、次の並進移動の過程に進ませる。これにより、各格子点に入射する前の仮想粒子の速度分布と、そこから出ていくときの仮想粒子の速度分布の間の相関が小さくなり、粘性が小さい流体挙動が発現してくると思えられる。

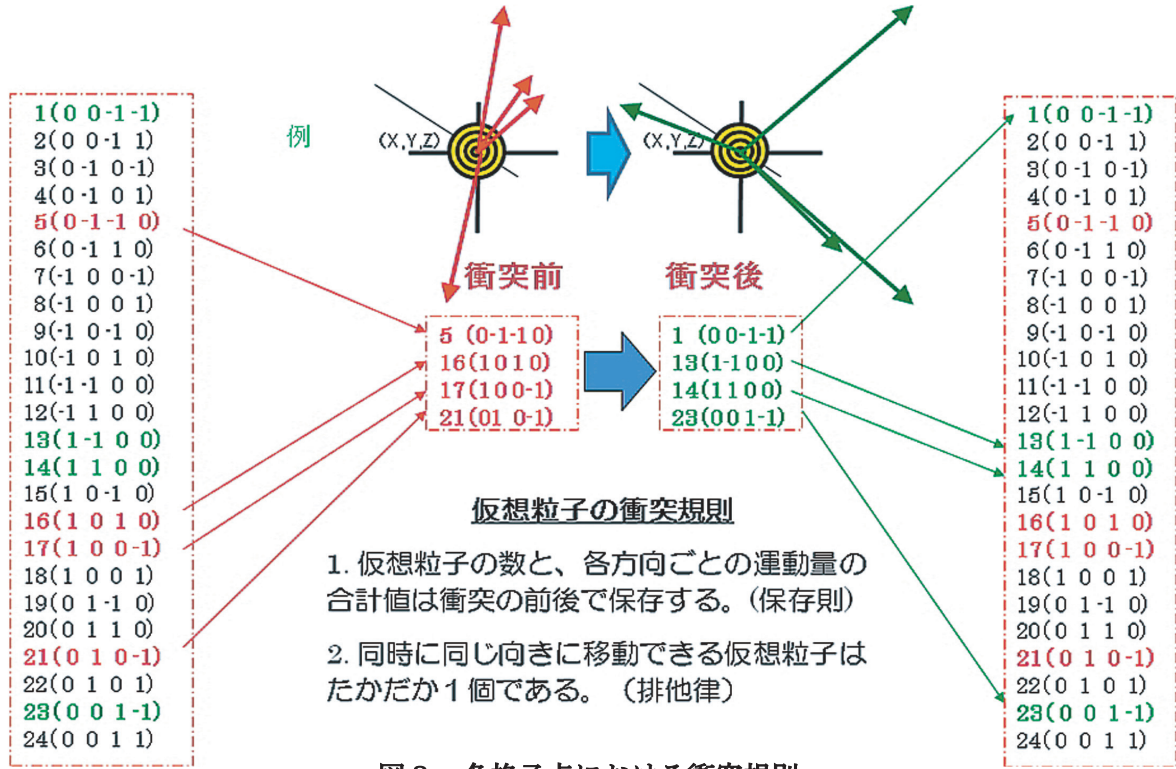


図3 各格子点における衝突規則

4. 急発進した流れ中の円柱後流渦の過渡変化解析と衝突式数依存性

東北大学サイバーサイエンスセンターのSX-9、2ノード(32CPU)を用いて行った実際のシミュレーション結果の1例を図4に示す。4次元格子点数は、 $3072 \times 768 \times 768 \times 4 \approx 72$ 億点である。

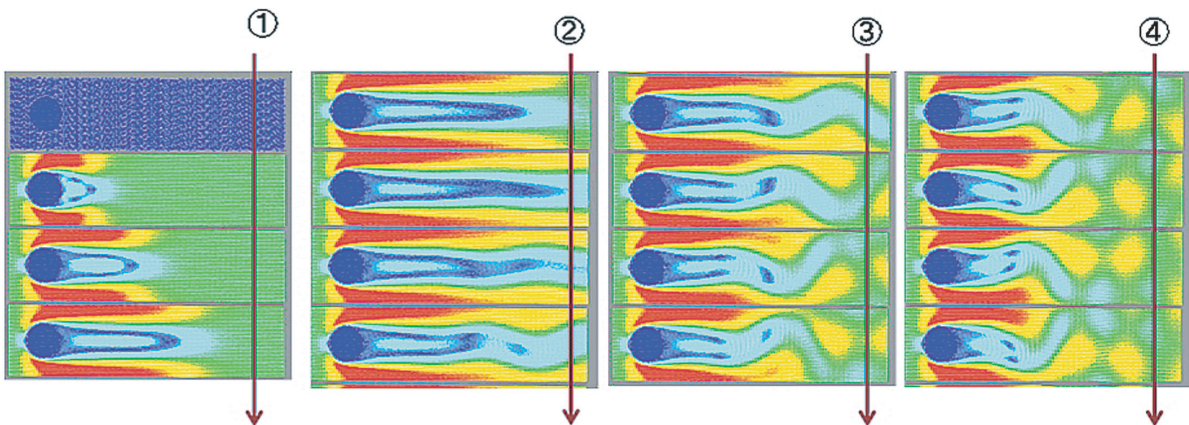


図4 無限長円柱の後流の過渡変化

図4は、図1に示した計算体系を、Z軸に垂直なある平面で切ったときのXY平面内における流体の運動量の時間変化を示している。図の色は、運動量ベクトルの大きさを示しており、小さい順に、青色→空色→黄緑色→黄色→赤色と変化する色で大きさを表現している。左上の全体が青い図が、時刻ゼロにおいて円柱まわりの流体が静止している状態である。①に示すとおり、双子渦が発生してその長さが伸びる。②に示すとおり、伸びた尾の先が揺れだす。③に示すとおり、揺れた部分が引きちぎられて、残った部分が揺れて、いわゆる“カルマン渦”に移行し、④に示すとおり、定常的な変化となる。このようなシミュレーション結果は、実験で観察されている過渡変化^[1]と比較してみると、定性的にはよく一致している。

図5は、上記の過渡変化シミュレーションを、“多段2体衝突法”において、適用する2体衝突式の本数を変えて行った結果を比較したものである。上から下へ時間が推移し、左から右に進むにつれて、適用する2体衝突式数が増加するものとする。

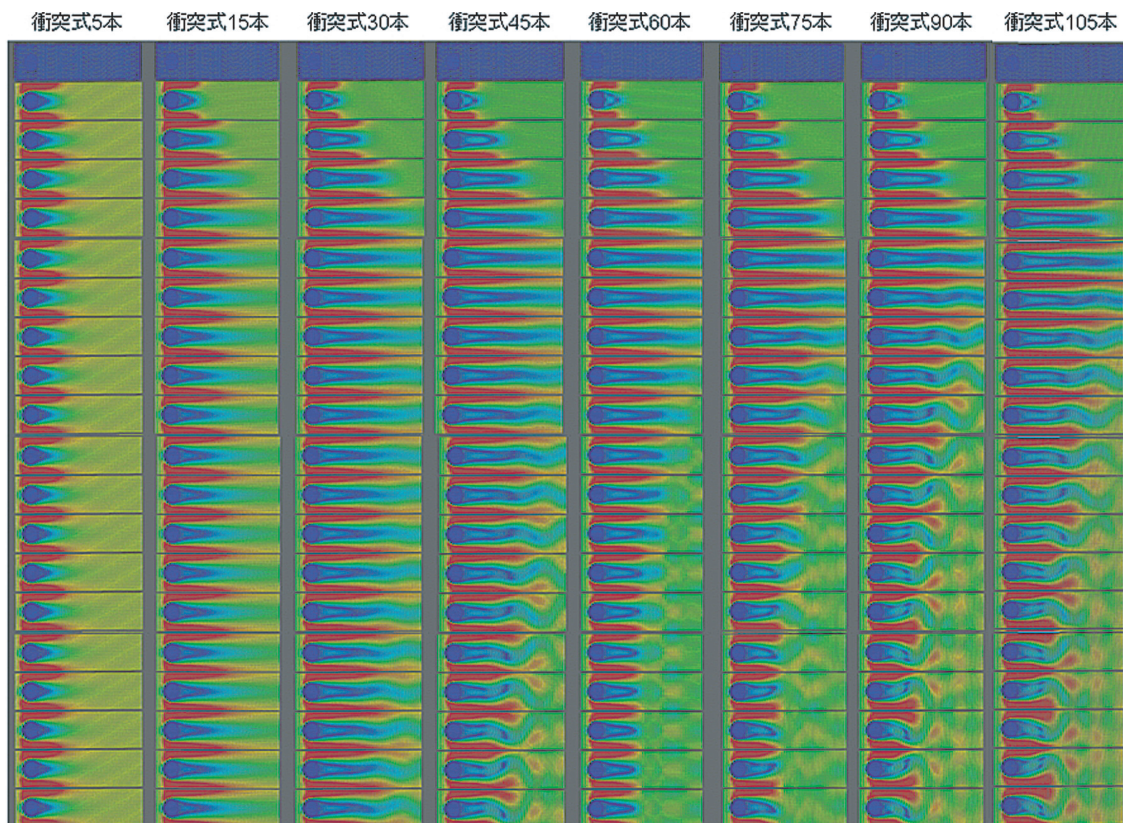


図5 無限長円柱の後流過渡変化に対する粘性制御の効果

適用する2体衝突式の本数が増すに従って、過渡変化の特徴は、以下のように変化している。

衝突式数	計算時間	過渡変化の特徴
5本	446472.216 秒	少し伸びた混沌渦。
15本	449223.944 秒	少し伸びた双子渦。
30本	447000.724 秒	15本の場合より伸びた双子渦で、尾がかすかに揺れる。
45本	448771.655 秒	30本の場合より伸びた双子渦の尾に第3の渦ができて揺れはじめ、カルマン渦へ。
60本	447954.562 秒	45本の場合よりも双子渦が伸び、尾が切れて、短い太い双子渦。
75本	450588.949 秒	60本の場合よりも双子渦が伸び、尾が切れて、短い太い双子渦ができ、その尾が揺れる。
90本	445957.043 秒	上記+カルマン渦の開始。
105本	444964.259 秒	上記+カルマン渦。

5. まとめ

以上の特徴変化から、適用する2体衝突式の本数を増やすことによって生じる効果は、流体の粘性が小さくなっていく場合の効果として現れることが定性的に観察できる。この結果、シミュレーションに“多段2体衝突法”を適用することで、格子点数を増やすことなく、つまり、計算時間を増加させることなしに、双子渦が発生するレイノルズ数領域から、カルマン渦が発生するレイノルズ数領域まで、その振る舞いを評価することが可能であることを明らかにした。

なお、今後より定量的な考察や理論的な裏付け説明が望まれるが、筆者らは、これらに関する今後の研究活動を通じて、何か新しい発想の超並列シミュレーション手法にたどり着くことを夢見ている。

謝辞

本研究の実施は、東北大学サイバーサイエンスセンターの研究開発公募制度によってはじめて可能になった。また、計算機の利用、プログラムの最適化等について、同センターのスタッフの方々はもとより、同センター担当のNECの方々から多くのご支援を頂いた。筆者らは、ここに深く感謝申し上げる次第である。

参考文献

- [1] Osamu Inoue and Akira Sakuragi, “Vortex shedding from a circular cylinder of finite length at low Reynolds numbers”, *PHYSICS OF FLUIDS* 20, 033601 (2008).
- [2] U. Frisch, D. d’Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau, and J-P. Rivet, “Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions”, *Complex Systems*, 1, pp. 649-707, (1987).
- [3] T. Kobori and T. Maruyama, “A high speed computation system for 3D FCHC lattice gas model with FPGA”, *Proceedings of the 13th International Conference on Field-Programmable Logic and Applications*, pp. 755-765 (2003).
- [4] “格子ガスオートマトンによる3次元電磁場のモデリング方法”, 特開平 11-250120, 特願平 10-350532.
- [5] M. Otani, T. Takeuchi, Y. Iwaya, H. Matsuoka, and Y. Suzuki, “Sound-Field Lattice Gas Cellular Automaton for Real-Time Acoustic Rendering,” *Int. Universal Commun. Sympo. (IUCS2010)*, pp. 288-231 (2010).
- [6] 山本和弘, 小沼義昭, “格子ガスオートマトン法による燃焼場の数値計算”, *日本機械学会論文集(B編)* 67 巻 663 号(2001年11月).
- [7] 栴尾大輔, 阿部豊, 松隈洋介, “3次元格子ガスオートマトン法を用いた高温粒子表面上の蒸気膜崩壊挙動に関する数値シミュレーション”, *日本原子力学会和文論文誌*, Vol. 7, No. 4, pp. 321-327(2008).
- [8] 栴尾ら, “3次元格子ガスオートマトン法を用いた高空孔率多孔性固体の流動特性解析”, *日本機械学会論文集B編*, 68 [666], 35-40 (2002).
- [9] 酒井敦, 鎌倉良成, 谷口研二, “量子格子気体法によるデバイス内部の電子波伝搬解析”, *信学技報, TECHNICAL REPORT OF IEICE*. VLD2002-72, SDM2002-178 (2002年9月).
- [10] D. d’Humières, P. Lallemand, and U. Frisch, *Europhys. Lett.*, 2 (1986) p. 291.
- [11] 種子田定俊, “画像から学ぶ流体力学”, 朝倉書店, p. 45 及び p. 47.