

論文の内容の要旨

論文題目 「専用計算機を用いた DSMC シミュレーションの高速化に関する研究」

氏名 歌野原 陽一

希薄気体力学における計算手法としてよく用いられているものに、DSMC(Direct Simulation Monte Carlo)法がある。DSMC 法はサンプル分子と呼ばれる粒子の挙動を追跡することで流れを調べる計算手法である。DSMC 法は、一般的な流体の数値計算法に比べ計算に多くの時間を費やし、特に分子の衝突計算はかなりの計算量となる。ゆえに、衝突計算を高速化できれば DSMC 法全体の計算効率を向上させることができる。

一般に、シミュレーションの高速化に関する研究は、アルゴリズムの改良や近似による計算量の軽減といった、ソフトウェアの面からのものが大半である。一方で、計算機の内部にまで立ち入って、シミュレーションに最適化された専用計算機を開発するといった、ハードウェアの面からの研究も行われている。具体的には、杉本、牧野らは重力多体系シミュレーションにおいて、計算量の多い部分を計算する GRAPE 計算機を開発し、シミュレーションの高速化を実現している。

DSMC 法の高速化に関する研究では、専用計算機開発という方法はこれまで行われていない。そこで本研究では、実現可能な専用計算機を開発し、それを基に、DSMC 法の高速化のためにはどのような構成の専用計算機が適しているかを検討することを目的としている。

第 1 章では、科学技術計算において用いられている高性能な計算機について概観し、近年注目を浴びつつある専用計算機開発の有用性について述べる。また、DSMC 法を高速化する手段として、専用計算機の開発は有効であるか検討することを目的に設定する。検討に当たって、実際に専用計算機の作成を行った。作成した専用計算機は、計算量の多い部分を専用計算機が計算し、それ以外の部分をホスト・コンピューターが計算するという、GRAPE 型専用計算機にした。

本専用計算機の高速化のためには、演算回路を 1 つの IC に詰め込み 1 チップ化することが望ましい。つまり、衝突計算を行う演算回路を 1 チップに詰め込んだ専用計算機の開発が望ましい、ということになる。しかし、現在手に入る IC の容量の限界のため、衝突計算全体の演算回路を 1 チップ化することは難しい。よって、衝突計算全体ではなく、衝突判定に限定した専用計算機を開発することにした。

第 2 章では、本専用計算機を説明するにあたり必要となる範囲で、希薄気体における諸関係式および DSMC 法の概略について述べる。DSMC 法の主要な計算部分は、サンプル分子の自由運動、indexing と呼ばれる操作、サンプル分子同士の衝突計算(衝突判定、衝突後速度計算)である。DSMC 法の衝突計算アルゴリズムには最大衝突数法を採用した。

第3章では、本専用計算機の仕様や設計方針について述べる。

本専用計算機の演算回路は、パイプライン処理を利用して高速化を試みている。演算回路の作成には PLD(Programmable Logic Device)というデバイスを用い、1チップ化を行った。インターフェースには比較的高速な PCI を採用した。ホスト・コンピューターには OS として Linux を搭載した PC/AT 互換機を使用した。DSMC 法はモンテカルロ法であり、衝突判定を行うにおいて乱数が必要となるので、本専用計算機上に乱数発生器を搭載した。また、発生させる乱数のランダムさを調べるため、乱数のランダムさを検定し、満足の行くランダムさが得られていることを確認した。

第4章では、作成した本専用計算機の詳細について解説する。

本専用計算機は、衝突判定を行う演算ユニットを搭載した演算ボードと、衝突判定に必要な速度データを格納する SRAM を搭載したメモリボードとで構成されている。それぞれのボードの詳細な仕様について述べ、また本専用計算機を用いた衝突判定の動作手順について述べた。

ホスト・コンピューターと本専用計算機間のデータ転送は、デバイスドライバーを通して行った。デバイス・ドライバーの設計は計算効率に影響を与えるため、必要最小限の範囲で Linux の OS について言及しながら、デバイス・ドライバーの仕組みを説明した。

本専用計算機で取り扱うデータ型は 16bit 固定小数点数とした。DSMC 計算は、ホスト・コンピューターでは 64bit 浮動小数点数で行われている。よって、本専用計算機へデータを転送するにあたり、ホスト・コンピューター側のプログラムにおいて、64bit 浮動小数点数を 16bit 固定小数点数に変換するデータ変換ルーチンを用意した。

第5章では、本専用計算機の動作確認を行い、また本専用計算機の計算時間を計測して性能評価を行った。そして、性能評価をもとに、更なる高速化が可能かどうか、また DSMC 法は専用計算機開発によって高速化可能かどうかについて、考察を行った。

本専用計算機の動作確認として定常問題であるクエット流について計算を行った。本専用計算機を用いずホスト・コンピューターのみで行った計算結果と比較し、速度分布、温度分布ともに良好に一致していることを確認した。

本専用計算機を用いて 1 タイムステップ DSMC 計算を行った場合の各計算ルーチン部分（サンプル分子の自由運動、indexing、衝突判定、衝突後速度計算）の計算時間を計測した。そして、ホスト・コンピューターのみで DSMC 計算を行った場合の計算時間と比較させた。ただし、この比較は本専用計算機の性能の評価には繋がらない。ここでは、通常ソフトウェアでの計算に対して、本専用計算機の使用はどのような影響を及ぼすのかを見ている。比較の結果、本専用計算機の使用により衝突判定の計算時間は短縮することができたが、DSMC 全体の計算時間はそれほど短縮できていなかった。これは、本専用計算機を用いるために、データ変換ルーチンなどの余計な部分にかかる時間が、本専用計算機による短縮時間を埋めてしまったからである。

次に、本専用計算機が衝突判定を行っている間、どういった部分にどれぐらい時間がかかっているかを計測し、それをもとに本専用計算機の演算速度を算出した。本専用計算機の動作は、データ転送と衝突判定計算に分けることができる。本専用計算機作動時間のうち、約 90%はデータ転送に費やされ、実際に衝突判定を行っている時間は 10%程度でしかなかった。速度データの平均転送速度は 89.2[MB/sec]と、PCI の Burst 転送における最大転送速度 133[MB/sec]の 70%程度の速度が出せていることを確認した。次に本専用計算機の演算速度であるが、算出する演算速度は 2 種類あり、データ転送時間なども含めた本専用計算機の作動時間及び行った演算数をもとに算出する平均演算速度と、本専用計算機が実際に衝突判定を行った時間及び行った演算数をもとに算出するピーク演算速度がある。平均演算速度は 25.3[MFL OPS]相当、ピーク演算速度は 191.4[MFL OPS]相当であった。

作成した本専用計算機の演算速度は満足のいくものではない。その理由を以下に述べる。計算量の多い部分に専用計算機を適用するという点では、本専用計算機は GRAPE 計算機と同じ着想に基づいて設計されている。しかし、GRAPE 計算機で行う重力計算は、粒子数を N とすると N の 2 乗に比例する計算量であるが、DSMC 法で行う衝突判定は N に比例するものでしかない。また、GRAPE 型専用計算機を用いることにより付け加わる部分(データ変換ルーチン、データ転送など)にかかる処理量も N に比例したものである。GRAPE 計算機では N を大きくしていくと、重力計算に比べそれ以外の N に比例する部分は無視できるようになる。しかし、本専用計算機では無視できないばかりか、逆に本来の目的である衝突判定よりも処理に時間がかかるということもあり得る。よって、DSMC 法に特化した GRAPE 型専用計算機を作成しても、そのままでは GRAPE 計算機ほどの効果を上げる見込みは低くなってしまふ。そこで、どのような改良を行えば DSMC 法に特化した GRAPE 型専用計算機の性能を向上させることができるのか考察を行った。

データ転送時間は本専用計算機作動時間の 90%をも占めており、そのため平均演算速度とピーク演算速度に開きがでた。平均演算速度をピーク演算速度に近づけるには、データ転送量に対する本専用計算機での計算量の割合を増加させるか、データ転送時間を短縮する必要がある。まず、データ転送量に対する本専用計算機での計算量の割合を増加させる方法として、衝突後速度計算のハードウェア化がある程度有効であると思われる。しかし、パイプライン処理特有の問題であるパイプライン・ハザードにより、衝突前後における運動量及びエネルギーが保存されない可能性があるため、パイプライン・ハザードを回避する方法について考察した。他にデータ転送時間を短縮する方法として、データの転送量を減らす工夫、およびより高性能なインターフェースの導入などの考察を行った。

ピーク演算速度を向上させる手段として、本専用計算機での計算量の増加、本専用計算機の動作周波数の向上、本専用計算機の並列化、といった点から考察を行った。並列化は、並列化された専用計算機全体の持つ能力の向上には有効であるが、データ転送時間が並列台数分だけ積み重なってくるので、データ転送時間が無視できない本研究の場合、達成できる平均演算速度には限界がある。並列化による性能向上を期すには、データ転送時間を短縮する必要がある。他に、並

列計算機で問題となってくるプロセッサ間でのメッセージ・パッシングによるオーバーヘッド、及びプロセッサ間のロード・バランスについても考察を行った。

以上の考察をもとに、現段階で考えられる様々な改良を施して DSMC 法に特化した GRAPE 型専用計算機の演算速度を見積もってみたところ、8 台並列させたもので平均演算速度 7.0[GFLOPS]程度が限界であった。この値は開発の労力に見合った値ではなく、DSMC 法に特化した GRAPE 型専用計算機の開発により DSMC 計算を高速化することは現在のところ非常に難しいと言える。

DSMC 法に特化した GRAPE 型専用計算機は、GRAPE 計算機とは異なり、データ転送時間の影響を無視することができないため、現時点では高速化を行うことが難しい。今後、技術の向上により高速なインターフェースが開発され、データ転送時間が格段に短縮できるのであれば、GRAPE 型専用計算機による DSMC 法の高速化は可能性があるかもしれない。

GRAPE 型専用計算機の他に考えられる設計方針として、ホスト・コンピューター、専用計算機と分けて構成したものではなく、一体化させたものが考えられる。つまり、マイクロプロセッサと演算ユニットでメモリを共有させるような計算機であり、これによりデータ転送時間を削減することができる。これは DSMC 法全体に特化された計算機を開発することであり、量子色力学の分野で開発されている CP-PACS や QCDSF のような並列計算機に近いものとなる。

第 6 章では、本論文のまとめを行い、結論を述べる。なお、メモリボードの作成は基板の設計から行った。回路図などの詳細を付録 B で述べる。

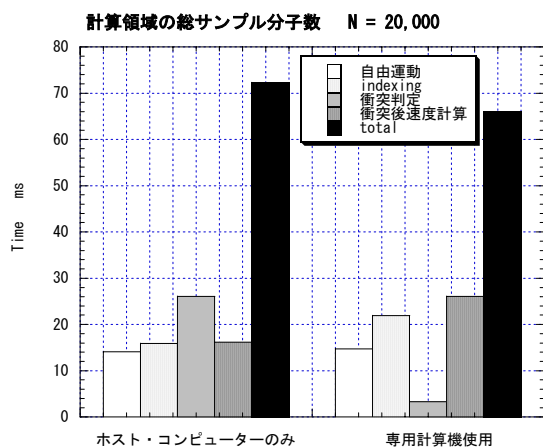


図 1 本専用計算機とソフトウェアとでの計算時間比較

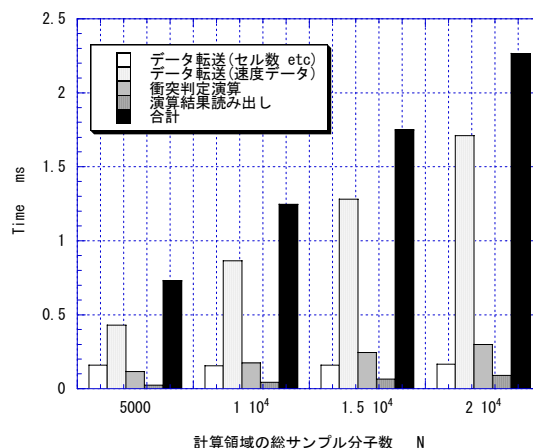


図 2 本専用計算機による衝突判定計算の時間内訳