

格子ガスオートマトン (LGA) 法の回転流れへの適用

石黒 美佐子
茨城大学工学部

格子ガスオートマトン (LGA) 法は、従来から x - y や x - y - z 形状のモデルに対して研究開発されており、回転流れに直接適用した報告はない。ここでは LGA 法を 2 次元回転流体への適用を試みる。円を六角形格子で近似し、FHP-I モデルの再構成によって粒子の動きを求め、密度、流速等を求める。回転流体への適用において解決すべき課題としては、隣接ノード識別可能な格子生成法、境界条件、回転流れ $v_\theta=r\omega$ を反映させるための確率的移動を伴う多速度モデルの導入、巨視的領域の選び方、密度、流速等マクロ量の定義、初期粒子配置を得るための Fermi-Dirac 分布の適用方法、N.S 方程式との等価性等、がある。本稿では、これらに対する新しい数学モデルを提案すると共に、計算を試行し、その結果を示す。

Application of Lattice Gas Automaton Scheme to Rotated Fluid Flow

Misako ISHIGURO

Faculty of Engineering, Ibaraki University

Lattice gas automaton (LGA) method has been developed just for x - y or x - y - z geometry, and no direct approach to rotated fluid flow is found. In this report, LGA method is applied to model a 2D rotated fluid flow. FHP-I type hexagonal lattice is restructured to the rotated flow, and macroscopic values, density and fluid velocity are obtained. Several problems specific to the rotated flow are to be solved: hexagonal lattice geometry to easily identify the neighborhoods, boundary condition, multi-speed scheme with statistical movement to represent the rotated fluid velocity $v_\theta=r\omega$, macroscopic statistical domain, expression to obtain the macroscopic values, application of Fermi-Dirac distribution to get initial particle arrangement, and macro-dynamical evidence which shows equivalency to N.S equation. For this purpose, a new mathematical model is presented and trial calculation results are shown.

1. はじめに

格子ガスオートマトン (LGA) 法[1][2]は、従来の連続体近似法に較べて、異なる流体間や流体と障害物との間の界面の取扱いに有効である、柔軟な境界条件の取扱いができるなど複雑な流体モデルへの適応性に優れ、また、並列計算の有効性などもあって近年研究が進み実用に供しつつある[3][4]。LGA においては質量保存則が成立することから連続の式が導き出せる。さらに、2 次元 FHP や 3 次元 FHPC モデルを用いよば、粒子の速度ベクトルのテンソルが 4 次まで等方性を保

ち[1]、粒子速度が小さいという条件のもとに N.S 方程式と等価な式を導くことができる[1][2]。

LGA 法は、従来から専ら x - y や x - y - z 形状で研究開発されており、 r - θ や r - θ - z 形状へ直接適用した報告はない。ここでは LGA 法を 2 次元 r - θ 座標系における回転流体へ適用することを試みる。円を六角格子で近似し、FHP 系モデルの応用によって粒子の動きを求め、密度、流速を得る。

回転流れへの適用において、外側の速い流速、徐々に小さくなる流速を表現できる必要があり、従来の静止

粒子の配置では、内側のノードに多くの静止粒子を配置することになり粒子密度が大きくなり過ぎる。そこで FHP-I モデルの再構成をはかることで解決する。このための数学モデルを示すと共に試行計算の結果を示す。連続の式、オイラーの運動方程式との等価性についても触れる。

2. 格子生成法

LGA の計算の中では、任意のノードの6方向隣接ノード番号が頻繁に必要なになる。1つのノードを (k,g,l) の3つ組で表し (k は六角形の層 (layer) 数, $g=0\sim 5$ は1/6円を単位とした形状区分, l は領域内局所番号), 次式のように直接計算する。

$$i = \sum_{h=0}^{k-1} N_h + k g + l, \quad N_h = 6h. \quad (2.1)$$

N_h は第 h 層におけるノード点の総数である。隣接ノードはテーブルで保持しなくても Table 2.1 のように求められる。ノードは、内点を $s=0$, 境界上のもを $s=1$, 領域外を $s=2$ と区別する。計算を簡単にするために、形状を一旦、最大層の六角形で覆い, $s=2$ なら計算をスキップする“マスク方式”を使用している。結局、ノードは $i \equiv (k,g,l,s)$ の4つ組で表される。

3. 境界条件

粒子の内点における衝突規則は FHP-I モデルに従う。側面における境界条件は“すべり境界”とする。つまり、境界に入射した角度と同じ角度で反対方向に反射させる。境界は凹壁, 平壁, 凸壁の3とおりあるが、それぞれの粒子衝突ルールを Fig.3.1 に示す。

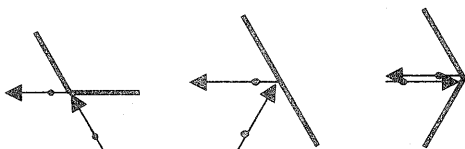


Fig. 3.1 Boundary rules for rotated flow

4. 多速度モデル

各格子点上の粒子の速度は、通常の FHP-I モデルにおいては1タイムステップ間に1つの格子を移動する。しかし、回転流体における回転方向速度は半径 r に比例した流れが優勢となる：角速度 ω を用いて $v_\theta = r\omega$, 外側にいく程速度が大きくなる。この定性的な性質を反映させるために多速度的な取り扱いが必要となる。

各ノード $i \equiv (k,g,l)$ における粒子速度ベクトルを FHP-I と同様に次のように決める。

$$e_j = (\cos j\pi/3, \sin j\pi/3), \quad j=0,1,2,3,4,5. \quad (4.1)$$

粒子の衝突と並進の時間刻みの点で FHP-I モデル[1]とは異なる。粒子は1(時間)ステップで隣接ノードに移動(衝突・並進)するのではなく、移動するかどうかを確率的な取り扱いとする。ノード i の位置座標を \mathbf{x} , その半径座標を r とする。時刻 t から $t+1$ ステップの間の質量(粒子数)が保存される条件を以下のように定義する。

$$\begin{cases} n_j(\mathbf{x} + \mathbf{e}_j, t+1) = n_j(\mathbf{x}, t) + \Delta_j[n(\mathbf{x}, t)], & \text{prob } r/R \\ n_j(\mathbf{x}, t+1) = n_j(\mathbf{x}, t), & \text{prob } 1-r/R \end{cases} \quad (4.2)$$

ここで n_j は、今まさに j 方向に出て行こうとする粒子が存在すれば1, そうでなければ0となる。 $\Delta_j[n(\mathbf{x}, t)]$ は衝突による j 方向粒子の変化量で FHP-I の場合と同じ方法で計算され、質量保存則 $\sum_j \Delta_j[n(\mathbf{x}, t)] = 0$ が成立している。 R は系の半径を表す。(4.2)式は、 r/R の確率で粒子は衝突・並進し隣のノード $\mathbf{x} + \mathbf{e}_j$ に移動し、 $1-r/R$ の確率で元の位置に留まることを示している。内側の粒子ほど r の値が小さく、従って停留頻度が高くなり、低速で動くことになる。

$\mathbf{x} + \mathbf{e}_j$ は \mathbf{x} に隣接するノード (i') の座標で、それらの平均半径は r に近い値である。事実、 \mathbf{x} のノード番号が $i \equiv (k,g,l)$ (g で対称) で与えられているなら、

$$r = \sqrt{(k-l+1)^2 + (k-l+1)(l-1) + (l-1)^2}, \quad (4.3)$$

ここで、格子サイズ=1を仮定。ノード i の隣接ノードの平均半径は Table 2.1 から計算できて $\sqrt{r^2 + 1}$ となる。十分大きな系で、粒子の移動方向に偏りがなければ、隣接ノードの平均半径は r と見なして良い。

Table 2.1 Six nodes around the node point $i \equiv (k,g,l)$

i	e_g	e_{g+1}	e_{g+2}	e_{g+3}	e_{g+4}	e_{g+5}
$(k,g,1), l=1$	$(k+1,g,1)$	$(k+1,g,2)$	$(k,g,2)$	$(k-1,g,1)$	$(k,g-1,k)$	$(k+1,g-1,k+1)$
$(k,g,l), l>1$	$(k+1,g,l)$	$(k+1,g,l+1)$	$(k,g,l+1)$	$(k-1,g,l)$	$(k-1,g,l-1)$	$(k,g,l-1)$

粒子数 n_j は統計的なばらつきがあるので、一般に、時間と空間（ノード）について平均される。ここでは、マクロな領域を定義し、その領域内の粒子の n_j に対して平均をとる； $N_j = \langle n_j \rangle$ 。

$$\begin{cases} N_j(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t+1) = N_j(\mathbf{x}, t) + \Delta_j[N(\mathbf{x}, t)], & \text{prob } \bar{r}_j / R \\ N_j(\mathbf{x}, t+1) = N_j(\mathbf{x}, t), & \text{prob } 1 - \bar{r}_j / R \end{cases} \quad (4.3)$$

ここで、 \bar{r}_j はマクロ領域における $n_j(\mathbf{x}, t)$ を重みとした座標 \mathbf{x} の半径座標の平均で、時間と位置、およびベクトル方向 j に依存した値で次のように計算される。 \bar{r}_j は必ずしも整数ではない。

$$\langle r n_j \rangle / N_j = \bar{r}_j. \quad (4.4)$$

上式を時間に関して連続的に見ると、位置 \mathbf{x} にあった粒子が位置 $\mathbf{x} + \mathbf{c}_j$ に移動するのに平均 R / \bar{r}_j 時間を費やしたと考えることができる。

また、一般の LGA の仮定と同様に、マクロな系においても $\sum_j \Delta_j[N(\mathbf{x}, t)] = 0$ と見なせば、質量保存条件は $\sum_j N_j(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t + R / \bar{r}_j) \equiv \sum_j N_j(\mathbf{x}, t)$ 。 (4.5)

内側の粒子ほど移動時間が長く、外側になるほど1ステップに近い時間で隣に移動できる。このようにすれば角度方向に $d\theta$ 移動するのに外側と内側で同期をとった動きが期待できる。さらに、上式で基準となる時間刻みを R 倍大きくすることによって

$$\sum_j N_j(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t + 1 / \bar{r}_j) \equiv \sum_j N_j(\mathbf{x}, t). \quad (4.6)$$

運動量計算においては、 j 方向に進む粒子は \bar{r}_j の重みを持たせることにする。運動量保存の条件は：

$$\sum_j \bar{r}_j \mathbf{c}_j N_j(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t + 1 / \bar{r}_j) \equiv \sum_j \bar{r}_j \mathbf{c}_j N_j(\mathbf{x}, t). \quad (4.7)$$

\bar{r}_j' は、 $n_j(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t + 1)$ を重みとした座標 $\mathbf{x} + \mathbf{c}_j$ の平均半径を表す。 R が大きいとき、 $\bar{r}_j \approx \bar{r}_j' \equiv r$ (領域の平均半径) と見なせる (証明略)。このとき(4.6)と(4.7)式は、通常の FHP-I モデルに準じた保存式となる。

これらによって、外側の流速をある程度大きくでき、また、半径に比例した流速を表現できる。

5. マクロ領域と密度、平均流速等

x - y 形状では主に長方形領域が用いられるが、ここでは、セルオートマトン法で2枚貝の模様シミュレーションに用いられた多重円環を角度方向に分割したもの [5] を用いる。外側ほど分割数を多くとり、含まれるノード数がほぼ一定になるようにする。

(4.6), (4.7)式で定義した質量と運動量の保存式から、あるマクロ領域 R における平均密度や平均流速を求める。 R に属するノード i が半径 r_j の位置にあると仮定し、ノードの j 方向に割り当てられた粒子数と流量の平均をとる。

$$N_j = \langle n_j \rangle, \quad K_j = \langle r_j \mathbf{c}_j n_j \rangle = \bar{r}_j \mathbf{c}_j N_j. \quad (5.1)$$

数密度と運動量は

$$\rho = \sum_{j=0}^5 N_j, \quad K = \sum_{j=0}^5 K_j = \sum_{j=0}^5 \bar{r}_j \mathbf{c}_j N_j. \quad (5.2)$$

流速は運動量を数密度で割ることで得る。

$$\mathbf{u} = K / \rho \quad (5.3)$$

6. 初期粒子配置

ここで提示したモデルにおいても FHP-I と同様に、2つの状態間の遷移確率が正・逆方向で等しいとする準詳細釣り合いの条件[2]が成立する (証明略)。FHP-I モデルでは、平衡時におけるマクロな意味での粒子の存在に関する期待値は Fermi-Dirac 分布に従う [2]：

$$N_j = 1 / \{ 1 + \exp(h + \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_j) \}. \quad (6.1)$$

ここで、 h は密度 ρ 、 \mathbf{q} は流速 $\mathbf{u} = (v_\theta, v_r)$ を表す。 $|\mathbf{u}| \ll c$ のとき、平衡時分布は次のように計算できる [2]。

$$N_j(\rho, \mathbf{u}) = \rho b + \rho D c_{j,\alpha} u_\alpha / (c^2 b) + \rho G(\rho) Q_{j,\alpha\beta} u_\alpha u_\beta + O(u^3), \quad (6.2)$$

ここで $G(\rho) = D^2 / (2c^4 b) \cdot (b - 2\rho) / (b - \rho)$,

$$Q_{j,\alpha\beta} = c_{j,\alpha} c_{j,\beta} - c^2 / D \cdot \delta_{\alpha\beta}. \quad (6.3)$$

D は次元 (=2)、 b は速度ベクトルの方向の数 (=6)、 c は速度ベクトルの大きさ (=1) を表す。 $c_{j,\alpha}$ 等についてはテンソル表示とする (ここでは x - y 座標で考える)。

領域の半径座標を r とする。 \mathbf{c}_j と \mathbf{u} の積の成分和は以下のように書き換え可能なので

$$c_{j,\alpha} u_\alpha = r c_{j,\alpha} (u_\alpha / r) + r c_{j,\alpha} (u_\alpha / r). \quad (6.4)$$

(6.2), (6.3)式を適用するに当たり、流速は \mathbf{u} の代わりに $\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{u} / r$ を用いることにする。 $\bar{\mathbf{u}}$ は半径に関係しない量となり、従来の FHP-I の流速と同じ定義となる。これによって粒子数を増加させないで、運動量計算時に \mathbf{c}_j を k 倍し、外側の早い流れに対応させる。この結果、運動量を(4.7)式で計算することと整合がとれる。

7. 計算結果

図を見易くするために小さな形状；半径 $R = 10$ 、格子サイズ $\alpha = 1$ 、最大層数 $K = 12$ 、における初期粒子配置の計算結果を Fig.7.1 に示す。粒子密度 $\rho = 1.5$ 、角速

度 $\omega=0.5\pi$ とおいた。

$R=55$ と大きくし初期配列を求め、(5.3)式によって計算した流速はほぼ円還流となった。向きについては、 $(r\omega, 0)$ に較べて最大 5%の誤差が生じた。

4, 5章で示した数学モデルを用いて、 $\rho=1.5$ で 50 ステップ計算を進めその速度ベクトルを Fig.7.2 に表示した。円還流の姿がそれほど破壊されることなくを保持できた。

8. マクロな方程式との等価性

ここで提示した多速度粒子モデルが、流体力学における連続の式や N.S 方程式に大きな矛盾なく帰着できかどうかが問題である。ここでは、Frisch 等の証明方法[2]を用いて macro-dynamical の検討を試みる。

$r=\bar{r}_j$ と仮定し、(4.6)で与えた質量保存式の左辺を 1 次精度で Taylor 級数展開を求めれば

$$N_j(\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}, t+\Delta t) \cong N_j(\mathbf{x}, t) + \partial_{tj} N_j(\mathbf{x}, t)\Delta t + \partial_{xj} N_j(\mathbf{x}, t)\Delta\mathbf{x}.$$

ここで、 ∂_{tj} は 1 次精度の時間微分、 ∂_{xj} は空間微分オペレータを表す。 $\Delta t=1/r$, $\Delta\mathbf{x}=\mathbf{c}_j$ と置けば、

$$N_j(\mathbf{x}+\mathbf{c}_j, t+1/r) \cong N_j(\mathbf{x}, t) + \partial_{tj} N_j(\mathbf{x}, t)/r + \partial_{xj} N_j(\mathbf{x}, t) \mathbf{c}_j^T. \quad (8.1)$$

(4.6)式に代入すれば $N_j(\mathbf{x}, t)$ は消去できて、 r をかければ

$$\partial_{tj} \sum_j N_j(\mathbf{x}, t) + \partial_{\beta j} \sum_j r N_j(\mathbf{x}, t) c_{j,\beta} \cong 0. \quad (8.2)$$

(5.2)式を代入すれば

$$\partial_{tj}(\rho) + \partial_{\beta j}(\rho u_{\beta}) \cong 0. \quad (8.3)$$

2次元モデルでは、 $\mathbf{x}=(x, y)$, $\mathbf{u}=(u, v)$ と置けば、

$$\partial\rho/\partial t + \partial(\rho u)/\partial x + \partial(\rho v)/\partial y \cong 0. \quad (8.4)$$

x - y 座標系における連続の式を満たすことが示された。

オイラー方程式に対しても対流項と圧力項に関して、通常の FHP-I モデルにおける係数の差異と同程度の差異はあるものの類似式が求められる (証明略)。N.S 方程式との等価性については、速度ベクトルのテンソルがランク 4 まで対称性を持つので[1]証明可能であるが詳細は別の機会に委ねる。

参考文献

- [1] S.Wolfram: Cellular Automaton, J. Stat. Phys., Vol.45, Nos. 3/4, p.471-525 (1986).
- [2] U.Frisch, D.d'Humieres, et.al.: Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions, Complex Systems 1, p.649-707 (1987).
- [3] T.Watanabe and K.Ebihara: Numerical Evaluation of Interfacial Area Concentration Using the Immiscible Lattice Gas, Nucl. Eng. Des. 188, p.111- (1999).
- [4] J.Biggs and S.J.Humby: Lattice-Gas Automata Methods for Engineering, Trans. IChemE, Vol.76, Part A, Feb.(1998).
- [5] I.Kusch and M.Markus: Mollusc Shell Pigmentation: Cellular Automaton Simulation and Evidence for Undecidability, J.Theor. Biol., Vol.178, p.333-340 (1996).
- [6] A.K.Gustensen and D.H.Rothman: A Galilean-Invariance Immiscible Lattice Gas, Physica D-47, p.53-63 (1991).
- [7] 加藤, 光成, 築山: セルオートマトン法, 森北出版社, 1998.

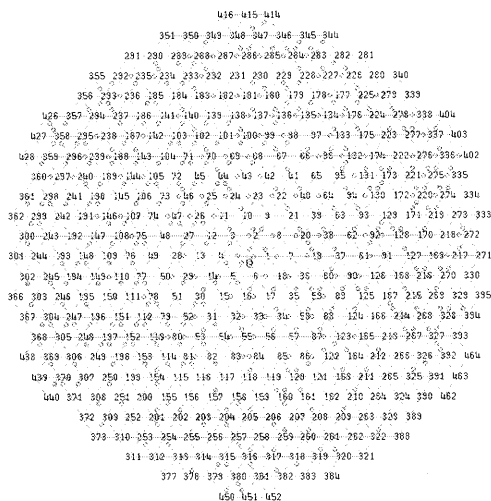


Fig.7.1 Particle arrangement by Fermi-Dirac distribution

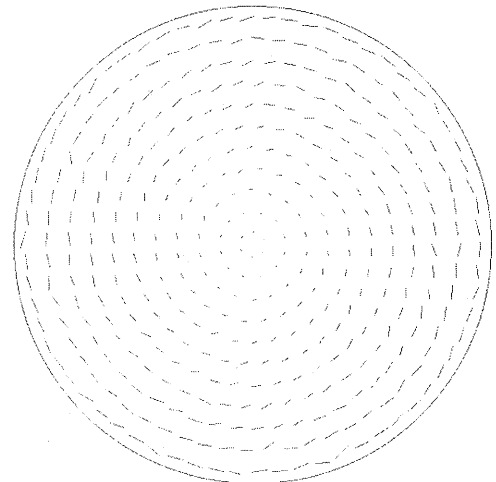


Fig.7.2 Velocity vector after 50 step calculation