

## AVX-512によるDSMC法の並列処理

伊井野 蒼 黒田 久泰  
愛媛大学大学院理工学研究科

## 1. はじめに

今日、自動車や飛行機など我々はあらゆる乗り物に頼っている。そして、自動車や飛行機などの設計には流体解析が使われている。流体解析は走行中の乗り物周辺など流れのある場の気体や液体に対してシミュレーションを行う。直接シミュレーション・モンテカルロ法(DSMC法)は、実在気体の流れを計算機上の模擬分子によりモデル化する数値シミュレーション手法であり、流体解析の一部である。特に希薄気体に有効であり、その特性から、有機ELやプラズマディスプレイなどのシミュレーションに用いられている。本研究はDSMC法の高速化を図ることを目的とし、その手段としてAVX-512とSoA方式を使用する。ベンチマークとして南部らのシミュレーション[1]を使用する。

## 2. DSMC法

DSMC法は分子間衝突を考慮に入れて多数の気体分子の運動を数値計算によって求める方法で、Directed Simulation Monte Carloの頭文字からDSMC法と呼ばれる。DSMC法はボルツマン方程式を解く手法ではあるが、すべての実在分子に対して計算を行うのは計算回数が膨大なため現実的ではない。そこで、計算領域内における全分子を扱うのではなく、それより少ないサンプル分子に基づいて計算を行う。この手法では、分子の移動と衝突の判定が分離して行われる。それは、タイムステップ $\Delta t$ の間に分子が衝突を一度も行わないという仮定のもと成り立つ。仮定を成り立たせるため、 $\Delta t$ を平均自由時間より十分小さく取ることで、分子の運動と衝突を分離してよい。分子移動の計算後、サンプル分子の衝突について、移動の軌跡によってではなく確率論的に衝突判定を行う。モンテカルロ法はこの部分を指している。

## 3. AoS/SoA方式

本研究では、分子の位置や速度のデータをSoA方式で表す。また、比較の際にAoS方式を用いたプログラムも使用するため、併せて解説する。AoS方式はArray of Structuresの略であり、その名の通り構造体の配列である。DSMC法の場合、分子を3次元空間で扱うため $(x, y, z)$ の3変数が分子の位置や速度などで必要になる。この速度を図1のような形式で1分子の情報を順々に格納していくのがAoS方式である[2]。AoS方式とAVXを併せて用いる際は図1のAoS方式(ダミー要素あり)に記されているように、データ構造上、ダミーの値として0を追加することがある。SoA方式は

AoS方式(ダミー要素なし)

```
double p[[3]] = {{x1, y1, z1}, {x2, y2, z2}, ...};
```

AoS方式(ダミー要素あり)

```
double p[[4]] = {{x1, y1, z1, 0}, {x2, y2, z2, 0}, ...};
```

分子の座標 $(x, y, z)$ を1つずつ並べる

図1: AoS方式

SoA方式

```
double p.x[] = {x1, x2, x3, ...};
```

```
double p.y[] = {y1, y2, y3, ...};
```

```
double p.z[] = {z1, z2, z3, ...};
```

分子の座標 $(x, y, z)$ の各要素でそれぞれ1つの配列にする

図2: SoA方式

Structure of Arraysの略であり、その名の通り配列の構造体である。図2に示すとおり、AoSに対して、SoAは $(x_1, x_2, x_3 \dots)$ ,  $(y_1, y_2, y_3 \dots)$ ,  $(z_1, z_2, z_3 \dots)$ のような連続するデータ構造であるためメモリアクセスの連続性において優位性を持つ。そのため流体シミュレーションにおいて高速性を求める場合は、SoA方式が用いられている。

## 4. PDPシミュレーション

本稿ではDSMC法の高速化の評価方法として、PDP(プラズマディスプレイパネル)シミュレーションを用いる。PDPシミュレーションの設定について説明する。2つの狭い間隔を持つ平行板をプラズマディスプレイパネルと見立て、板の大きさを820mm×610mmとし、間隔を0.1mmとする。時刻 $t=0$ で平行平板間には533Paのネオンが充填されているとみなす。排気はチップ管を通してではなく、平板間の周辺すべてを通して行われるものとする。開始直後に平板間の周辺にあった仮想的な固体壁が瞬時に取り除かれて排気が始まる。平板の外は完全真空とする。 $t=0$ でのネオンの温度は平板のベーク温度に等しいものとする。

計算領域は

$$0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c$$

である。ただし $a=820\text{mm}$ ,  $b=610\text{mm}$ ,  $c=0.1\text{mm}$ である。ガスの初期圧を533Pa, 初期温度(ベーク温度)を $T_0=573\text{K}$ とする。この設定は南部らのシミュレーションを参考にしている。

Parallel processing for the Direct Simulation Monte Carlo method with AVX-512

Iino Aoshi, Graduate School of Science and Engineering, Ehime University

Kuroda Hisayasu, Graduate School of Science and Engineering, Ehime University

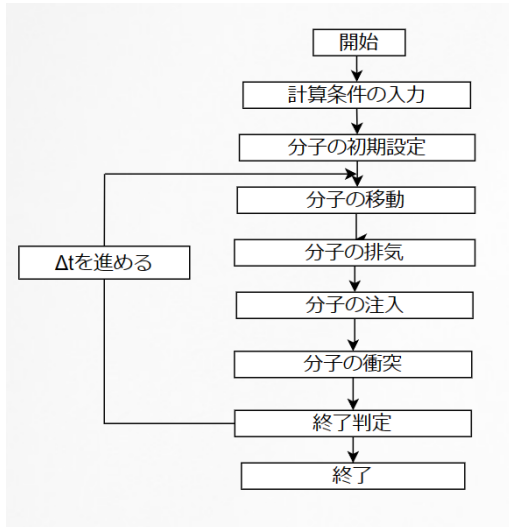


図 3: シミュレーションのフローチャート

#### 4.1. 分子の移動

分子すべてをタイムステップ  $\Delta t$  だけ動かす。動く前の位置を  $r_0$ 、速度を  $v_0$  とすると  $\Delta t$  後の位置  $r$  は

$$r = r_0 + v_0 \Delta t \quad (1)$$

となる。  $\Delta t$  は平均自由時間以下にとる。つまり、

$$\Delta t = \alpha \frac{\lambda}{\sqrt{2RT_0}}$$

とする。この係数  $\alpha$  は経験上 ( $\alpha < 1$ ) に取れば良い。  $\lambda$  は平均自由行程を表しており、  $R$  は単位質量あたりの気体定数である。平均自由行程とは分子が衝突などで妨害されることなく、進むことのできる距離を表す。2章でも述べたが、分子の運動と衝突を分離する上で重要な指標である。

#### 4.2. AVX-512 による高速化

分子の移動に関して、加算や乗算を行う際に AVX-512 を使用した。加算を行う際には `_mm512_add_pd()` 関数を、乗算を行う際には `_mm512_mul_pd()` 関数を使用した。積和演算では `_mm512_fmadd_pd()` 関数である。これは先ほど述べた分子の移動の際タイムステップ  $\Delta t$  後の位置  $r$  を計算する式 (1) を解くのに使用した。

### 5. 実験方法

シミュレーションプログラムの全体像を示す。

図 3 にあるように、シミュレーションでは計算条件と分子の初期設定を行う。その後、分子の移動、排気、注入、衝突を、分子の状態に応じて行う。タイムステップが規定数進むと終了する。

AVX-512+SoA 方式の効果を調査するため、比較実験を行う。このシミュレーションの一番のボトルネックは分子の移動である。そのため、分子の移動を担う関数で時間計測を行う。速度や位置に対する計算に工夫を加えず、分子に対するデータ構造が AoS 方式のプログラムを速度向上率の基準とし、AVX2+AoS, AVX2+SoA, AVX-512+SoA の速度を比較した。タイムステップ数は一律 20,000 である。

### 5.1. 計算機環境

計算機環境は表 1 に示す。

表 1: 計算機環境

CPU	Intel®Xeon®Gold 6240R CPU@2.40GHz × 2
メモリ	128GB
コア数 (スレッド数)	24 × 2 (48 × 2)
OS	Ubuntu 22.04.3 LTS
コンパイラ	gcc ver.11.2.0
コンパイラオプション	-O3 -mavx512f -march=native -lm

### 6. 実験結果

実験結果を表 2 に示す。AoS では分子の移動における関数の実行に 22.03s かかっていたが、AVX-512+SoA では 18.01s まで短縮できた。得られた速度向上率は 1.223 倍 (小数点以下第 4 位四捨五入) である。また、AVX2+AoS では速度が低速化した。これは AoS にダミー要素があることが原因だと思われる。理由は、AVX2+SoA では高速化することができているためである。AVX2 と AVX-512 ではほとんど速度上昇に差がないことが見受けられる。これは、AVX2 の時点でほとんど高速化は済んでおり、AVX-512 との性能差があまり開かなかったことを示している。

表 2: 分子の移動計算部分の実行時間

方式	実行時間 [s]	速度向上率
AVX なし (AoS)	22.03	1
AVX2+AoS	22.36	0.985
AVX2+SoA	18.13	1.215
AVX-512+SoA	18.01	1.223

### 7. まとめ

本稿では、AVX 命令のうち AVX2 と AVX-512 を使用し、AoS, SoA 方式についても比較を行った。その結果 AVX-512 と SoA 方式によって、DSMC シミュレーションの高速化を図ることができた。しかし、比較手法のうちの AVX2+AoS 方式にはダミー要素が含まれており、メモリを一部無駄にしていたため AoS より速度が劣った。今後、無駄にしているメモリを活用しダミー要素のない AoS 方式プログラムを考えることができれば AVX 演算に無駄がなくなり速度の向上が見込めるため、AoS プログラムを改良することが求められるだろう。

### 参考文献

- [1] 南部健一, 渡部安雄, 米村茂, “中間流・分子流のシミュレーション法 —大面積微小ギャップの排気への応用—”, 真空, Vol.43, No.10, pp.939-945, 2000.
- [2] 齊藤大輔, 吉田明正, “粒子法の近傍粒子探索における AoSoA 再配置を用いた SIMD 高速化”, 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), Vol.2023-HPC-190, No.10, pp.1-7, 2023.