

[共同研究成果]

重力によって生じる気液界面挙動のビット演算による簡易解析の検討**—— 気液界面の挙動解析はどこまで簡易なモデル化が可能か？**

松岡 浩

技術士事務所 AI コンピューティングラボ

筆者は、東北大学サイバーサイエンスセンターの共同研究公募制度により、令和6年度から「リカレント型ビット演算による流体・構造体統一解析手法の開発」を実施している。

これは、テシャラ(Dr. Teixeira)による“格子ガス法(面心超立方体格子モデル)[1]”をベースにして「ビット演算」により、“流体と構造体の間に相互作用(FSI)が存在する場合のマルチスケールな流体解析”を高効率に実現しようとする試みである。「ビット演算」には、“高効率な並列計算”と“計算誤差の蓄積がない安定な時間発展乱流計算”を同時に実現できるという優れた特徴がある。

流体と構造体の間の相互作用で一番簡単な例は、流体中に“固定された変形しない構造体”が存在する場合である。通常は、「格子ガス法において流体を構成する多数の“仮想粒子”が、構造体の表面では“逆進(バウンスバック)”するという衝突散乱モデル」が用いられる。これによって、小さな時空間で仮想粒子の動きを平均(疎視化)すると、通常の数値流体力学(CFD)でいう“粘着条件”を実現できる。

このような場合の解析事例のひとつとして、筆者は、以前「流体の流れに対して直交するように四角柱を配置し、四角柱の幅の100倍以上遠方下流領域までの後流の挙動計算」を実施した。その結果、先行研究の実験等で観察される“カルマン渦列の崩壊と再配列”を再現できた[2]。定性的な比較ではあったが、本手法の“仮想的な機構論的モデル”、すなわち、「格子点上を動く仮想粒子の①衝突散乱⇒②力学操作(同期連行)⇒③並進移動の繰り返し」という一連の“仮想的な物理機構”によって時間発展する仮想粒子群の状態を疎視化することによって、いろいろなレイノルズ数条件に対応したマルチスケールな乱流挙動の特徴を再現できる可能性を確認できた。

令和6年度に開始した現在の研究テーマ「リカレント型ビット演算による流体・構造体統一解析手法の開発」は3年計画を想定しており、最終目標は、構造体が移動したり変形したりする場合のFSIについて、“仮想粒子による物理的な機構論的モデル”を構築することである。しかし、本稿は、その途中経過の研究報告であり、今回は「“重力によって分離された気液2相流”と“固定された変形しない構造体”のFSIに関する基本的な試計算」をもとに、極力簡易な方法でその特徴を再現できるか否かを検討したので、これを報告する。イメージとしては、“海底に固定され海上まで鉛直上向きに突き出た剛体円柱構造物”と“海流”の相互作用によって生じる海面挙動の模擬ということになる。

1. 「重力によって生じる気液2相流」を簡易解析の対象として選定した理由

格子ガス法で2相流を解析する場合、通常は、それぞれの相に対応して2種類の仮想粒子を想定する。しばしば、それらは“色”という特性をもつと仮定して、例えば、“赤色粒子”と“青色粒子”というラベルを個々の仮想粒子に付けて区別する。次に「同じ色の仮想粒子間には引力が作用して互いに引き合い、異なる色の仮想粒子間には斥力が作用して互いに反発する」と仮定して、各粒子の“衝突散乱”と“並進移動”の繰り返しを計算する。この時間発展計算が進む過程で、“赤色粒子”と“青色粒子”は混在しながら自己組織化的にある空間分布が生成されていく。そして、この空間分布の時間的変化から、2つの相が接する“界面”の位置の変化を評価して、

2相界面の挙動解析を行うことができる。

今回の研究では、2相界面の特徴的な挙動を“極力簡易な方法”で再現する可能性を検討した。このため、仮想粒子の種類を2種類ではなく、1種類に限定してみる。すなわち、「2相」と言っても、異なる種類の仮想粒子が生成する2相ではなく、1種類の仮想粒子が生成する2相を扱うことにした。イメージとしては、“水”と“水蒸気”の気液2相になる。ただし、今回の簡易解析では、粒子間の“引力”も模擬しない簡易なモデルで試算を行った。従って、“蒸発”や“凝縮”の模擬を目的にはしない。ただし、粒子間の“斥力”については、ゼロでない同じ速度をもつ“仮想粒子”は、同一の格子点に2個以上存在できないモデルであるため、この効果に基づく“斥力”は発現されることになる。また、1種類の“仮想粒子”では、2相の識別に“色”を使うことができない。ここでは、“粒子数密度”の大小によって、気相と液相を区別できそうな事例を考える。

以上のような考察から、単一種類の仮想粒子を用いて、粒子数密度の差によって2相が生成される例として、「重力によって生じる気液2相流」の簡易解析を検討することとした。

2. 今回採用した格子ガス法の実速度モデル（4次元面心超立方体格子3速さ50速度モデル）

今回採用した格子ガス法モデルは、「4次元面心超立方体格子3速さ50速度モデル」である。

まず、4次元空間(x, y, z, r)を考え、その中に各辺が座標軸に平行な4次元直方体形状の直交格子を設定する。

仮想粒子は、4次元格子点の間を飛び移って移動していくが、1時刻ステップで移動できる変位ベクトルは、仮想粒子がもつ4次元速度によって異なり、表1に示す変位が可能であると考えられる。

マクロな流体運動の物理量は、4次元空間を3次元空間に投影して得られる3次元空間を多数のセルに分割し、そのセル内に存在する仮想粒子がもつ質量、運動量、運動エネルギーを合計して得ることができる。

表1の数値は、格子点間の最短距離、仮想粒子の質量、時間発展計算を行う時刻ステップの時間幅をすべて「1」にした

表1. 今回採用したFCHC50速度モデルの仮想粒子速度

エネルギー1をもつ仮想粒子の速度		エネルギー2をもつ仮想粒子の速度		エネルギー0をもつ仮想粒子の速度	
ID	($\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta r$)	ID	($\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta r$)	ID	($\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta r$)
1	(0,0,-1,-1)	25	(-1,-1,-1,-1)	49	(0,0,0,0)
2	(0,0,-1,+1)	26	(-1,-1,-1,+1)	50	(0,0,0,0)
3	(0,-1,0,-1)	27	(-1,-1,+1,-1)	【注】テシヤラの論文において、3速さモデルの場合は、エネルギー0の仮想粒子数を6個にする54速度モデルが推定されている。今回の試算では、極力簡易なモデルを追求する観点からエネルギー0の仮想粒子数を2個とした50速度モデルを採用した。	
4	(0,-1,0,+1)	28	(-1,-1,+1,+1)		
5	(0,-1,-1,0)	29	(-1,+1,-1,-1)		
6	(0,-1,+1,0)	30	(-1,+1,-1,+1)		
7	(-1,0,0,-1)	31	(-1,+1,+1,-1)		
8	(-1,0,0,+1)	32	(-1,+1,+1,+1)		
9	(-1,0,-1,0)	33	(+1,-1,-1,-1)		
10	(-1,0,+1,0)	34	(+1,-1,-1,+1)		
11	(-1,-1,0,0)	35	(+1,-1,+1,-1)		
12	(-1,+1,0,0)	36	(+1,-1,+1,+1)		
13	(+1,-1,0,0)	37	(+1,+1,-1,-1)		
14	(+1,+1,0,0)	38	(+1,+1,-1,+1)		
15	(+1,0,-1,0)	39	(+1,+1,+1,-1)		
16	(+1,0,+1,0)	40	(+1,+1,+1,+1)		
17	(+1,0,0,-1)	41	(+2,0,0,0)		
18	(+1,0,0,+1)	42	(0,+2,0,0)		
19	(0,+1,-1,0)	43	(0,0,+2,0)		
20	(0,+1,+1,0)	44	(0,0,0,+2)		
21	(0,+1,0,-1)	45	(-2,0,0,0)		
22	(0,+1,0,+1)	46	(0,-2,0,0)		
23	(0,0,+1,-1)	47	(0,0,-2,0)		
24	(0,0,+1,+1)	48	(0,0,0,-2)		

場合の数値である。このモデルの場合、仮想粒子がもつエネルギー(運動エネルギー)は、0, 1, 2の3種類に限定される。実際、ID1 から ID24 までの速度をもつ仮想粒子の運動エネルギーは、 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta r)$ の各成分の2乗の和に(1/2)と質量(=1)を乗じて、運動エネルギーが「1」と求まる。また同様に、ID25 から ID48 までの速度をもつ仮想粒子の運動エネルギーは「2」になる。ID49 と ID50 の速度をもつ仮想粒子は静止しており、運動エネルギーは「0」である。

3. 今回の簡易解析の趣旨と採用した格子点体系

今回の簡易解析では、直方体の箱の中に閉じ込められた多数の仮想粒子を想定し、これに“重力”を作用させる。重力の働く向きを+Yとすれば、仮想粒子は+Y向きに押しやられて直方体の箱の中の底面に衝突する。しかし、各格子点には、最大でも表1に示した50種類の速度をもつ仮想粒子を1個ずつしか収容できない。従って、すべての仮想粒子が箱の底面に密着して集結することはない。他方、箱の底面に衝突した仮想粒子は、箱の底面が「固定された変形しない構造体」であるため、底面上で仮想粒子の“逆進(バウンスバック)”が生じる。このため、仮想粒子は、-Y向きの運動量を得るので、上昇を開始し、重力によって+Y向きの下降成分速度をもつ仮想粒子とある確率で衝突散乱することになる。この状況は、ある時間経過の後に平衡状態に達すると考えられる。このときに生じた仮想粒子の密度分布を観察し、密度の高い領域を「液相」、密度の低い領域を「気相」とみなして、両者の間に生成する界面位置を評価する。

次に、この安定した“気液2相”に対して+X 向きの水平外力を加え、直方体の箱内部の右壁に衝突させる。そして、その後の“気液界面”の挙動を観察する。さらに、直方体の箱の中央部に「鉛直方向を向く固定された変形しない円柱」を設置した場合について、同様の観察を行う。

以上の計算を行う際の格子点体系を図1に示す。3次元空間に投影された格子点数は、 $1024 \times 256 \times 256 = \text{約 } 6710 \text{ 万個}$ であり、128時刻ステップごとに $8 \times 8 \times 8$ 個の格子点からなる立方体のセル内で仮想粒子の数を合計し、粒子数密度の数値分布を“スナップショット”として出力する。

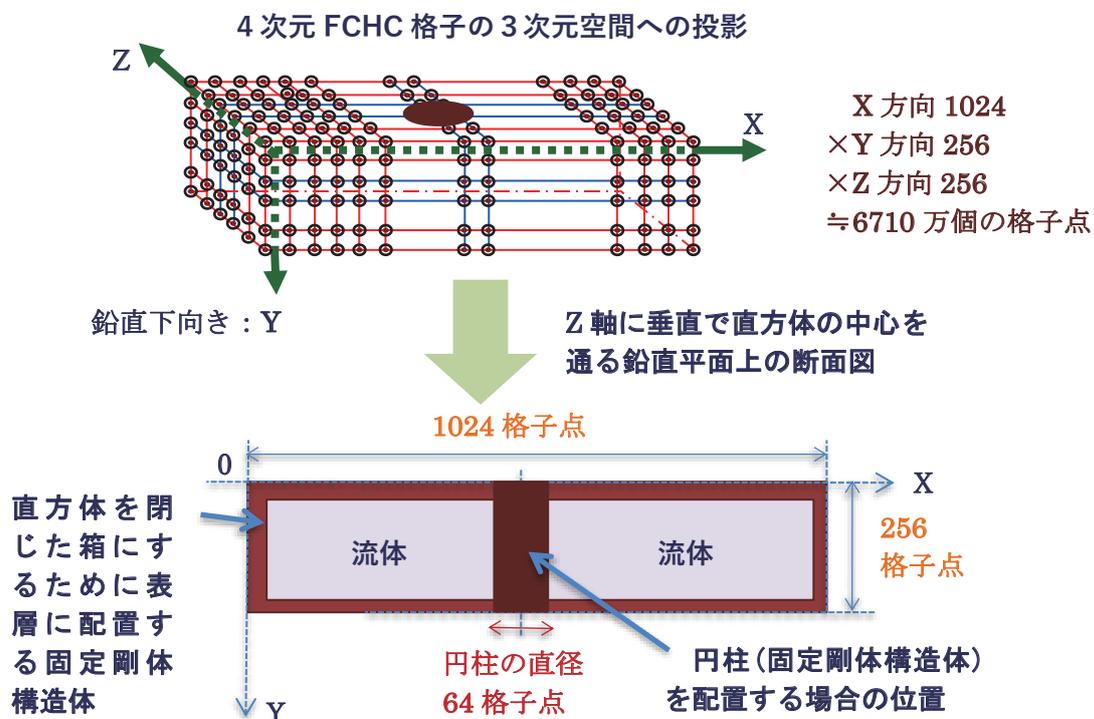


図1. 直方体の箱内部における気液界面の挙動解析を行うための格子点体系

4. 今回の簡易解析における計算手順と仮想粒子に対する3つの力学操作の導入

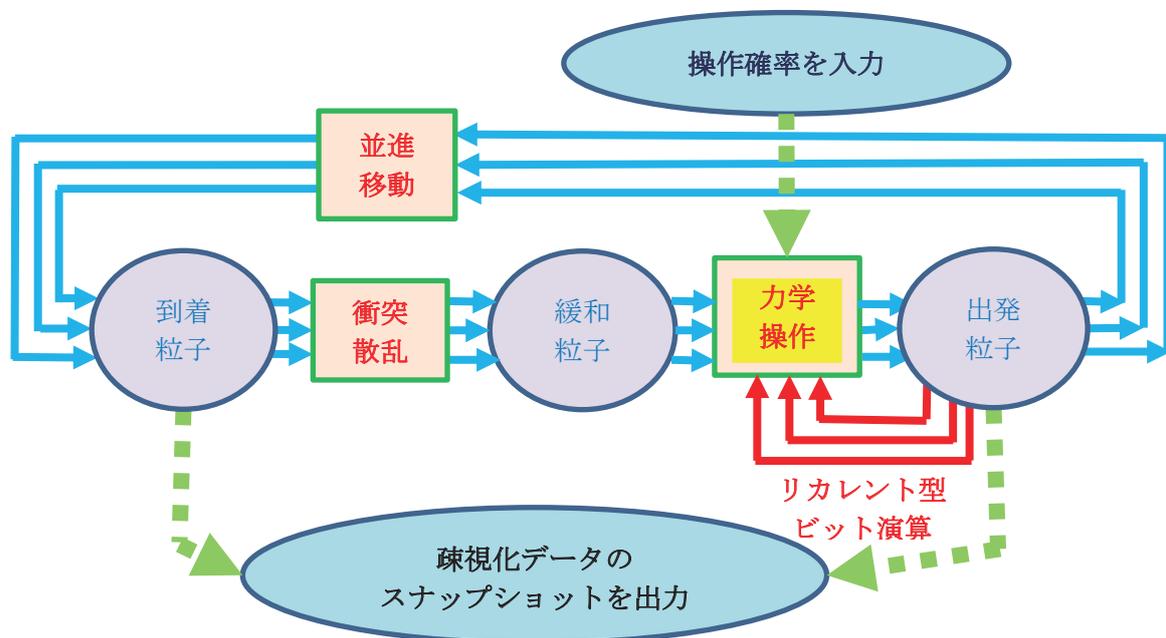
一般的な格子ガス法における計算過程では、いろいろな向きから格子点に到着した“仮想粒子”が、他の向きからその格子点に飛来した“仮想粒子”やその格子点に静止していた“仮想粒子”と衝突して散乱する。「衝突散乱」の前後で、粒子数と運動量と運動エネルギーの保存則が満たされる限り様々な散乱が確率的に生じうる。

一般に、衝突散乱直後の仮想粒子群がもつ速度分布は、衝突直前の到着粒子の速度分布に比べて異方性が緩和された分布になっている。実際、到着粒子がある特定の1方向(向かい合う2つの向き)からのみ飛来するような場合でも、正面衝突を起こした散乱直後の仮想粒子ペアがもつ速度は、特定の1方向に限らず様々な方向に互いに逆向きで分布可能である。すなわち、仮想粒子がもつ速度分布の異方性が緩和されることになる。

これらの「緩和粒子」は、もっとも簡単な格子ガス法モデルの場合、そのまま格子点から出発させて「出発粒子」と一致する。しかし、今回の簡易解析では、「緩和粒子」が「出発粒子」になる過程の間に、“仮想粒子”に対して次の3つの“力学速操作”(連行操作、逆進操作、加速操作)を行う過程を追加することにする。

“連行操作”は模擬する流体の粘性を低く維持し、大きなRe数条件で模擬することを可能にする。具体的には、今回の衝突散乱後の出発粒子が前回の出発粒子と同じ向きに出発する確率を増やす操作を行う。“逆進操作”は、「流体」と「固定された変形しない構造体」の間の相互作用において“粘着条件”を実現する。“加速操作”は、流体粒子の運動量を意図的に直接変化させることで、任意の向きへの加速を生じさせる“体積力”を実現する。

以上の“力学操作”を組み込んだ今回の格子ガス法の計算手順を図2に示す。



【力学操作】

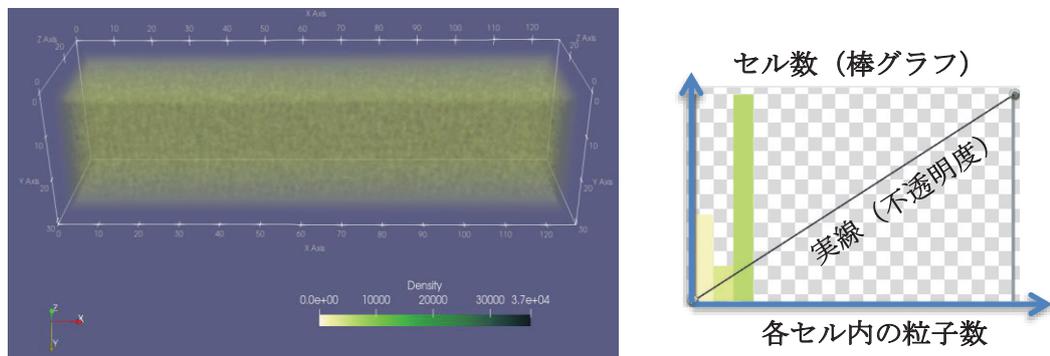
- ①連行操作：流体粘性を低下させるために行う同じ向きへの粒子の連続出発確率の増加操作
- ②逆進操作：固定剛体構造体の表面で流体粒子をバウンスバックさせる粒子速度の反転操作
- ③加速操作：重力や人為的なある向きへの力を模擬するため行う粒子速度の強制的変更操作

図2. “力学操作”の過程を組み込んだ今回の格子ガス法の計算手順

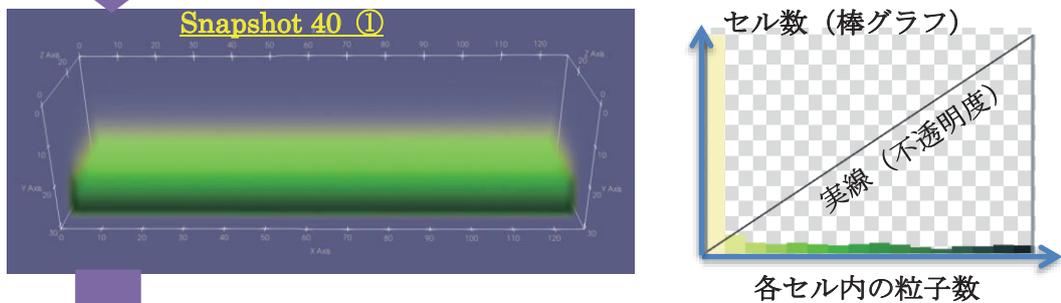
5. 重力によって気液界面を生成させる試計算と ParaView による可視化

直方体形状の箱の中に仮想粒子を満ちし重力を作用させて気液界面を生成する計算を行った。シミュレーション計算を開始する最初の時刻ステップ 0 の時点で、各格子点には、そこに存在できる仮想粒子の最大数の 20% の数の仮想粒子をランダムな速度分布で配置した。この結果、疎視化して得られるマクロナ運動量は平均でゼロであり、流体は、直方体形状の箱の中で静止している。図 3 のスナップショット 0 の画像において、直方体の上下左右前後の透明な部分は、箱の壁の厚みの部分に対応している。そこには仮想粒子が存在しないため透明になっている。次に、スナップショット 1 の時点から 39 の時点までの間、+Y 向き (鉛直下向き) に仮想粒子を加速する。その結果、仮想粒子の数密度が高い領域が下層に、数密度が低い領域が上層にできる。

Snapshot 0: 直方体の閉じた箱内部のすべての格子点にランダムな向きの速度をもつ仮想粒子を密度 20% で配置



Snapshot 1~39: “重力”を模擬して鉛直下向きに“加速操作”を行うと、Snapshot 40 よりかなり以前に気相液相の平衡状態に到達



Snapshot 40 ②: 粒子数密度が低い領域を気相とみなし透明にして気液界面を直視

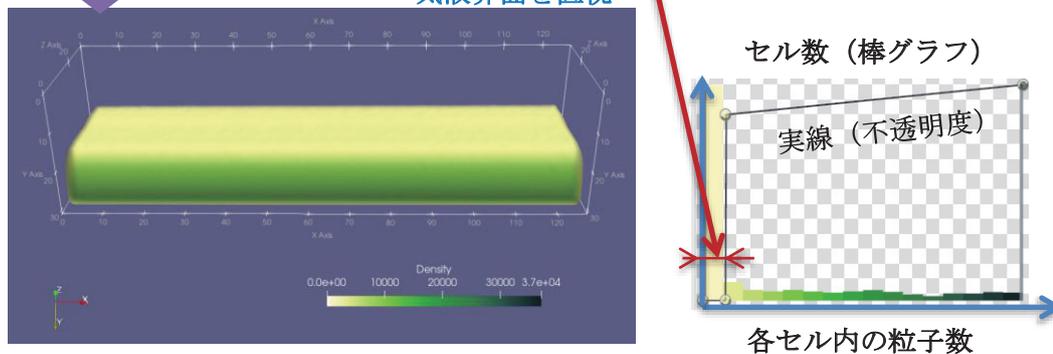


図 3. 重力によって生じた気液界面の可視化方法 (ParaView)

このとき、数密度が高い領域を“液相”、低い部分を“気相”と解釈すれば、両者の間に“気液界面”が生成することになる。図3の下2つの画像は、どちらもスナップショット40における仮想粒子の各セルにおける数密度分布を表しているが、可視化の方法が異なっている。前述のとおり、3次元空間に投影された直方体体系は $1024 \times 256 \times 256$ 個の格子点からなり、これを $8 \times 8 \times 8$ 個の格子点からなる“セル”で疎視化しているため、セルの数は、合計131072個である。図3の右側のグラフでは、ひとつのセル内に収容される仮想粒子の数を16個のビンに分割して横軸に示す。グラフ中の「棒グラフ」は「セル内の粒子数が該当する範囲にあるセルの数」を表す。また、グラフ中の「実線」は、セル内に収容されている粒子数に応じて、そのセルの空間位置を「不透明度を変えた緑色」で着色して画像表示するときの“不透明度”を示している。

図3において、スナップショット0からスナップショット40への棒グラフの変化を見ると、スナップショット40における「数密度が小さい位置で棒グラフの高度が高い部分」が「気相」の領域に対応し、「棒グラフの高度が低く数密度が高い側に平坦に分布している部分」が「液相」の領域に対応していると解釈できることがわかる。

気液界面の可視化には、PraViewを用いた。粒子数密度が低い“気相”と解釈できる領域の“不透明度”をゼロにして見えなくすると、“液相”と解釈した領域の表面を直視することができる。これが図3の一番下の画像であり、“気液界面”と解釈した部分を明瞭に観察できる。

6. 気液2相に水平力を作用させ箱の側面に衝突させる試計算

スナップショット40は、十分安定した気液界面が生成された状態である。ここで、スナップショット41から44に至る間、+X向きにすべての仮想粒子を強制加速してみる。

その後のスナップショット45以降では、強制加速をやめて、重力だけの影響下で気液界面がどのように変化するかを観察した。

強制加速時における気液界面の計算結果を図4に、その後の変化を図5に示す。

図4を見ると、+X向きの加速によって、仮想粒子が直方体の箱の右壁に衝突して、気液界面の高度が鉛直上向きに上昇している様子が見てとれる。

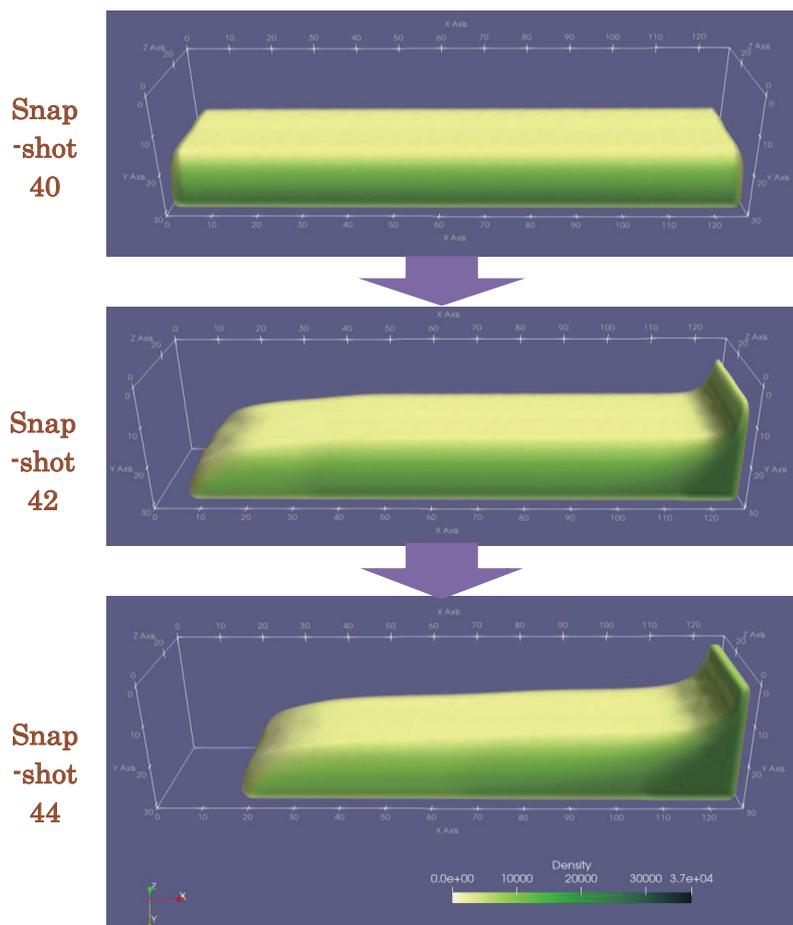


図4. Snapshot 41~44において、直方体の箱内部のすべての仮想粒子に対して右向きの“加速操作”を行った場合の気液界面の過渡変化

図5のスナップショット 45 を見ると、仮想粒子が右壁に衝突することで生じた図4のスナップショット 44 における気液界面の山が、右壁に反射した後、左向きに進行しはじめたことがわかる。この左向き進行は、スナップショット 48, 51 と続き、スナップショット 54 では、左壁で反射した後で右向きに進行する山が観察できる。その後のスナップショット画像から、気液界面の山は、両側の壁の間を往復しながら減衰していく様子を確認できる。スナップショット 75 の時点あたりでは、山はほとんど消えて、気液界面は、ほぼ安定した状態にもどっている。

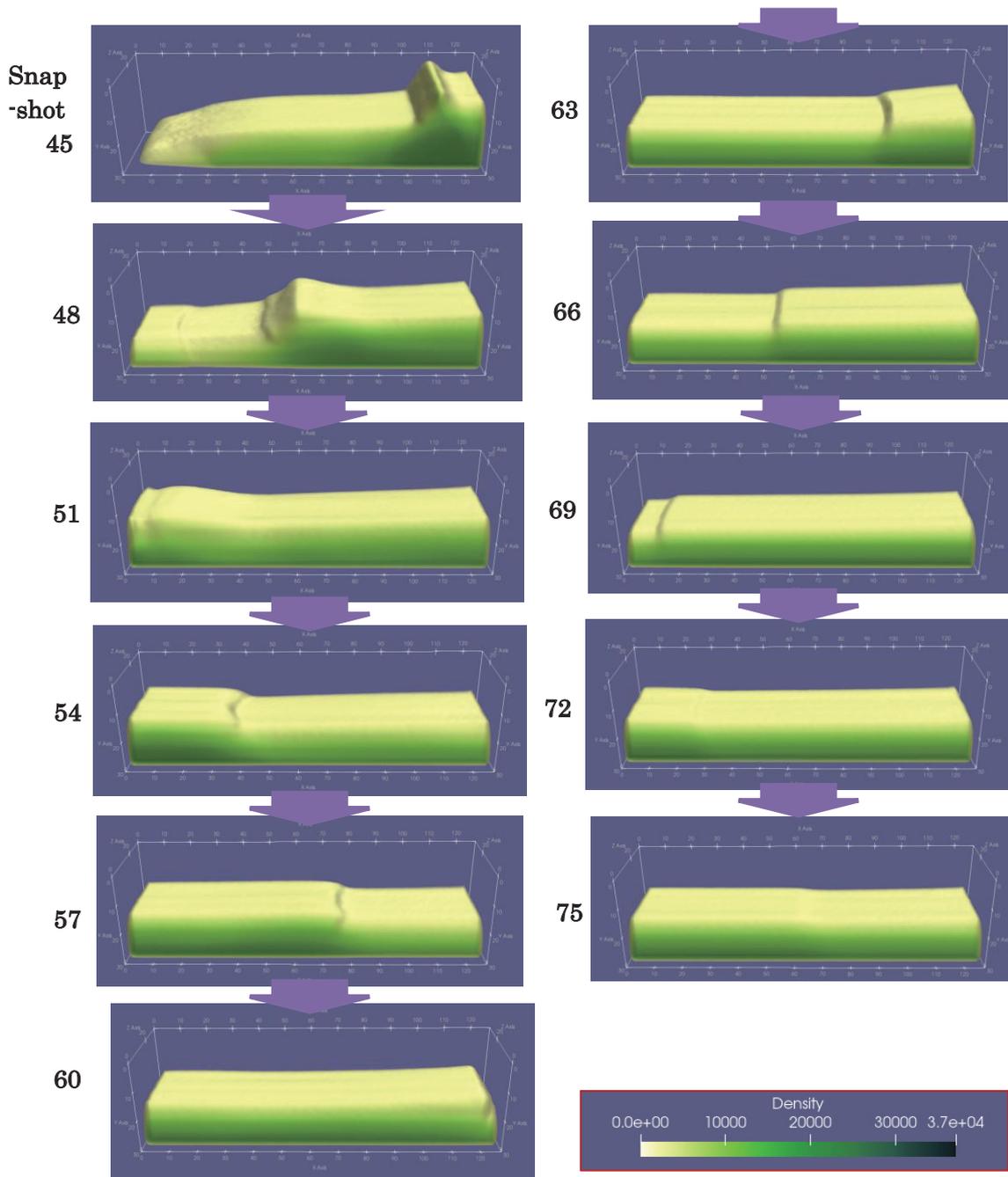


図5. 右壁で反射した後の気液界面の過渡変化 (Snapshot 45~75)

7. 箱の側面間を往復する気液2相流の中央に鉛直円柱を設置した場合の試計算

箱の側面間を往復する気液2相流の中央に「鉛直方向に固定された変形しない円柱」を設置して、気液2相流と剛体構造体との相互作用による気液界面の変化をみる計算を行った。スナップショット41から44までの間、右壁向きにすべての仮想粒子を強制加速する。その後のスナップショットでは、強制加速をやめて重力だけの影響下で気液界面の変化を観察した。強制加速時における気液界面の計算結果を図6に、その後の変化を図7に示す。

スナップショット40は、十分安定した気液界面が生成された状態である。中央の鉛直円柱領域は、仮想粒子が存在しないので、粒子数密度分布の可視化では透明になって見えない。

ここで、スナップショット41から44に至る間、+X向き(水平右向き)にすべての仮想粒子を強制加速してみる。

このときの気液界面の変化を図6に示す。+X向きの加速によって、仮想粒子が直方体の箱の右壁に衝突して、気液界面の高さが鉛直上向きに上昇している様子は円柱がない場合と同様である。

特徴は、気液界面が、円柱の左側面で上昇し右側面で下降している。この円柱側面における気液界面の特徴的な形状は、よく知られている「円柱側面に生じる流体から圧力分布」の特徴が高さ方向に反映されたものと解釈できるであろう。

強制加速をやめて、「重力」と「円柱の存在」だけの影響を受けるスナップショット45以降における気液界面の変化を図7に示す。

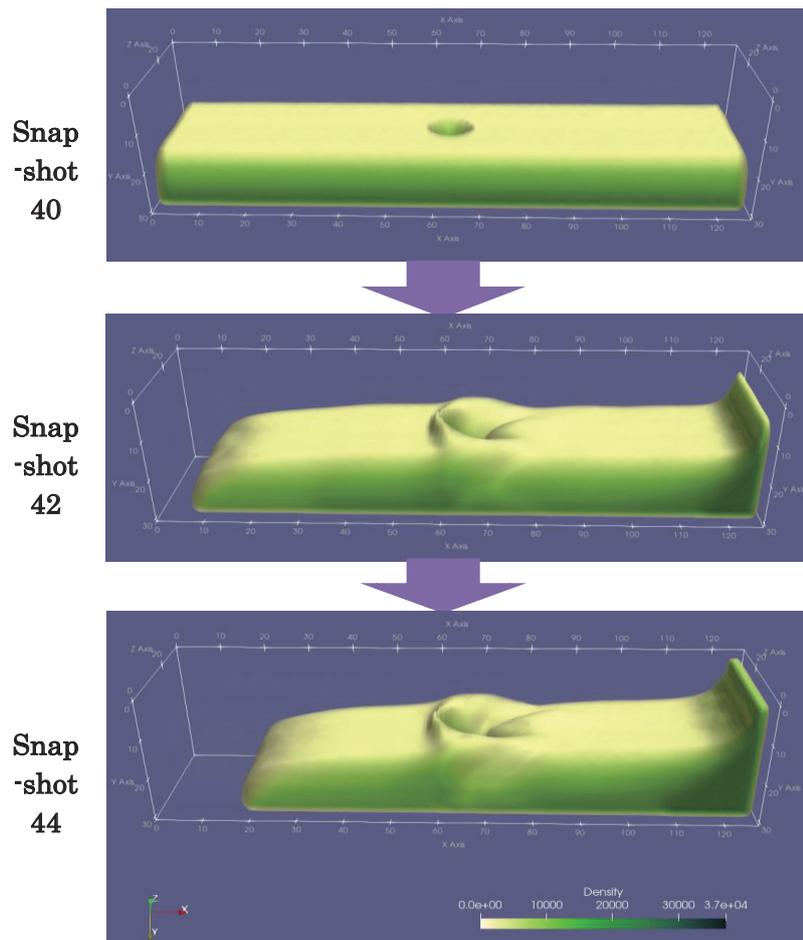


図6. Snapshot 41~44において、円柱を除く直方体の箱内部のすべての仮想粒子に対して右向きの“加速操作”を行った場合の気液界面の過渡変化

図7のスナップショット45を見ると、仮想粒子が右壁に衝突することで生じた図6のスナップショット44における気液界面の山が、右壁に反射した後、左向きに進行しはじめたことがわかる。この左向き進行は、スナップショット48, 51と続き、スナップショット54では、左壁で反射した後で右向きに進行する山が観察できる。その後のスナップショット画像から、気液界面の山は、両側の壁の間を往復しながら減衰していく様子を確認できる。スナップショット75の時点あたりでは、山はほとんど消えて、気液界面は、ほぼ安定した状態にもどっている。これらの特徴は、円柱が存在しない場合と共通である。円柱が存在する場合の特徴は、図7のスナップ48に現れている。常識的には当然の結果であるが、2相流が左向きに進行する場合、気液界面が、円柱の右側面で上昇し左側面で下降している。

以上、常識的な流体挙動から推測できる特徴を反映した、一見、違和感のない結果が得られた。しかし、総合考察で、問題点を述べる。

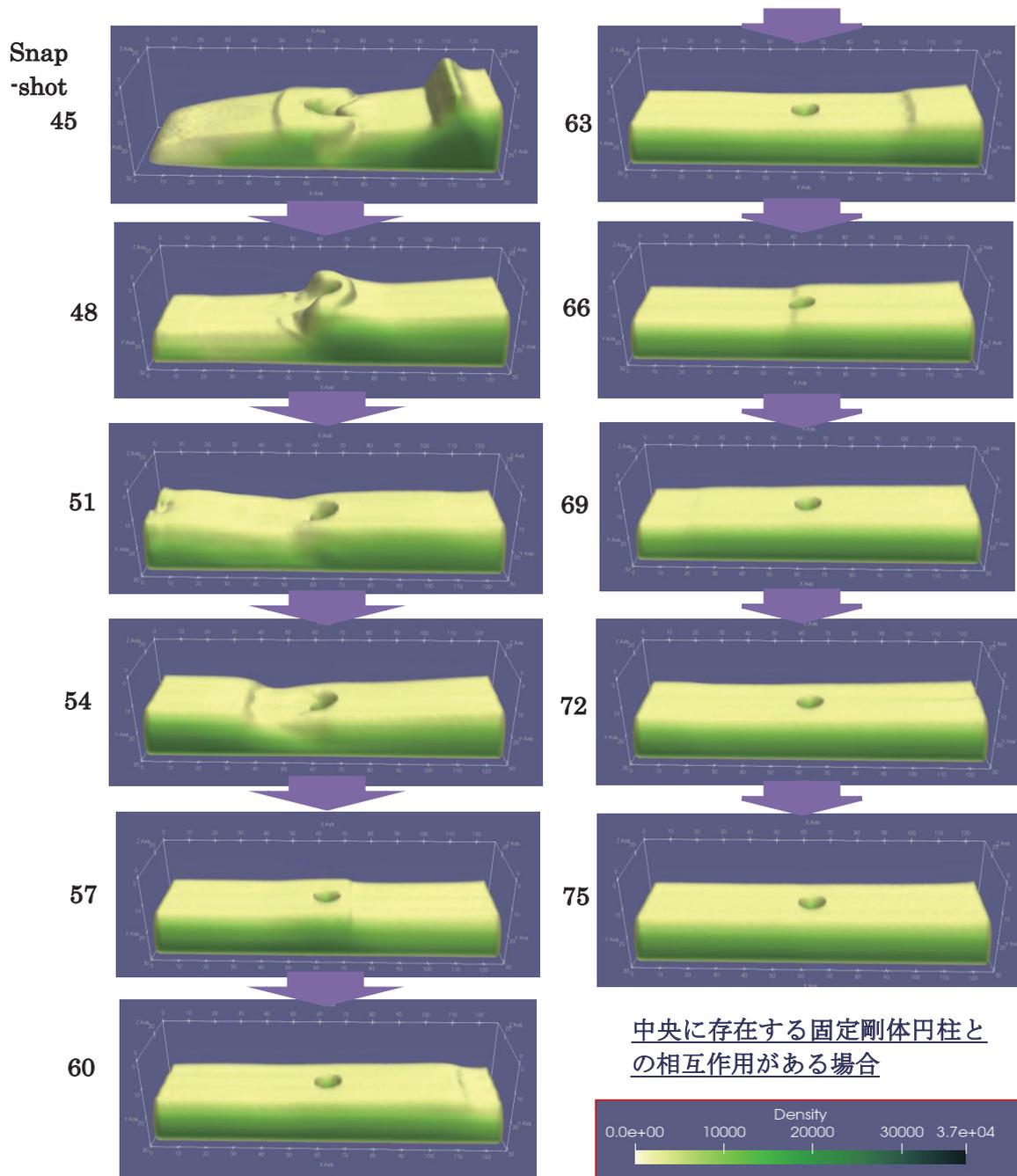


図7. 右壁で反射した後の気液界面の過渡変化 (Snapshot 45~75)

8. 総合考察

(1) 計算性能

本研究では、重力によって生じる気液界面の特徴的な挙動を、極力簡易な方法で再現する可能性を検討した。このために、“高効率な並列計算”と“計算誤差の蓄積がない安定な時間発展乱流計算”を同時に実現できるという優れた特徴がある「格子ガス法のビット演算」を利用した。

具体的には、本稿で述べたすべての計算には、東北大学サイバーサイエンスセンターのAOBA-Sを使用し、1ケース（6710万個の3次元格子点について仮想粒子挙動の時間発展計算を128時刻ステップ×100スナップショット行う計算）を、「16コア/CPU×8CPU」のベクトルプロセッサによる128MPI並列で行い、計算時間は約26分であった。（ベクトル化率：約97.2%、ベクトル長：約217）特別なチューニングは行っていないプログラムではあるが、それなりの計算性能を発揮できたと考えている。

(2) 特徴的な流体挙動の再現

本件研究では、格子ガス法の基本的な計算手順に、個別仮想粒子への“力学操作”として3種類の操作（“連行操作”、“逆進操作”、“加速操作”）を追加している。“連行操作”では、粘性を制御するパラメータである「連行確率」の設定が必要であり、“加速操作”では仮想粒子の「駆動確率」の設定が必要である。“逆進操作”は、「固定された変形しない構造体」との境界条件に対してのみ適用できる方法である。また、仮想粒子の「初期存在確率」の設定も必要である。

本研究では、これらの条件の妥当性の検討は行わずに、試行的な値として、連行確率(0.4%)、駆動確率(重力5%、水平外力80%)、初期存在確率(20%)の場合を解析している。

さらに、表面張力の発現原因である「粒子間引力」もモデル化していない簡易なものであることに注意が必要である。

今回の簡易解析は、以上のような状況を前提にして、「気液界面と解釈できる面」の挙動を再現し、可視化画像の時間変化の定性的な考察を行った。この意味で、非常に乱暴な考察ではあるが、今後の研究に向けての示唆として、以下の知見を得たと考える。

○「重力によって生じる気液界面」の挙動については、気液2相が大きな変動をしない限りは、上記3種類の力学操作を導入した格子ガス法で、その特徴を定性的に再現できる可能性が高い。

ただし、より多様な条件範囲での気液界面の簡易挙動解析を行う場合は、原理的に“粒子間引力”を「力学操作」に追加する必要があるだろう。

(3) ParaViewによる可視化における「気液相を分ける粒子密度のしきい値」

気液界面の可視化画像は、「気液相を分ける粒子密度のしきい値」の設定に大きく依存する。

図8に「箱の側面間を往復する気液2相流の中央に鉛直円柱を設置した場合の試計算」のスナップショット44から51について、「気液相を分ける粒子密度のしきい値」を3通りに変えた場合の可視化画像を示す。

図8の一番左側の列に示した可視化画像は、粒子密度が非常に低いセルのみを透明にした場合の可視化である。図7と比較すると、粒子密度がかなり低い値の“等密度面”の画像が表示されている。特に、スナップショット48の印象は、同じデータであるにもかかわらず、大きく印象が異なる。

図8の中央および右側の列に示した可視化画像は、図7の場合よりも粒子密度が高いセルまで透明にした場合である。すなわち、粒子密度がかなり高い値の“等密度面”の画像が表示されている。これら2列の可視化画像にほとんど違いが見られないのは、図8の上部に示した棒グラフから明らかなように、液相とみなして不透明化されているセルの数が、しきい値が変化してもほとんど変わらないからである。

(4) 仮想粒子密度が低い領域において非物理的な挙動が発現する可能性

図8の一番左側の列に示した可視化画像のスナップショット46から50を見ると、左側に進む気液2相流が円柱に衝突して流路が前後に2分されて進み、箱の左壁に衝突している様子が見てとれる。気相部分にこのような流れが生じる可能性もあるが、違和感がある。この流れが見える領域の粒子密度は、図8左上の棒グラフとしきい値が交わる位置の粒子密度でありかなり低い。この問題は、2種類の粒子モデルで回避できるので深い考察は行わないが、次の教訓を得た。○粒子密度がかなり低い領域では、仮想粒子の衝突散乱が十分行われなくなり、格子ガス法による計算結果が流体挙動を模擬できなくなっている可能性があるため注意が必要である。

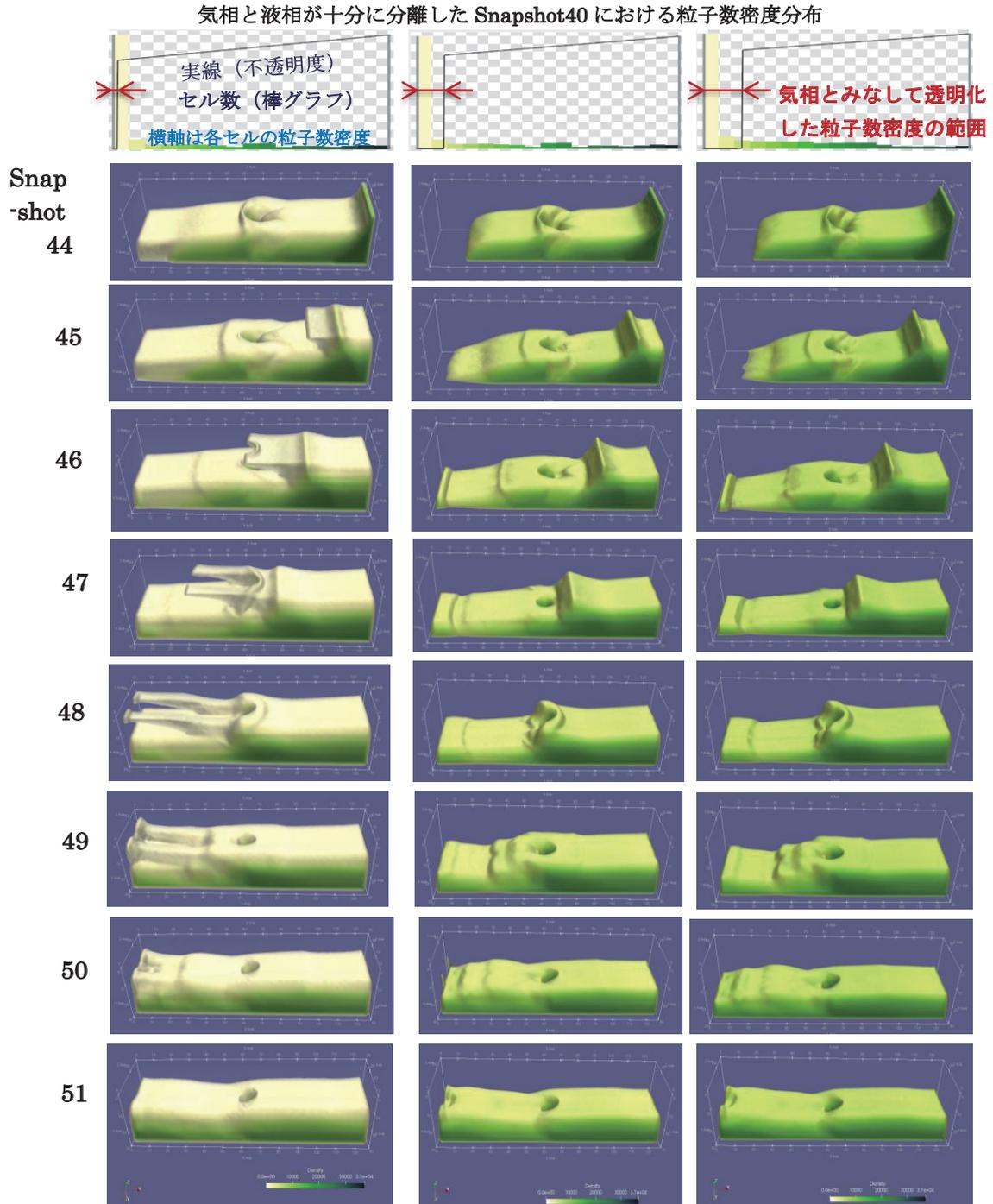


図8. 気相とみなして透明化する粒子数密度の範囲を変えた場合の「可視化された気液界面」の過渡変化の違い

(5) 今後の展望との関係

冒頭に述べたとおり、本研究の最終目標は、構造体が移動したり変形したりする場合の FSI について、“仮想粒子による物理的な機構論的モデル”を構築することである。

構造体が移動したり変形したりする場合は、流体と構造体の相互作用によって、流体から構造体側に送られた運動量によって構造体の運動や形状が変化し、また、構造体の運動に伴う運動量が流体に伝達される。この状況を模擬するため、「流体粒子の格子ガス法モデル」と「構造体粒子の格子ガス法モデル」を統合する必要がある。いったん、この格子ガス法による FSI 解析統合モデルが完成すれば、すべての時間発展計算をビット演算で高速かつ低コストで実行することができる。また、格子ガス法モデルに基づく物理的過程は、比較的単純な階層型ニューラルネットワークの計算構造に置き換えることができる。この結果、ニューラルネットワークで表現された“FSI 解析サロゲートモデル”を構築することができる。

あとは、実験データや計測データ、あるいはナビエ・ストークス方程式の高精度計算の入出力データを教師データとして学習させて、上記 8 (2) に述べたパラメータを学習させる。この場合、学習結果は、格子ガス法による仮想粒子の物理的挙動のパラメータを決定するので、物理的解釈が可能な AI 学習を実現できるであろう。また、格子ガス法に基づくビット演算は、本質的に確率的な期待値計算であり、ゲート型量子コンピュータの直接的な適用分野に成り得る。

以上、かなり長い道のりであるが、一步一步進めてまいりたい。

謝辞

筆者は、長年にわたり、東北大学サイバーサイエンスセンターのベクトル型スーパーコンピュータを利用して頂いてきた。現在の AOBA-S(SX-Aurora TSUBASA)までのベクトル型スーパーコンピュータの開発と新機種への絶え間ない更新の歴史を振り返ると、その性能向上は驚くべき科学技術の成果であったと思う。今日、“量子コンピュータ”の実用化もはじまりつつあり、さらに進化した使い勝手のよいスーパーコンピュータの開発導入と円滑な運用、そして、きめ細かいユーザー支援活動に対するニーズはますます重要になると思われる。関係者のこれまでのご努力に心から感謝するとともに、今後の活動継続に大きな期待をよせる次第である。

参考文献

- [1] Christopher M. Teixeira, “Continuum Limit of Lattice Gas Fluid Dynamics”, Ph.D. Thesis, MIT, 1993
- [2] 松岡, “仮想光子場揺動モデルによる格子ガス法流体解析の可能性”, SENAC Vol.58 No.2, pp.16-26, 2025