《小特集》

格子ガスオートマトン法による複雑流れの数値解析

松隈洋介*

ABSTRACT Lattice gas automata, in which a flow field is expressed by using many particles, have been recently utilized for simulating complex behavior of fluid motion such as multi-phase flows. The present paper reviews some typical models of the lattice gas automata. After brief introduction of the basic concepts and properties of these models, two typical numerical simulation results are shown. The first example is the simulation of two-component phase separation demonstrated by ILG model. Two components separated and formed complex interface geometry as time marching. The second example is the simulation of flows through complex geometry. ILG model was applied to simulate the flow through complex obstacles. The complex obstacles were successfully generated by the present method and the two-dimensional flow characteristics can be calculated including flow concentration in the specified flow channels. Through this brief review, it is concluded that the lattice gas automata method may serve powerful tools to simulate complex flows.

1. はじめに

自然科学は自然界に存在する諸物質や自然界での諸現象について，それらの本質を見極め，それらを支配する統一的な法則を発見して自然現象を予測する学問分野である．その研究方法は従来，実験・観察に基づく実験科学と理論・模型化に基づく理論科学という2つの分野に分類されてきたが，近年の計算機の驚異的な発達に伴って，コンピュータによって数値実験を行う第3の分野が形成・確立されてきた．この第3の分野では長い歴史の中で細分化された実験科学と理論科学の分野で得られた知識を活用してコンピュータにより数値実験を行う．この数値実験を繰り返して得られた多くのデータから統一的な法則を発見し，実験科学と理論科学のみでは困難な複雑流れを理解することが可能ではないかと期待されている．

ここで複雑流れとは，乱流や気液二相流などに見られ，以下のような特徴を持つ系と定義されている[1,2]．

1. 非線形性が強い
2. 空間的に込み入った形状の界面が存在する
3. 時定数のスペクトルが小さいものから大きいものまで広がっている
4. 化学変化や相変化を伴う
5. 多くの組成で混相となる
6. 統計的性質が含まれる

数値実験よりこのような複雑流れを理解する代表的な手法に差分法がある．差分法は流れを連続体として捉え，様々な仮説をたてて偏微分方程式と補助方程式からなる数学モデルに定式化し，その数学モデルを時間・空間で差分化した計算モデルに変換してコンピュータによって計算して数値解を得る方法である．差分法は偏微分方程式を差分方程式に変換し，それを代数的に解く手段であるから，線形系や非線形系に対して普遍的に適用可能であり，複雑流れを理解する有用な手段となる．しかし差分法でもまだ完全には克服されていない問題が存在する．例えば気液二相流の込み入った界面や統計的性質をどのように定式化するべきか，また差分方程式に変換する段階で不可避な打ち切り誤差や丸め誤差を最小にしつつ，安定な計算を行うための差分スキームは何が適しているか等の問題点である．これらの問題点に対して，これまでに多くの研究者による様々な工夫により適用可能な複雑流れは確実に増えている[1]．

その一方で，流れを連続体と見なすのではなく，流体の原子・分子の挙動をできるだけ簡単にモデル化して流れを再現する手法に格子ガスオートマトン法がある．格子ガスオートマトン法は実在気体の原子・分子の本質的な特徴をできる限り取り込みつつ，非常に簡

Numerical Simulation of Complex Flows by Lattice Gas Automate Method. BY *Yosuke Matsukuma* (Dept. of Mechanical Systems Engineering, Yamagata University).
*山形大学工学部機械システム工学科

単化された運動を行う仮想粒子の挙動を追跡して流れを再現する方法である．この特徴から格子ガスオートマトン法は，原子・分子の挙動を直接シミュレートする分子動力学に代表されるミクロスケールの解析手法と，巨視的力学方程式を解く差分法に代表されるマクロスケールの解析手法の中間に存在すると言う意味で，「メゾスケール」の解析手法と呼ばれる．その特徴には数学モデルが確率過程で記述されるため統計的な扱いを必要とする複雑流れの微視的機構を調べる可能性のあること，三角格子を用いるため複雑な境界条件を容易に設定できることや，また系の状態がすべて整数値であらわされるため打ち切り誤差・丸め誤差がなく数値誤差による発散がないことなどがあげられる．これらの特徴から，格子ガスオートマトン法が気液二相流に代表される複雑流れを解く有効な手段となりうると考えられる．また原子・分子の本質的な特徴をできる限り取り込みながら格子ガスオートマトン法よりもよりマクロレベルでモデル化された格子ボルツマン法は格子ガスオートマトン法のいくつかの欠点を克服し，工学的な問題への応用が期待されている．

本稿では格子ガスオートマトン法のいくつかのモデルを紹介し，各々のモデルの概要と特徴を手短に説明する．またこれらのモデルを用いて複雑流れの解析に適応した例として，二成分の分離と複雑形状流路内の流れを取り上げた後，格子ガスオートマトン法が並列計算に適していることを示す．これらのレビューから格子ガスオートマトン法が複雑流れを解析する有用な手段となるかを調べることとする．

2. 格子ガスオートマトン法（Lattice Gas Automata: LGA）

セルオートマトン法は1940年代から生物の形態形成を模擬するライフゲーム等に応用されてきたが，流体のシミュレーションに用いられるようになったのは比較的新しい．*Frish* 等が1986年に提案した FHP モデルが Navier–Stokes 方程式を満たすことが解析的に示されてから格子ガスオートマトン法（Lattice Gas Automata: LGA）として広く用いられるようになった．本章では格子ガスオートマトン法の基礎となる FHP モデルを説明し，次にこのモデルに拡張を加え，多相流を表現できるようにしたモデルを数例紹介する．

2.1 FHP モデル[3)]

格子ガスオートマトン法（Lattice Gas Automata: LGA）は *Hardy*, *Frish*, *Pomeau* によって提案された単相非圧縮性流体を模擬する FHP モデルを基に様々な拡張がなされている．本モデルは**図 1** に示す正三角形の格子を用いて空間を離散化し，この格子上を単位質量を持つ仮想粒子が単位速度で移動する．図 1 右上の六角形は FHP モデルの 1 つのセルをあらわし，仮想粒子は速度 c_m，

$$c_m=\{\cos(\pi m/3),\ \sin(\pi m/3)\},\ m=0,\ \cdots,\ 5 \quad (1)$$

と静止状態

$$c_6=\{0,\ 0\} \quad (2)$$

の 7 種類の速度しか取ることができない．ある離散時刻 t における格子 x_{ij} の状態は速度 c_m ($m=0, \cdots, 6$) の粒子が存在するか否かを示す 7 個の Bool 変数 $n_m(x_{ij}, t)$ を要素とする集合 $n(x_{ij}, t)$ として次式で表現される．

$$n(x_{ij}, t)=\{n_m(x_{ij}, t),\ m=0,\ 1,\ \cdots,\ 6\} \quad (3)$$

例えば図 1 中のセルでは $m=0$ と $m=2$ 方向の速度を持つ粒子が存在するため，この格子の状態は

$$n(x_{ij}, t)=\{1,\ 0,\ 1,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0\} \quad (4)$$

とあらわされる．

系全体は**図 2** に示すように，各セルに存在する粒子が一斉に質量と運動量を保存するように衝突する衝突過程と，衝突によって新たな速度方向を得た粒子がその方向に 1 格子長さだけ進む並進過程を繰り返して時間発展する．この衝突過程と並進過程の 1 組をタイムステップ t ($t=0, 1, 2, \cdots$) と呼ぶ．

図 3 に FHP モデルにおける衝突の一例を示す．図 3 左は衝突前の状態をあらわしている．質量と運動量を保存するような衝突後の状態は図 3 右のような 2 種類の状態が考えられる．そこで乱数を用いて衝突後の状態として図 3 右の状態が等しい確率で現れるようにする．FHP モデルは衝突則の違いにより，FHP-Ⅰ, Ⅱ, Ⅲの各モデルが提案されている．FHP-Ⅰは $m=6$ の静止粒子を考慮せず，二体衝突と三体衝突のみを考慮したモデルで，FHP-ⅡはFHP-Ⅰに静止粒子を付加したモデルである．FHP-Ⅲはさらに質量と運動量が保存される全ての衝突を考慮したものである．各モ

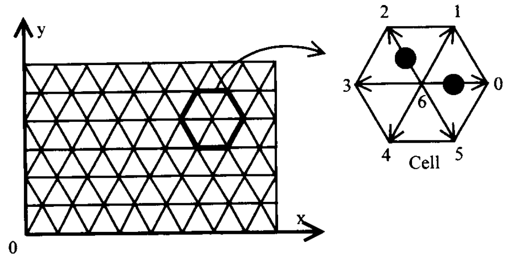

図 1　FHP モデルに用いる格子とセル

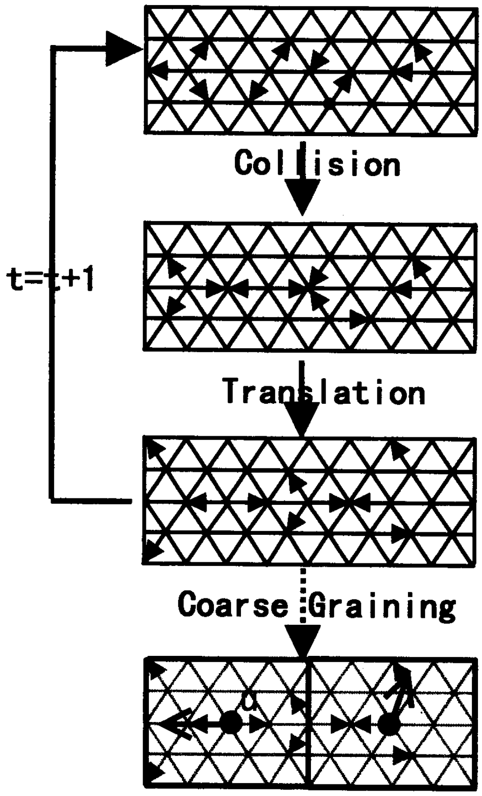

図2　FHP モデルの時間発展

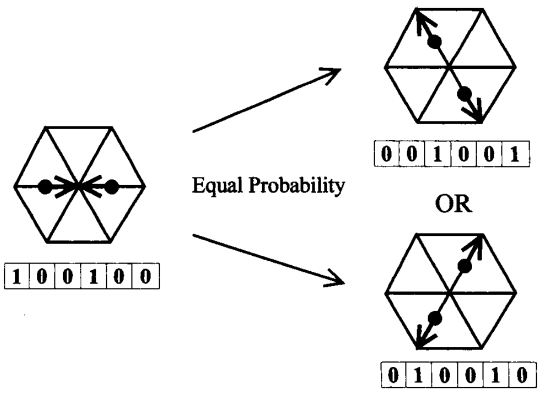

図3　FHP モデルの衝突則の一例

デルの衝突則の違いは後述する Navier–Stokes 方程式中の動粘性係数 $\nu(\rho)$ 等の物性値の違いに反映される．

時間発展する全粒子の微視的状態をある時間間隔や有限領域で平均することで粒子の離散力学から連続体の力学を得ることができる．ある時間間隔や有限領域で粒子の微視的状態に行う平均操作を疎視化と呼び，この操作から得られる粒子の平均分布密度 N_m $(0\leqq N_m\leqq 1)$ を用いて密度 ρ と運動量 ρu が式(6)と式(7)で定義される．

$$N_m(x_{ij},t)=\langle n_m(x_{ij},t)\rangle \tag{5}$$

$$\rho=\sum_m N_m(x_{ij},t) \tag{6}$$

$$\rho u=\sum_m c_m N_m(x_{ij},t) \tag{7}$$

ここに〈・〉は疎視化を意味する．仮想粒子が質量と運動量を保存することに注意すると，N_m についての巨視的レベルでの質量と運動量の保存式

$$\sum_m N_m(x_{ij}+c_m,t+1)=\sum_m N_m(x_{ij},t) \tag{8}$$

$$\sum_m c_m N_m(x_{ij}+c_m,t+1)=\sum_m c_m N_m(x_{ij},t) \tag{9}$$

が得られる．式(8)を1次の項まで Taylor 展開し，式(6)を用いると巨視的な連続の式が得られる．

$$\partial_t\rho+\nabla\cdot\rho u=0 \tag{11}$$

また，巨視的流速 u が粒子の速度 c よりも十分に小さいという条件のもとで式(9)を展開し，式(6)-(7)を用いると，少し複雑な手続きを経て次式が得られる[3]．

$$\partial_t u+a(\rho)u\cdot\nabla u=-\frac{1}{\rho}\nabla\rho+\nu(\rho)\nabla^2 u \tag{12}$$

式(12)は係数 $a(\rho)$ が1ではないことで本来の Navier–Stokes と異なっている．しかし系の密度 ρ がほぼ一定であり，$a(\rho)$ が定数と見なせる場合には時間 t と動粘性係数 ν に $t'=a(\rho)t$, $\nu'=\nu/a(\rho)$ と変数変換することで本来の Navier–Stokes 方程式と見なせる．非常に簡単化された FHP のモデルが巨視的に Navier–Stokes 方程式を満足することが *Hardy*, *Frish*, *Pomeau* によって示されてから，格子ガスオートマトン法が広く流体の数値解析に使われるようになった．現在までに，平板周りの流れやキャビティ流れ等の格子ガスオートマトン解が求められ，厳密解や差分解との比較からよい一致が報告されている[4]．

2.2　Immiscible Lattice Gas (ILG) モデル[5]

二成分の表面張力を表現することのできるモデルに *Rothmann* 等によって提案された ILG モデル (Immiscible Lattice Gas Model) がある．これは前節の FHP モデルを基本にして二成分流れを扱えるように拡張したものである．ILG モデルは二成分流れを扱えるように粒子に赤と青の色づけを行い，赤粒子同士または青粒子同士が凝集しようとする衝突規則を用いる．このモデルを用いると密度は巨視的に見るとほぼ等しいが，各相の間に表面張力がはたらくような流体，例えば水と油のような流体の挙動を模擬することができる．並進の過程は FHP モデルと全く同じであるが衝突過程が異なる．簡略に述べると赤粒子は隣接する6つの格子のうちで最も多く赤粒子を含んでいる隣接点に，青粒子は最も多く青粒子を含んでいる隣接格子に

向けられる．この場合，FHP モデルと同様に赤と青粒子の質量，運動量，粒子数が保存される．このILG モデル微視的運動論を以下に説明する．空間の格子 x_{ij} に c_m の速度を持つ赤粒子が存在するか否かをBool 変数 $n^r_m(x_{ij})$

$$n^r_m(x_{ij})=\{0,\ 1\},\ n^b_m(x_{ij})=\{0,\ 1\} \tag{13}$$

と表し，同様に青粒子が格子 x_{ij} に存在するか否かを $n^b_m(x_{ij})$ であらわすとする．そこで c_m の速度を持つ粒子は論理和∨を用いて

$$n_m(x_{ij})=n^r_m(x_{ij})\vee n^b_m(x_{ij}) \tag{14}$$

と表される．こうすると格子 x の粒子配列 $n(x_{ij})$ はFHP モデルの場合と同様に式(3)で表現される．

疎視化の操作から混合状態での密度 ρ と運動量 ρu がFHP モデルと同様に式(5)-(7)より得られる．赤粒子と青粒子の密度と運動量は $n_m(x)$ を $n^k_m(x_{ij})$ と置換すればよい．ここで k は r または b を意味する．

ILG モデルを特徴づける衝突規則を例示する．格子 x_{ij} での赤粒子と青粒子の運動量の差をベクトルで定義し，色流束 q と呼ぶ．

$$q[n^r_m(x_{ij}),\ n^b_m(x_{ij})]\equiv\sum_{m=0}^{5}c_m[n^r_m(x_{ij})-n^b_m(x_{ij})] \tag{15}$$

また，格子 x_{ij} に隣接する6格子 $x_{ij}+c_m$ $(m=0,\ \cdots,\ 5)$ の赤粒子と青粒子の質量の差をベクトルで定義し，局所的な色の場 f とする．

$$f(x_{ij})\equiv\sum_{m=0}^{5}c_m\sum_{n=0}^{5}[n^r_m(x_{ij}+c_m)-n^b_m(x_{ij}+c_m)] \tag{16}$$

ILG 衝突則を定性的に述べると赤い粒子は隣接する6つの格子のうちで最も多く赤い粒子を含んでいる隣接点に，青い粒子は最も多く青い粒子を含んでいる隣接格子に向けられるように衝突後の格子の粒子配列を変化させる．つまり色流束 q と局所的な色の場 f の内積を最大にするように粒子の散乱方向が定まるという微視的な操作から計算される．衝突後の格子 x の赤粒子と青粒子の配列 $n^{r'}(x)$, $n^{b'}(x)$ は q と f の内積

$$q(n^{r'},\ n^{b'})\cdot f \tag{17}$$

を最大にする配列として求められる．この衝突の過程では赤粒子と青粒子のそれぞれの個数と運動量の合計が保存される．この衝突則の一例を**図4**に示し，ILG モデルの衝突則の理解を早めたい．図4中の6角形の格子点 x の内側の0から6までの数字が速度方向，格子点の外側のRnBm の表記は格子点 x に隣接する6つの格子における赤粒子と青粒子の存在数をあらわす．図の左が衝突前の状態で式(13)から

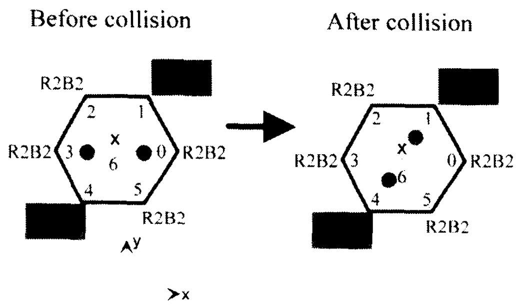

図4　ILG モデルの衝突則の一例

$$n^r=\{0,\ 0,\ 0,\ 1,\ 0,\ 0\}$$
$$n^b=\{1,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0\} \tag{18}$$

とあらわされる．図4の局所的な色の場 $f(x)=(f_x,\ f_y)$ を式(16)より計算すると

$$f(x)=4(1,\ \sqrt{3}) \tag{19}$$

で，格子 x の中心から見て $(1,\ \sqrt{3})$ 方向，つまり1方向の格子に赤粒子が多く存在していることを示している．運動量と赤・青粒子数の保存を考慮した衝突後の配列 $n^{r'}(x)$, $n^{b'}(x)$ は6通り考えられるが，その中で

$$n^r=\{0,\ 1,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0\}$$
$$n^b=\{0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 1,\ 0\} \tag{20}$$

とすると色流速 q が

$$q(x)=\{1,\ \sqrt{3}\} \tag{21}$$

となり，式(17)は最大値

$$q(n^{r'},\ n^{b'})\cdot f=(1,\ \sqrt{3})\cdot 4(1,\ \sqrt{3})=16 \tag{22}$$

をとる．そこで式(20)が衝突後の格子配置として図4の右側のように選ばれる．もし式(17)を最大にする $n^{r'}(x)$, $n^{b'}(x)$ が複数組存在した場合には，衝突の結果はこれらの組の中の1つが等しい確率で選択される．ここでは赤粒子と青粒子が正面衝突するという一番わかりやすい例を示したが，他のすべての衝突後の粒子配置が式(17)より求められる．

例えば界面から十分に離れた赤粒子だけの相に青粒子が存在しないことがあり，ここでは $n^b_m=0$ となる．このため赤粒子にはFHP モデルと全く同じ微視的な衝突が起こる．このことからILG モデルは界面から十分に離れたところではFHP モデルと同様に非圧縮性流体と低いマッハ数を仮定すると連続の式とNavier-Stokes 方程式が成り立つ．

この他に格子ガスオートマトンで二相を表現する試みとしてはLiquid-Gas (LG) モデル[6]やILG-LG ハイブリッドモデル[7]等が提案されている．Liquid-Gas (LG) モデルは1種類の粒子のみを用い，ある格子長

さだけ離れた粒子間に引力を働かせることで生じる粒子密度差により二相を表現するモデルで，離れた粒子間に働く粒子間相互作用を新たに導入することで粒子同士の凝集を起こし，その結果できる密度の高い相と低い相により二相を表すことができる．ILG モデルがほぼ密度の等しい二成分を模擬するのに対して，気相・液相のように密度差のある二相流を再現できる．またILG–LG ハイブリッドモデルはILG モデルとLG モデルの長所を取り入れたモデルで，安定した界面を持ちながら，密度比が約10倍以上の二相流を計算することができ，気液二相流の流動様式の気泡流からスラグ流への遷移シミュレーション等への応用が期待されている．

3. LGA によるシミュレーション例

3.1 ILG モデルによる二成分の相分離[5)]

本節では，典型的なILG モデルの振舞いを確認するために二相の凝集を計算する．$0<x<x_0$ と $0<y<y_0$ の領域を考え，$x_0=1024$格子長さ，$y_0=1024$格子長さとする．境界条件は $x=0$, x_0 と $y=0$, y_0 で周期的境界条件とする．初期条件として巨視的な流速 u が系全体で $u=0$ で，格子あたりの平均粒子数密度 ρ が $\rho=4.9$ となるように赤と青の粒子を格子に無作為に配置し，つまり赤と青の相に完全な混合状態を意識的に作った．この初期条件は式(17)の q と f の内積が最小となるように粒子を配置したもので，時間発展とともに系は式(17)の値が大きくなるように振舞い，二相が分離すると考えられる．この系の系の時間発展を図5に示す．図5はそれぞれ $t=1000$, 10000, 80000, 200000で

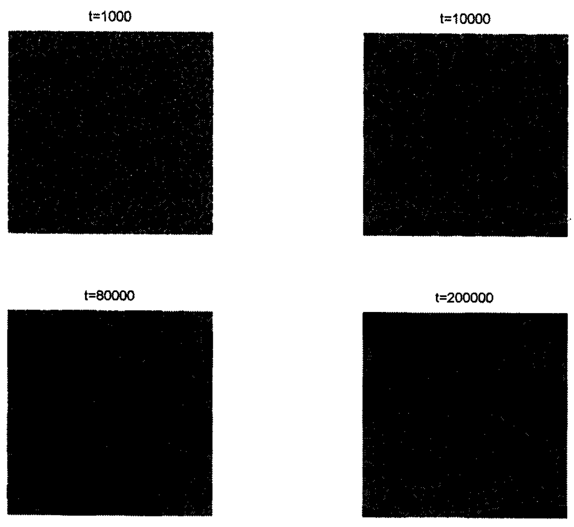

図5 ILG モデルによる二成分の相分離シミュレーション

の1024×1024個の格子のスナップショットである．赤でプロットされた点は赤粒子の方が青粒子よりも多く存在する格子で，青でプロットされた点が青粒子の方が多い，$0<t<1000$では時間発展と共に同色の粒子同士が凝集して赤と青の小さな塊が多数発生する．この塊が互いに接合して大きな塊へと成長する．その際赤相と青相の間には表面張力に相当する力が働くため，なるべく円形になろうとする（$1000<t<80000$）．さらに時間が経過した $t>200000$では青相と赤相はほぼ完全に分離して，平坦な界面を形成して安定な状態に達した．$t=200000$の整定した状態では，まだ青相の中に赤相が浮かんでおり，赤相と青相は対称的な配置になっていないが，これは衝突の計算に用いた乱数の性質によるもので，幾度かの計算を行えば赤相の中に青相が浮かぶ状態も等確率で現れると考えられる．なおこのILG による二成分の分離の動画が http://mad01.yz.yamagata-u.ac.jp/matsukuma.html にあるので興味のある方は参照していただきたい．

このILG モデルの粒子の平均密度 ρ と圧力 P は比例関係にある．定常状態に達した赤の島状の塊と青の海の間には圧力差 ΔP があり，両相の圧力差と曲率半径 R が反比例する．

$$\Delta p \equiv |p_1-p_2| = \frac{\sigma}{R} \tag{23}$$

ここで p_i ($i=1, 2$) は各相の圧力を表し，σ と R はそれぞれ表面張力係数と曲率半径である．図5の実験結果をもとに曲率が0.1から0.62までの異なる曲率半径を持つ5つの赤の塊の内部の圧力と外部の青の相の圧力差と曲率半径をプロットしたところ，各測定結果はほぼ直線上に乗ることからILG モデルが *Laplace* の式(23)を満たしていることがわかった．

二成分の分離を巨視的な視点で成立する偏微分方程式を差分化して解くことを考えてみよう．このような現象は Cahn–Hilliard 方程式[8)]で記述され，初期条件と境界条件を付帯させて二相の分離の解を求めることができる．図5中の $t=1000$に見られる分離の初期段階では複雑な形状の界面が多数存在する．Cahn–Hilliard 方程式を解く場合には，界面全てに境界条件を設定する必要がある．境界が少ない場合には二相の分離を数値的に解くことができるが[9,10)]，境界が多くなると非常に困難な作業である．また仮に境界条件を設定できたとしても，分離の初期段階では急激な半径の時間変化が差分化した場合の数値誤差を増大させ現実的な解を求めるには工夫がいる[10)]．これに対して格子ガスオートマトン法では図5に得られた複雑な界面形

状の形成は解そのものであり，そこに境界条件を設定する必要はない．またモデル自体に丸め誤差，打ち切り誤差が無いので急激な過渡現象も数値誤差によって解が発散することなく二相の分離のような複雑な界面を持つ現象を計算できることが分かる．

3.2 複雑な境界を持つ流路内の流れ

3.1節に示すようにILGモデルは分離の初期に二成分間に複雑な界面を自己形成する．この特徴に注目し，ILGモデルによって流路と固体壁が作成できれば，円形や四角形など人工的な幾何形状ではない複雑形状流路を作成でき，デブリベッドや地下帯水層の中の流れに応用できると考えられる．そこで本節ではILGモデルによる相分離において分離が進んだところで一方の成分を固体壁と見なすことによって複雑な流路を表現するモデルを紹介する[11]．

図5のILGモデルによる相分離で分離が進んだあるタイムステップ $t=t_p$ に赤相を固体壁と見なし，青相のみが流動する格子ガスオートマトンモデルを作成するためには，赤相と青相の界面を正確に判定する必要がある．本章で提案する複雑界面の設定方法について以下に述べる．**図6**上部に空間の位置 x における格子を示す．格子 x が赤粒子よりも青粒子を多く含む場合には格子 x の中心に青色の四角をおき，赤粒子の個数が青粒子の個数以下の場合には格子 x の中心に赤色の四角を置く表記を用いることにする．この表記法を用いて界面近傍の格子の状態を模式的に表したものが図6の上図である．界面から離れて赤相の内部に位置する格子は，図6中のAで示された格子のように，隣接する6つの格子全てが青粒子よりも赤粒子を多く含む．また同様に青相内部の格子は隣接する6つの格子全てが赤粒子を多く含むことになる．これに対して界面に接する格子は青粒子が豊富な格子と赤粒子が豊富な格子の両者が隣接することになる．例えば図6中のBで示された格子では，格子の中心から（1, 2, 3, 4, 5）の速度方向に隣接する5つの青粒子が豊富な格子と，(0）の速度方向に隣接する1つの赤粒子が豊富な格子の両者によって囲まれる．このように隣接する6つの格子における青・赤粒子の個数を調べ，青が豊富な格子と赤が豊富な格子の両方に隣接する格子は界面に接していると判定することができる．そこでタイムステップ t_p での赤相を，図6下図のように固体壁とみなすため，$t>t_p$ においては $t=t_p$ までに形成された界面に接する格子にすべりなし壁の境界条件を適用することとした．すべりなし壁上では流体と固体壁の間に摩擦が働き，壁面における流速の垂直方向成分と接線方向成分が共に零となるため，壁面上での粒子の衝突則を，粒子は来た方向へ跳ね返ると定義する．これに対して界面から離れた格子では青粒子にFHP-Ⅲモデルの衝突則を適用して単相流を表現することとした．また，t_p 以後赤相を固体壁と見なすために，赤粒子は衝突も並進も起こさず t_p での格子位置に留まるとする新たな規則を導入する．この操作によって $t=t_p$ における赤相と青相の界面がすべりなし壁面となり，赤相は流路中におかれた固体壁として振る舞うことが期待される．ILGモデルは時間発展と共に青相と赤相の塊が凝集・成長するため，タイムステップ t_p の設定値は青・赤粒子の数密度比とともに赤相によって形成された障害物の個数，代表寸法，形状等を決めるパラメータとなり，t_p を変化させることによって任意の複雑形状を有する流路を形成させることができるものと考えられる．

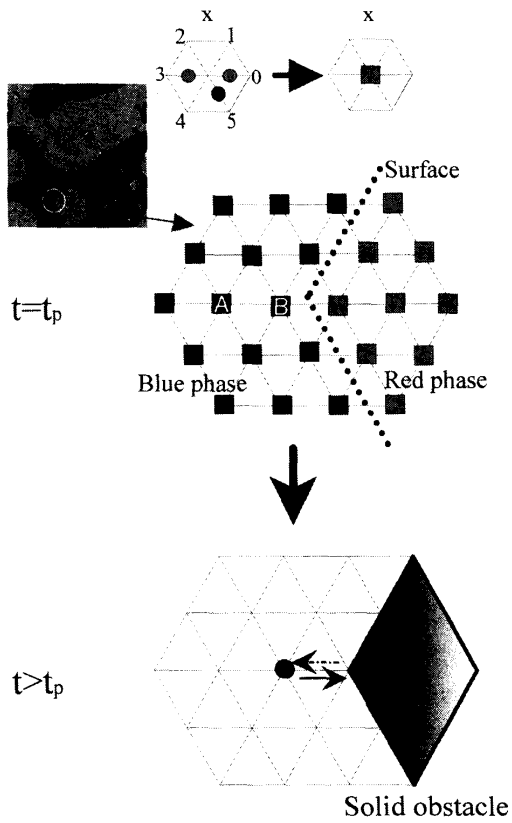

図6 ILGモデルを応用した複雑形状流路作成方法の模式図

この手法で作成した複雑な固体壁を模擬する手法の適用可能性を調べるために t_p をパラメータとした計算の流動様式を観察した．計算体系は二次元とし，計算領域をx軸とy軸方向にそれぞれ288×256個の格子に分割する．はじめに，33≦x≦256，1≦y≦256の領

域内に，格子あたりの青粒子の平均粒子数密度ρ_b=3.2，赤粒子の平均数密度ρ_r=1.6でかつ両相の平均流速u=0となるように青および赤粒子をランダムに配置する．この領域についてILGモデルを用いてタイムステップt (t=0, 1, …) がt_pになるまで相分離を計算する．青粒子と赤粒子には質量保存が成り立つため，青粒子と赤粒子の数密度比よりこの系のt_p以後の空隙率εは$\rho_b/(\rho_b+\rho_r)$=0.67と求められる．タイムステップ$t=t_p$になった時点において，計算領域を(1≦x≦288, 1≦y≦256) に拡大し，上記の手法により赤相を固体壁とみなす．計算領域を拡大するのは，ILGモデルにより作成した流路の前後 (1≦x≦32, 1≦y≦256), (257≦x≦288, 1≦y≦256) を助走区間とし，充填層の流入・流出部の流れを整流させるためである．次に$t>t_p$ではx軸両端の境界 (x=1, 1≦y≦254), (x=288, 1≦y≦254) においては，両端で青粒子に密度差を与えることで，青相をx軸負から正の方向に駆動する．流入側境界での密度$\rho_{\rm in}$を解析領域内より高くなるように$\rho_{\rm in}$=2.065，流出側境界の密度を$\rho_{\rm out}$=1.925と低く設定する．**図7** (a)-(d)はt_pをパラメータとして計算をおこない，t_pよりも十分に大きなtをとり，青相の流れが静定した$t=t_p+50000$での固体壁の形状ならびに流速ベクトルと圧力場をあらわす．矢印は8×8個の格子で疎視化して得られた流速ベクトルで，赤点は赤相が形成した固体壁をあらわす．また図中の色は8×8個の格子で疎視化した圧力場を示し，図中の右のカラーバーに対応している．図7(a)-(d)の結果から，本手法によって任意の複雑流路を形成できることが分かる．図7(a)はt_p=200の結果である．赤相が形成した固体壁は真円とはならず不規則な形をとり，粒径にもばらつきがあることから，本手法によって複雑な形状を有する固体壁面が形成されていることが確認できる．この時の流速は極めて低く計算されている．これは固体壁同士の間隔が平均5～10格子程度と見積もられることから，この程度の小さな流路間隔では流動抵抗が大きく，青相には流れが生じにくくなっており，圧力差が一定の場合の充填層の流れの定性的挙動と一致するものと考えられる．これに対して図7(b)はt_p=3000の結果で，固体壁が不規則な形をとり粒径にもばらつきがあることはt_p=200の場合と同じであるが，固体壁の間隔が10～20格子程度と広がっており，青相において流れが生じはじめていることが分かる．図7(c)に示すように，さらに流路の幅が大きくなるt_p=10000の系ではほぼ流路全体に流れが生じ始めており，図7(b)よりも青相の流量が増えることが確認できる．その際に青相は固体壁間を一様に流れるのでなく，流動抵抗の少ない流路を選択的に流れていることが分かる．また流れの生じた流路に沿って二次元的に圧力が降下し，流路幅が狭く，流れが速い場所ほど圧力降下の度合いが大きいことが分かる．流路幅での流れの非一様性や圧力場の二次元性がより顕著に現れていることが確認できる．図7(d)に示すt_p=30000の系ではほぼ円形に成長した固体壁の間に流れが生じ，円形の固体壁の上・下流側では赤相内の流れによどみ領域が発生していることが確認できた．

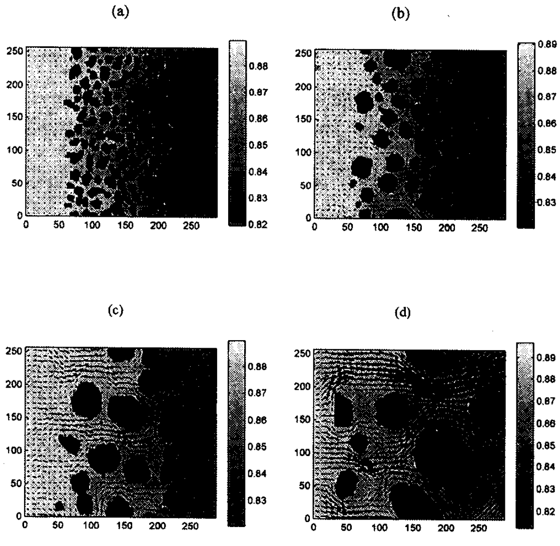

図7　複雑形状流路内の流れの流速分布と圧力分布

図7(a)-(d)の流速分布の観察から流動抵抗の少ない流路を選択していた流れが固体壁間隔が広がるにつれ系全体に広がる挙動が再現できることが分かった．このことは実験による計測・観察や巨視的数値解析手法での計算に工夫を要する複雑流路での物理的な流れを格子ガスオートマトン法によって再現しうることを示すものと考えられる．現在，この結果を模した実験装置を作成し，数値実験結果の妥当性を検討している．

4. 格子ガスオートマトン法の並列計算

格子ガスオートマトン法の圧力・流速等の巨視的物理量は複数の格子の微視的状態を平均する疎視化より求められる．そのため格子ガスオートマトン法を用いて精度よく解析を行うためには統計ノイズの少ない巨視的物理量を得る必要があり，格子の数を多くとり大規模な計算を行う必要がある．格子ガスオートマトン法は衝突・並進の計算に必要な情報が周囲6方向の格子の状態のみに限られているため，局所性の高いデー

タ構造を持ち，並列計算に適していると考えられる．そこで本章では複雑のワークステーションと並列計算ソフト Parallel Virtual Machine (PVM) を用いた格子ガスオートマトン法の並列計算を行い，本手法の並列計算への適応性を確認する．

複数のワークステーション群として，山形大学機械システム工学科にある7台の Sun Spark Station 10を用いた．これらのワークステーション群は10 Base-T のネットワークケーブルで学内 LAN に接続されている．以下に示す計算にあたって，主に次の2つの点に注意してプログラムを行った．

1. 不特定多数の人が用いるワークステーション上で計算が安定かつ効率的に行われること．
2. ワークステーション間のデータ転送量を最小にすること．

1は使用するワークステーションは不特定多数の人間が用いるため，常に変動する CPU 負荷に追従しなくてはならないことを意味する．このため並列計算のモデルにマスター・スレーブ方式を用い，スレーブが計算を担当し，マスターはスレーブの計算時間を監視することとした．2は Ethernet を用いた学内 LAN のデータ転送最大速度が10 Mbit/sec とされており，専用並列計算機の内部バス転送速度に比較してはるかに遅いことによる．このため領域分割に工夫をして，転送に必要なデータ量を減少した．

図8にマスター・スレーブ方式を用いた並列計算の模式図を示す．この図では例としてマスターが1台，スレーブが4台あるとする．マスターは計算領域を横方向にスレーブの数に分割した後，領域をスレーブに送信して計算を開始する．スレーブは粒子の衝突を計算した後，並進の計算で必要となる隣接格子のデータを隣のスレーブと通信する．この際に必要なデータは各スレーブが担当する計算領域の両端の格子情報，すなわち図8の黄色線で示されたデータのみである．スレーブは通信終了後に並進を計算し，衝突・通信・並進に要した時間をマスターに知らせて次のタイムステップの計算を行う．マスターは各スレーブから送られる衝突・通信・並進に要した時間をある時間間隔で平均し，もし各スレーブの計算時間が著しく異なる場合にはそれが等しくなるように領域の再分割を行う．これは，不特定多数の人が利用する学内ワークステーションで計算を効率的に行うための工夫である．

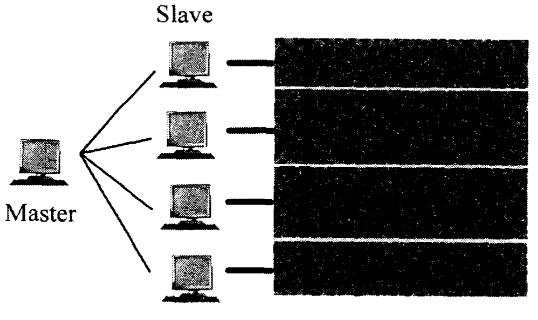

図8　並列計算の模式図

1台から7台の Sun Spark Station 10を用いた場合の並列処理の相対性能 R を**図9**に示す．相対性能 R は1台のワークステーションでの計算時間を T_1, n 台のワークステーションでの計算時間を T_n として次式より求めた．

$$R = T_1/T_n \tag{24}$$

計算対象は3.1節に示した ILG モデルによる二成分の相分離で，格子数は1024×1024格子である．なおこの相対性能測定時には本計算以外の計算は行われていないことを確認している．図9より2から4台のワークステーションではほぼ台数に線形で良好な性能向上が達成されていることが分かる．また7台のワークステーションを用いると6.0倍の性能向上が得られることが分かった．参考までに7台のワークステーション使用時の絶対性能を示すと約300 KCUPS である．KCUPS (K Cell Update number/Sec) は横田等によって定義された格子ガスオートマトン法の格子の更新能力をあらわす単位で，1 KCUP は1秒間あたり1000個の格子を更新する能力があることをあらわす[12]．またこの計算においてスレーブ間通信に要した時間は衝突と並進に要した時間の5%程度であった．

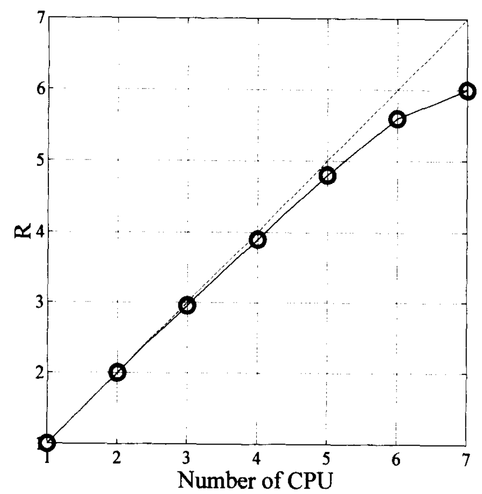

図9　複数台のワークステーションを用いた場合の速度向上率

この結果から格子ガスオートマトン法の大規模計算は10 BASE-T程度の転送速度を持つLAN上においても有効であり，現在安価となったパソコン同士を接続することでも十分に高速な計算環境を得られるといえる．

5. おわりに

格子ガスオートマトン法のモデルとして，FHPモデルとILGモデルを紹介し，その基本的な考え方や特徴を述べた．またこれらのモデルを用いて二成分の分離と複雑形状流路内の流れに応用した結果を紹介した．格子ガスオートマトン法により複雑な界面を自己形成する二成分の分離や複雑な境界を持つ多孔質体内の流れの解析が可能であることが分かった．本手法は統計ノイズが多いことや，正しくNavier-Stokes方程式を満たすためには，低いマッハ数の流れでなければならないという制約をもつが，複数の計算機を用いた並列計算環境で大規模な体系で計算を行うことがこれらの問題の1つの解答となると考えられる．さらに本手法の最大の特徴は数学モデルがすべてBool変数で記述されていることである．この特徴から丸め誤差や打切り誤差を気にする必要がなく，数学モデルを作成するときに立てた仮説をそのまま計算機で調べることができ，前提と仮定を透明にしながら複雑流れを解析できる．このことから，LGAはミクロな物理現象の疎過程を明らかにするための有効な手段となりうると考えられる．

参考文献

1) 高橋：差分法，**1**，培風館（1991）
2) 高橋：応用数値解析，**2**，朝倉書店（1993）
3) U. Frisch, B. Hasslacher and Y. Pomeau: Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions, Complex Systems, **1**, 649/707 (1987)
4) 吉沢，高橋：セルオートマトン法による流れの数値解析，機械学会論文集B編，**57**-540, 183/190 (1991)
5) H. Rothmann and J. M. Keller: Immiscible Cellular-Automaton Fluids, Journal of Statistical Physics, **52**, 1119/1127 (1988)
6) C. Appert and S. Zaleski: Lattice Gas with a Liguid-Gas transition, Physical Review Letters, **64**-1, 116/119 (1990)
7) 妻屋，大橋，秋山：第32回日本伝熱シンポジウム講演論文集，495/496 (1995)
8) J. W. Chan and J. E. Hilliard: Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy, Journal of Chemical Physics, **28**, 258/267 (1958)
9) F. Bai, A. Spence and A. M. Stwar: Numerical computations of coarsening in the one-dimensional Cahn-Hilliard model of phase separation, Physica D, **78**, 155/165 (1994)
10) 降旗，恩田，森：Cahn-Hilliard方程式の差分法による数値的解析，日本応用数理学会論文誌，**3**-3, 217/288 (1993)
11) 松隈，高橋，阿部，安達：セルラオートマトン法をもちいた複雑な境界を持つ流路内の流れの計算，日本機械学会論文集B編，**64**-622 (1998)
12) 横田，伊藤，石塚：はじめての並列プログラミング，**183**，共立出版（1998）