

ビット演算によるCFD(数値流体力学)と等価な高精度流体解析手法 A Fluid Analysis Method by bitwise operations for achieving high accuracy of CFD

高度情報科学技術研究機構
松岡 浩

流体解析の時間発展計算をビット演算で超高速に実行する方法として“格子ガス法”がある。まず、流体が存在する空間中に格子を張り、多数の仮想粒子を格子点上に配置する。仮想粒子は、格子点上でのみ他の仮想粒子と衝突して進行の向きを変えながら格子点間を移動していく。この時間発展過程をビット演算で計算しながら、ときどき、仮想粒子の数や速度を局所平均してマクロな物理量の空間分布を算出し、流体挙動のスナップショットを得る。このとき、仮想粒子がもつ質量や運動量が衝突の前後で保存されるような粒子衝突を想定する限り、その挙動は、自然界におけるある条件下の流体挙動とかなり似たものになる。しかしながら、仮想粒子の速度が、自然界の流体分子のように連続的な値をとれないため、格子ガス法が導くマクロな挙動は、連続流体を仮定している一般的な数値流体力学 (CFD) が導く流体挙動とは多少異なったものになる。25年も前の話であるが、テシャラ (Christopher M. Teixeira) は、ある工夫をしてこの“多少の差異”を解消する方法を考案した。これによって、格子ガス法は、CFDと同等な精度をもった流体解析手法となりうる。本稿では、テシャラの方法を筆者なりの解釈で説明する。

1. はじめに

もし、流体シミュレーションの時間発展計算をビット演算で直接行うことができれば、様々なメリットがある。プログラムを工夫すれば、ひとつの格子点に関係する演算を1ビット幅で行うことができる。このため、一般的な倍精度計算を行う8バイトレジスタを使用した場合、1 CPUコアでも64格子点についての並列計算を実行できる。また、各時刻ステップの物理量を実数で追跡する一般的な数値流体力学 (CFD) に比べると必要なメモリ容量を小さくすることができる。さらに、実数演算に比べて回路を構成するトランジスタ数が桁違いに少ない論理演算とシフト演算が動作の主体なので、消費電力を少なくすることができる。特に重要なことは、ビット演算自体では誤差が生じないので、どんな流体挙動に対しても安定的に答えをだせることで

ある。従って、激しく変化する乱流も仮想粒子の衝突規則から自己組織化して生成できるかもしれない。概念が簡単であるため、いろいろな分野への応用アイデアの発想を誘発できる。そして、非平衡統計力学など今後の発展が期待される分野と深く関係し、サイエンスとしての魅力も奥深いと思われる。

2. 連続速度分布が可能な仮想粒子モデル

ファインマンの物理学講義によれば、もし、後世にただひとつの知識だけしか残すことができないのであれば、“粒子仮説”を選ぶとある。“粒子”の挙動によって諸現象を説明しようとする試みは、非常に広範な分野をカバーできる。ここでは、仮想的な粒子が、いろいろな向きにいろいろな速さをもって自由に飛びまわれる物理空間を想定する。“仮想粒子”について以下の仮定をする。

(1)連続速度分布が可能な仮想粒子モデルの仮定

- ①仮想粒子は不生不滅である。
- ②仮想粒子は、空間中を単独で、いろいろな向き*i*にいろいろな速さ C_j で並進移動することができる。すなわち、仮想粒子がもつ速度 \vec{C}_j の向き*i*と大きさ C_j がとる値には、無限個の可能性があり、連続的な速度分布をもつ。
- ③個々の仮想粒子は、相加的な性質をもつ“物理量”を担うことができる。その物理量が存在する空間位置は、仮想粒子の移動にともなって一緒に移動するが、並進移動の過程においては、その量自体は不変である。
- ④仮想粒子は、ときどき、同じ局所的な時空間に存在する他の仮想粒子と“相互作用”を起こすことができる。このとき、お互いの仮想粒子が担う“相加的な物理量”の量を変化させることができるが、相互作用に関係した仮想粒子が担う当該物理量の総和は、相互作用の前後で不変である。

(2)保存則の成立

局所的な時空間領域 (\vec{x}, t) において、速度 \vec{C}_j をもつ仮想粒子がひとつの格子点に存在する粒子数を $n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t)$ 、その平均値を $\overline{n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t)}$ で表わせば、仮想粒子の“数”に関する保存則として、次式が成立する。

$$\sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{\partial \overline{n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t)}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \overline{\vec{C}_j n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t)} \right) = 0$$

($\vec{\nabla}$: 空間勾配ベクトル演算子)

ただし、テシヤラによる格子ガス法の場合は、4次元面心超立方体格子を用いるので、 $\vec{\nabla}$ は、4次元空間における勾配ベクトル $\vec{\nabla} \equiv (\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3}, \frac{\partial}{\partial x_4})$ になる。

上記保存則から、個々の仮想粒子が担う“相加的な物理量”として、“質量(m)”、“運動量($m\vec{C}_j$)”、“エネルギー($\varepsilon_j \equiv \frac{1}{2} m\vec{C}_j \cdot \vec{C}_j$)”

の3つを想定すれば、次式が成立する。

$$\sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{\partial \overline{n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t)}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \overline{\vec{C}_j n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t)} \right) \begin{bmatrix} m \\ m\vec{C}_j \\ \varepsilon_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vec{0} \\ 0 \end{bmatrix}$$

従って、仮想粒子の挙動に関して、3つの保存則が成立することを導ける。

・仮想粒子の質量保存則：

$$\frac{\partial \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} \overline{(m n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t))} \right\}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} \overline{(m \vec{C}_j n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t))} \right\} = 0$$

・仮想粒子の運動量保存則：

$$\frac{\partial \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} \overline{(m \vec{C}_j n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t))} \right\}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} \overline{(m \vec{C}_j \vec{C}_j n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t))} \right\} = \vec{0}$$

・仮想粒子のエネルギー保存則：

$$\frac{\partial \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} \overline{(\varepsilon_j n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t))} \right\}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} \overline{(\varepsilon_j \vec{C}_j n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t))} \right\} = 0$$

すなわち、「連続速度分布が可能な仮想粒子モデル」では、上記の手順で得られた3つの保存則は、CFD(数値流体力学)における“質量保存則(連続の式)”、“運動量保存則(ナビエ-ストークス方程式)”、“エネルギー保存則”と同じ代数構造をもち、保存量の値も同じになることがわかる。

3. 離散速度分布の場合の仮想粒子モデル

第2章で述べた仮想粒子モデルは、仮想粒子が持ちうる速度 \vec{C}_j について、向き*i*と速さ C_j は無数の可能性がある連続分布だと仮定した。本章では、速度の種類を有限個に限定した離散分布の場合のモデルを考えてみる。これが、“格子ガス法”のモデルに他ならない。

(1)仮想粒子モデルによる“静止流体”の記述

平衡状態にある“静止流体”を仮想粒子モデルで表現することを考える。直感的ではあるが、多数の仮想粒子が“並進移動”と“相互作用”を等方的に繰り返してマクロな視点では見かけ上変化がない状態を想像すればよい。このとき、格子ガス法計算用の格子点においては、速度 \vec{C}_j をもつ仮想粒子の存在確率分布 $\overline{n_{\vec{C}_j}(\vec{x}, t)}$ は、速度

の向き i によらず、速さ C_j ごとに一定である。

(2) 仮想粒子モデルによる“運動流体”の記述

我々が現実世界で目にする実在流体の挙動は千変万化するものである。しかし、これを上記 (1) の静止流体に対する仮定と関連づけるため、次の仮定をする。

- ① 流体のマクロな速度 \vec{u} は、 (\vec{x}, t) についての“連続関数”である。
- ② 従って、十分小さい局所的な時空間領域を考えれば、当該領域に存在する流体のマクロな速度 $\vec{u}(\vec{x}, t)$ は、一様かつ定常であると仮定できる。
- ③ この局所領域内に存在する格子ガス法計算用の格子点における速度 \vec{C}_j をもつ仮想粒子の存在確率分布 $n_{\vec{C}_j}(\vec{u}(\vec{x}, t))$ は、平衡状態にある静止流体を速度 “ $-\vec{u}(\vec{x}, t)$ ” で動く座標系から見た場合の存在確率分布に等しいと考えられる。

従って、 $n_{\vec{C}_j}(\vec{u}(\vec{x}, t)) = n_{\vec{C}_j - \vec{u}(\vec{x}, t)}(\vec{u} = \vec{0})$ の右辺に現れる仮想粒子の存在確率分布をもとに、マクロな相加物理量を算出すれば、CFDにおける3つの保存則を正確に再現できることになる。

しかしながら、仮想粒子がもちうる速度が有限個の離散速度モデルの場合は、仮想粒子がもつ速度ベクトルとして、“ $\vec{C}_j - \vec{u}(\vec{x}, t)$ ” という値を使うことが一般的には許されない。“ $\vec{C}_j - \vec{u}(\vec{x}, t)$ ” という速度ベクトルが、使うことが許されている別の速度ベクトル “ \vec{C}_j ” にたまたま一致すればいいのだが、 $\vec{u}(\vec{x}, t)$ はいろいろな値をとりうるので、一致は不可能である。従って、数値計算では、「速度ベクトル “ $\vec{C}_j - \vec{u}(\vec{x}, t)$ ” をもつ仮想粒子の存在確率」を用いることはできず、それと

同じ効果をもたらす「別の複数の異なる速度ベクトル “ \vec{C}_j ” をもつ仮想粒子の存在確率のセット」を用いることになる。すなわち、仮想粒子の存在確率分布 $n_{\vec{C}_j - \vec{u}(\vec{x}, t)}(\vec{u}(\vec{x}, t))$ をもとに算出したマクロな相加物理量と同じ値が得られるような仮想粒子の存在確率分布 $n_{\vec{C}_j}(\vec{u}(\vec{x}, t))$ のセットを作りだすことが目標になる。

(3) マクロな速度が $\vec{u}(\vec{x}, t)$ の流体を記述する仮想粒子の存在確率分布 $n_{\vec{C}_j}(\vec{u}(\vec{x}, t))$

マクロな速度が $\vec{u}(\vec{x}, t)$ で与えられる流体を記述する仮想粒子の存在確率分布 $n_{\vec{C}_j}(\vec{u}(\vec{x}, t))$ は、第4章で導出するが、 \vec{u} の関数という形で次式のように書ける。

$$n_{\vec{C}_j}(\vec{u}) = \frac{1}{1 + e^{-\ln r_j + m\alpha(\vec{u}) + m\vec{C}_j \cdot \vec{u} \gamma(\vec{u}) + \epsilon_j \beta(\vec{u})}}$$

この後の計算で、この式からマクロな物理量を導きだし、CFDの結果と比較するが、その際には、 \vec{u} の向き \vec{e}_u (ここで、 \vec{e}_u は、 \vec{u} 向きの単位ベクトル) を変化させる必要はない。そこで、 $n_{\vec{C}_j}(\vec{u})$ を、 \vec{u} の大きさである“速さ” u のみの関数とみて、 $u \ll C_j$ であることから、テイラー展開を行い、 u に対する依存性を分析する。さらに、後述の計算処理において、「 u の3次精度まで計算すること」及び「格子の空間構造の対称性に起因する仮想粒子がもちうる速度ベクトルの対称性から奇数次数が消えること」を考慮し、 $\alpha(\vec{u})$ 、 $\beta(\vec{u})$ 、 $\gamma(\vec{u})$ について、 u に関する0次の項 (定数項) と2次の項のみの存在を仮定し、現時点で以下の形で記述しておく。

$$\alpha(\vec{u}) \equiv \alpha_0 + \alpha_2 u^2 + O(u^4),$$

$$\beta(\vec{u}) \equiv \beta_0 + \beta_2 u^2 + O(u^4),$$

$$\gamma(\vec{u}) \equiv \gamma_0 + \gamma_2 u^2 + O(u^4)$$

以上の結果を、表式1にまとめる。

[表式 1] 単位ベクトル \vec{e}_u の向きにマクロな速さ u をもつ一様定常速度 \vec{u} の流体が存在する局所的な時空間領域 (\vec{x}, t) 内に配置された各格子点上において、速度ベクトル $\vec{C}_{j\mu}$ をもつ仮想粒子が存在する確率：

$$\begin{aligned} \overline{n_{\vec{C}_{j\mu}}(u)} &= \overline{n_{\vec{C}_{j\mu}}(0)} + \frac{d\overline{n_{\vec{C}_{j\mu}}(u)}}{du}(0) + \frac{1}{2} \frac{d^2\overline{n_{\vec{C}_{j\mu}}(u)}}{du^2}(0)u^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3\overline{n_{\vec{C}_{j\mu}}(u)}}{du^3}(0)u^3 + O(u^4) \\ &= N_j \\ &\quad - N_j(1 - N_j)m\gamma_0(\vec{C}_{j\mu} \cdot \vec{e}_u)u \\ &\quad - N_j(1 - N_j)(m\alpha_2 + \varepsilon_j\beta_2)u^2 + \frac{1}{2}N_j(1 - N_j)(1 - 2N_j)m^2\gamma_0^2(\vec{C}_{j\mu} \cdot \vec{e}_u)^2u^2 \\ &\quad - N_j(1 - N_j)m\gamma_2(\vec{C}_{j\mu} \cdot \vec{e}_u)u^3 + N_j(1 - N_j)(1 - 2N_j)m\gamma_0(m\alpha_2 + \varepsilon_j\beta_2)(\vec{C}_{j\mu} \cdot \vec{e}_u)u^3 \\ &\quad - \frac{1}{6}N_j(1 - N_j)(1 - 6N_j + 6N_j^2)m^3\gamma_0^3(\vec{C}_{j\mu} \cdot \vec{e}_u)^3u^3 \\ &\quad + O(u^4) \end{aligned}$$

ここで、 $N_j \equiv \frac{1}{1 + e^{-\ln r_j + m\alpha_0 + \varepsilon_j\beta_0}}$ ($j = 0, 1, 2, \dots$, 有限個)、 $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0, \alpha_2, \beta_2, \gamma_2$: 定数

(4) テシヤラによる格子ガス法169速度モデルによる考察

第2章(2)に示した3つの保存則の式の中に現れる5つのマクロな物理量：

$$\begin{aligned} &\sum_{j\mu=1}^2 m \cdot \overline{n_{\vec{C}_{j\mu}}(u)}, \\ &\sum_{j\mu=1}^2 m \vec{C}_{j\mu} \cdot \overline{n_{\vec{C}_{j\mu}}(u)}, \\ &\sum_{j\mu=1}^2 \varepsilon_j \cdot \overline{n_{\vec{C}_{j\mu}}(u)}, \\ &\sum_{j\mu=1}^2 m \vec{C}_{j\mu} \vec{C}_{j\mu} \cdot \overline{n_{\vec{C}_{j\mu}}(u)}, \\ &\sum_{j\mu=1}^2 \varepsilon_j \vec{C}_{j\mu} \cdot \overline{n_{\vec{C}_{j\mu}}(u)} \end{aligned}$$

について、「連続速度分布が可能な仮想粒子モデル(すなわち、和の上限値 $? = \infty$)」に基づく仮想粒子存在確率分布を用いれば、それらは、それぞれ、CFDにおける“質量密度”、“運動量密度(質量カレン

ト)”、“エネルギー密度”、“運動量カレント(応力テンソル)”、“エネルギーカレント”に正しく対応し、CFDにおける3つの保存則を正確に再現できるはずである。

しかし、「離散速度分布の場合の仮想粒子モデル(すなわち、 $? =$ 有限個)」に基づく仮想粒子存在確率分布を用いて5つのマクロな物理量を求めた場合は、何かの差異が出てくるであろう。このあと、表式1を5つのマクロな物理量に代入して、CFDとの差異を導出してみる。

ただし、以下の計算では、具体性を増すため「テシヤラの格子ガス法169速度モデル(すなわち、 $? = 169$)」の場合を想定する。このモデルの基本的な仮定を「解説1：テシヤラの格子ガス法169速度モデルにおける仮定」に示す。

〔解説1〕 テシャラの格子ガス法169速度モデルにおける仮定：

1. 仮想粒子は、すべて同じ質量： m [kg] をもつ。
2. 仮想粒子は、4次元空間中に存在する最小格子点間隔が ΔL [m]の“面心超立方体(FCHC)格子”の格子点上を、一定の時刻ステップ間隔($\Delta\tau$ [sec])ごとに同期して並進移動し、その移動を実現するのに必要な4次元速度： \vec{C}_{ji} [m/sec] (エネルギーが $\varepsilon_j \equiv \frac{1}{2} m(\vec{C}_{ji} \cdot \vec{C}_{ji})$ [J]で、速度の向きが i)をもつ。具体的には、以下のとおり。
 - (1) エネルギー0の粒子： 1 (存在可能な粒子数の仮定： $d_0=1$ …任意性がある。)

$$\vec{C}_{0i} = (0, 0, 0, 0) \text{ m/sec}$$
 - (2) エネルギー mc^2 [J]の粒子： 24通り (存在可能な速度の向きの数： $d_1=24$)

$$\vec{C}_{1i} = (\pm c, \pm c, 0, 0), (\pm c, 0, \pm c, 0), (\pm c, 0, 0, \pm c), (0, \pm c, \pm c, 0),$$

$$(0, \pm c, 0, \pm c), (0, 0, \pm c, \pm c) \text{ [m/sec]}$$
 ここで、 $c \equiv \Delta L / \Delta\tau$
 - (3) エネルギー $2mc^2$ [J]の粒子： 24通り (存在可能な速度の向きの数： $d_2=24$)

$$\vec{C}_{2i} = (\pm 2c, 0, 0, 0), (0, \pm 2c, 0, 0), (0, 0, \pm 2c, 0), (0, 0, 0, \pm 2c),$$

$$(\pm c, \pm c, \pm c, \pm c) \text{ [m/sec]}$$
 - (4) エネルギー $3mc^2$ [J]の粒子： 96通り (存在可能な速度の向きの数： $d_3=96$)

$$\vec{C}_{3i} = (\pm c, \pm c, \pm 2c, 0), (\pm c, \pm c, 0, \pm 2c), (\pm c, \pm 2c, \pm c, 0),$$

$$(\pm c, 0, \pm c, \pm 2c), (\pm c, \pm 2c, 0, \pm c), (\pm c, 0, \pm 2c, \pm c),$$

$$(\pm 2c, \pm c, \pm c, 0), (0, \pm c, \pm c, \pm 2c), (\pm 2c, \pm c, 0, \pm c),$$

$$(0, \pm c, \pm 2c, \pm c), (\pm 2c, 0, \pm c, \pm c), (0, \pm 2c, \pm c, \pm c) \text{ [m/sec]}$$
 - (5) エネルギー $4mc^2$ [J]の粒子： 24通り (存在可能な速度の向きの数： $d_4=24$)

$$\vec{C}_{4i} = (\pm 2c, \pm 2c, 0, 0), (\pm 2c, 0, \pm 2c, 0), (\pm 2c, 0, 0, \pm 2c),$$

$$(0, \pm 2c, \pm 2c, 0), (0, \pm 2c, 0, \pm 2c), (0, 0, \pm 2c, \pm 2c) \text{ [m/sec]}$$
3. 同一の速度をもつ仮想粒子は、同じ格子点に同時に2つ以上存在できない。
4. 仮想粒子どうしの相互作用(衝突)は、格子点上のみで生じ、衝突の前後で、仮想粒子の質量、運動量、エネルギーの総和が保存される衝突規則を確率的に適用する。
5. 衝突によって相互に移りかわれる仮称粒子の存在状態の間の遷移確率は等しい。

(5) テシャラの格子ガス法169速度モデルによるマクロな物理量の計算

テシャラの格子ガス法169速度モデルに基づいて、“仮想粒子存在確率分布” $n_{\vec{C}_{ji}}(u)$ から、5つのマクロな物理量を計算してみよう。結果を表式2から表式6に示す。

これらの式変形は複雑であるが、「格子ガス法が、ある工夫をすれば、CFDと等価

な精度をもちうる数値シミュレーション手法になりうる」ことを確信するためには、

具体的な式変形手順まで理解しておく必要がある。本稿では、あえて、詳細を示した。

なお、式の表示をできるだけ簡単にするため、本稿では、以下の簡略化表示を用いている。

$$(X)_0 \equiv \sum_{j=0}^4 d_j N_j X,$$

$$(X)_1 \equiv \sum_{j=0}^4 d_j N_j (1 - N_j) X,$$

$$(X)_2 \equiv \sum_{j=0}^4 d_j N_j (1 - N_j) (1 - 2N_j) X,$$

$$(X)_3 \equiv \sum_{j=0}^4 d_j N_j (1 - N_j) (1 - 6N_j + 6N_j^2) X,$$

ここで、 d_j : ($j = 0,1,2,3,4$) は、

$$d_0 = 1, d_1 = 24, d_2 = 24, d_3 = 96, d_4 = 24$$

$$N_j \equiv \frac{1}{1 + e^{-\ln r_j + m\alpha_0 + \varepsilon_j \beta_0}} \quad (j = 0,1,2,3,4) ,$$

ただし、 r_j, α_0, β_0 : 定数

また、上記以外で、以下の式変形に登場する“D”は、面心超立方体格子の次元の数で $D = 4$ 、 $\gamma_0, \alpha_2, \beta_2, \gamma_2$ は、表式 1 に現れる定数である。

[表式 2] CFD の “質量密度” に対応させたい量 :

$$f \cdot \sum_{ji=1}^{169} m \cdot \overline{n_{C_{ji}}(u)} \quad (\text{ここで、} f : \text{単位体積当たりの格子点数 } [1/m^4])$$

$$= f \cdot \sum_{j=0}^4 \sum_{i=1}^{d_j} \left[m \cdot \left\{ N_j - N_j(1 - N_j)(m\alpha_2 + \varepsilon_j \beta_2) u^2 + \frac{1}{2} N_j(1 - N_j)(1 - 2N_j) m^2 \gamma_0^2 (\overline{C_{ji}} \cdot \overline{e_u})^2 u^2 + O(u^4) \right\} \right]$$

$$= f \cdot (m)_0 + f \cdot \left\{ \alpha_2 (m^2)_1 + \beta_2 (m\varepsilon_j)_1 + \frac{\gamma_0^2}{D} (m^2 \varepsilon_j)_2 \right\} u^2 + O(u^4)$$

⇒ CFD における “密度” ρ の u に対する依存性を高精度に再現するためには、第 1 項を “密度” の格子ガス法による定義式とし、第 2 項 = 0 とすればよい。すなわち、次式を成立させることで、 u の 3 次精度を達成できる。

$$\rho \equiv f \cdot (m)_0 \equiv f \cdot \sum_{j=0}^4 d_j N_j m \quad \dots \text{A 式}$$

$$\alpha_2 (m^2)_1 + \beta_2 (m\varepsilon_j)_1 = -\frac{\gamma_0^2}{D} (m^2 \varepsilon_j)_2 \quad \dots \text{B 式}$$

[表式 3] CFD の “運動量密度(質量カレント)” に対応させたい量 :

$$f \cdot \sum_{ji=1}^{169} m \overline{C_{ji}} \cdot \overline{n_{C_{ji}}(u)} \quad (\text{ここで、} f : \text{単位体積当たりの格子点数 } [1/m^4])$$

$$= \frac{2f}{D} \gamma_0 (m\varepsilon_j)_1 u \overline{e_u} + \frac{2f}{D} \left\{ \gamma_2 (m\varepsilon_j)_1 + \alpha_2 \gamma_0 (m^2 \varepsilon_j)_2 + \beta_2 \gamma_0 (m\varepsilon_j^2)_2 + \frac{1}{D+2} \gamma_0^3 (m^2 \varepsilon_j^2)_3 \right\} u^3 \overline{e_u} + O(u^4) \overline{e_u}$$

⇒ CFD における “運動量” の u に対する依存性を高精度に再現するためには、第 1 項 = $\rho u \overline{e_u}$ 、第 2 項 = 0 とすればよい。すなわち、次式を成立させることで、 u の 3 次精度を達成できる。

$$\gamma_0 = \frac{D\rho}{2f(m\varepsilon_j)_1} \quad \dots \text{C 式}$$

$$\gamma_2 = \frac{-\gamma_0}{(m\varepsilon_j)_1} \left\{ \alpha_2 (m^2 \varepsilon_j)_2 + \beta_2 (m\varepsilon_j^2)_2 + \frac{1}{D+2} \gamma_0^2 (m^2 \varepsilon_j^2)_3 \right\} \quad \dots \text{D 式}$$

[表式4] CFDの“エネルギー密度”に対応させたい量：

$$f \cdot \sum_{ji=1}^{169} \overline{\varepsilon_j \cdot n_{\vec{c}_j}(u)} \quad (\text{ここで、} f : \text{単位体積当たりの格子点数 } [1/m^4])$$

$$= f \cdot (\varepsilon_j)_0 + f \cdot \left\{ \alpha_2 (m\varepsilon_j)_1 + \beta_2 (\varepsilon_j^2)_1 + \frac{\gamma_0^2}{D} (m\varepsilon_j^2)_2 \right\} u^2 + O(u^4)$$

⇒ CFDにおける“エネルギー密度”の u に対する依存性を高精度に再現するためには、第1項を“内部エネルギー密度”の格子ガス法による定義式とし、第2項 $= \frac{\rho}{2} u^2$ とすればよい。すなわち、次式を成立させることで、 u の3次精度を達成できる。

$$U \equiv f \cdot (\varepsilon_j)_0 \equiv f \cdot \sum_{j=0}^4 d_j N_j \varepsilon_j \quad \dots \text{E式}$$

$$\alpha_2 (m\varepsilon_j)_1 + \beta_2 (\varepsilon_j^2)_1 = \frac{\rho}{2f} - \frac{\gamma_0^2}{D} (m\varepsilon_j^2)_2 \quad \dots \text{F式}$$

[表式5] CFDの“運動量カレント(応力テンソル)”に対応させたい量：

$$f \cdot \sum_{ji=1}^{169} \overline{m \vec{c}_j \vec{c}_j \cdot n_{\vec{c}_j}(u)} \quad (\text{ここで、} f : \text{単位体積当たりの格子点数 } [1/m^4])$$

$$= \frac{2f}{D} (\varepsilon_j)_0 I + \frac{2f}{D} \left\{ \alpha_2 (m\varepsilon_j)_1 + \beta_2 (\varepsilon_j^2)_1 + \frac{\gamma_0^2}{D+2} (m\varepsilon_j^2)_2 \right\} u^2 I + \frac{4f\gamma_0^2}{D(D+2)} (m\varepsilon_j^2)_2 u^2 \vec{e}_u \vec{e}_u + O(u^4) \vec{e}_u \vec{e}_u$$

⇒ 第1項は、 $\frac{2U}{D}$ に等しい。また、CFDにおける“応力テンソル(運動量カレント)”の u に対する依存性を高精度に再現するためには、第2項+第3項 $= \rho u^2 \vec{e}_u \vec{e}_u$

とすればよい。ここで、 $g \equiv \frac{D(m\varepsilon_j^2)_2}{f(D+2)(m\varepsilon_j)_1} \rho$ と置くと、第2項は $\frac{1}{D} \rho u^2 (1-g) I$ に、

第3項は $g \rho u^2 \vec{e}_u \vec{e}_u$ に等しくなる。(←実際、「第3項 $= g \rho u^2 \vec{e}_u \vec{e}_u$ 」とC式から g の定義式が求まる。また、第2項にF式を代入し、次にC式を代入して g の定義を適用すれば、 $\frac{1}{D} \rho u^2 (1-g) I$ が得られる。) 従って、次式を成立させることで、 u の3次精度を達成できる。

$$g = 1 \quad \dots \text{G式}$$

[表式6] CFDの“エネルギーカレント”に対応させたい量：

$$f \cdot \sum_{ji=1}^{169} \epsilon_j \vec{C}_{ji} \cdot \overline{n_{C_{ji}}(u)} \quad (\text{ここで、} f : \text{単位体積当たりの格子点数 } [1/m^4])$$

$$= \frac{2f}{D} \gamma_0 (\epsilon_j^2)_1 u \vec{e}_u + \frac{2f}{D} \left\{ \gamma_2 (\epsilon_j^2)_1 + \alpha_2 \gamma_0 (m \epsilon_j^2)_2 + \beta_2 \gamma_0 (\epsilon_j^3)_2 + \frac{1}{D+2} \gamma_0^3 (m \epsilon_j^3)_3 \right\} u^3 \vec{e}_u + O(u^4) \vec{e}_u$$

⇒ CFDにおける“エネルギーカレント”の u に対する依存性を高精度に再現するためには、第1項 $= \frac{3}{2} U u \vec{e}_u$ 、第2項 $= \frac{1}{2} \rho u^3 \vec{e}_u$ とすればよい。ここで、

$$\gamma \equiv \frac{2f \gamma_0}{DU} (\epsilon_j^2)_1 = \rho \frac{(\epsilon_j^2)_1}{(m \epsilon_j)_1 U} = \frac{(\epsilon_j^2)_1 \rho}{f (m \epsilon_j)_1 (\epsilon_j)_0}$$

$$\dot{g} \equiv \frac{D \rho^2 (\epsilon_j^2)_1}{2 (m \epsilon_j)_1^3} \left[\frac{D}{D+2} \left\{ \frac{(m \epsilon_j^3)_3}{(\epsilon_j^2)_1} - \frac{(m^2 \epsilon_j^2)_3}{(m \epsilon_j)_1} \right\} + \frac{1}{A} \left\{ -(m^2 \epsilon_j)_2 (\epsilon_j^2)_1 + (m \epsilon_j)_1 (m \epsilon_j^2)_2 - \frac{2}{D \rho} (m \epsilon_j)_1^3 \right\} \left\{ -\frac{(m^2 \epsilon_j)_2}{(m \epsilon_j)_1} + \frac{(m \epsilon_j^2)_2}{(\epsilon_j^2)_1} \right\} + \right.$$

$$\left. \frac{1}{A} \left\{ -(m^2)_1 (m \epsilon_j^2)_2 + (m \epsilon_j)_1 (m^2 \epsilon_j)_2 + \frac{2}{D \rho} (m^2)_1 (m \epsilon_j)_1^2 \right\} \left\{ -\frac{(m \epsilon_j^2)_2}{(m \epsilon_j)_1} + \frac{(\epsilon_j^3)_2}{(\epsilon_j^2)_1} \right\} \right] \quad \text{ただし、} A \equiv (m^2)_1 (\epsilon_j^2)_1 - (m \epsilon_j)_1^2$$

と置くと、第1項は、 $\gamma U u \vec{e}_u$ に、第2項は、 $\dot{g} \frac{1}{2} \rho u^3 \vec{e}_u$ に等しくなる。(←実際、「第1項 $= \gamma U u \vec{e}_u$ 」とC式から γ の定義式が求まる。また、B式とF式を α_2 と β_2 に関する連立方程式とみて α_2 と β_2 を求め、これらを第2項に代入し、次にC式を代入すれば、これが $\dot{g} \frac{1}{2} \rho u^3 \vec{e}_u$ に等しくなる条件から、 \dot{g} の定義式を確認できる。)

従って、次式を成立させることで、 u の3次精度を達成できる。

$$\gamma = \frac{3}{2} \quad \dots \text{H式}$$

$$\dot{g} = 1 \quad \dots \text{I式}$$

(6) パラメータ間の相互関係

これまでの変数や定数のパラメータの相互関係を図1にまとめて示す。

最終的には、テシヤラが導入した調節パラメータ (r_0, r_1, r_2, r_3, r_4) をある値に設定することで、 $g = 1, \dot{g} = 1, \gamma = \frac{3}{2}$ の3つの条件を同時に満足できる。このとき、格子ガス法のシミュレーションから時々刻々得られる各格子点における各速度の仮想粒子数から、これを局所時空間で平均することにより、すべてのマクロな物理量を高精度 (u の3次精度) に算出することができる。

また、仮想粒子数の時間発展計算はビッ

ト演算で超高速に実行することができ、各時刻ステップのシミュレーション計算においては、各格子点に到着した仮想粒子のビットパターンが衝突規則の入力ビットパターンに一致するかどうかを判定する際に、エネルギーが jmc^2 の仮想粒子の存在を隠す“粒子マスク”と非存在(ホール)を隠す“ホールマスク”を有効(0)または無効(1)にする乱数発生確率の比を、上記の r 値として設定すればよい。

以上が、格子ガス法によりビット演算を用いてCFDと同等精度の流体解析を行うテシヤラの方法である。

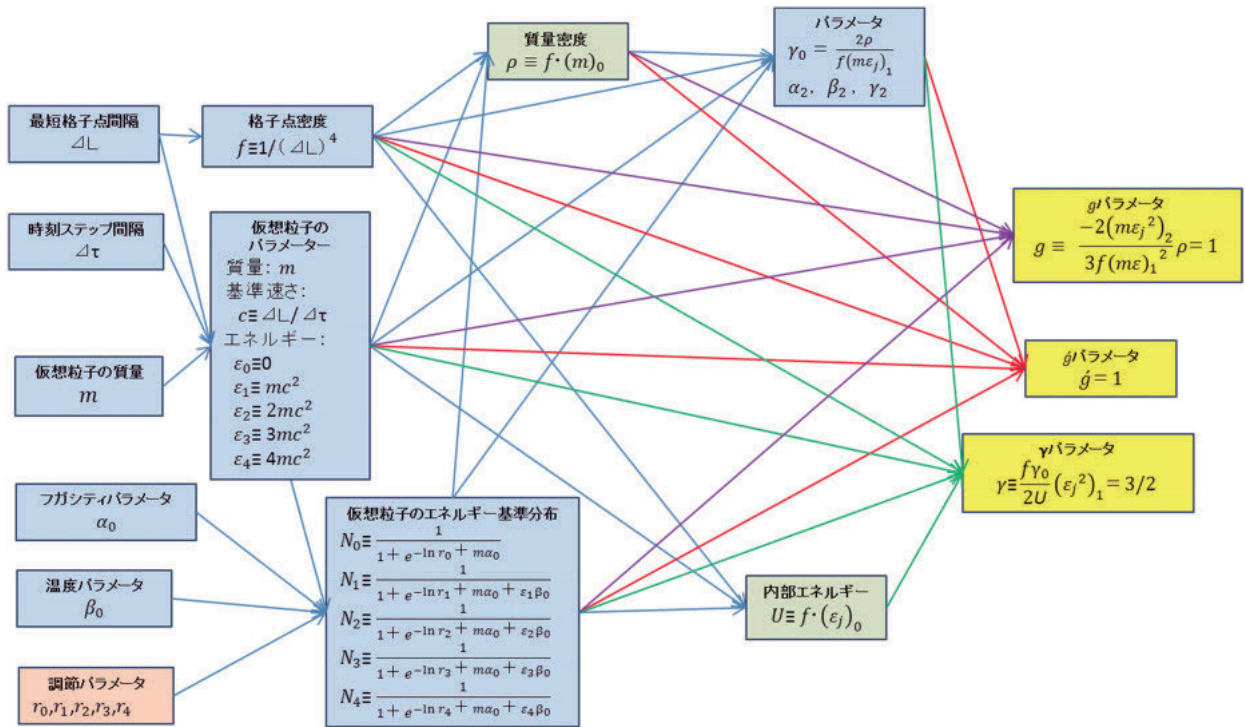


図1 パラメータ間の相互関係

4. 仮想粒子存在確率分布 $\overline{n_{\vec{c}_i}}(\vec{u})$ の導出

最後に、第3章(3)の冒頭で先送りした証明を示す。

十分局所的な時空間領域 (\vec{x}, t) を考えれば、そこには、単位ベクトル \vec{e}_u の向きにマクロな速さ u をもつ一様定常速度 $\vec{u}(\vec{x}, t)$ の流体が存在すると考えてよいと仮定する。この領域内に配置された各格子点において、速度 \vec{c}_i をもつ仮想粒子が存在する確率: $\overline{n_{\vec{c}_i}}(\vec{u}(\vec{x}, t))$ を求める。

(1) 格子点における仮想粒子の存在状態の記述

格子ガス法では、各格子点において、仮想粒子がもちうる速度ベクトルの種類は有限個である。そして、通常モデルでは、「各格子点上では、ひとつの速度ベクトル \vec{c}_i (エネルギーが jmc^2 で速度の向きが i) をもてる仮想粒子は高々1個である。(ただし、静止粒子の個数は、複数でもよい。)」という仮定をする。従って、各格子点にお

ける仮想粒子の存在状態は、有限個のビット列(“状態ベクトル”)で完全に表現することができる。具体的には、速度ベクトル \vec{c}_i をもつ仮想粒子が存在するときは、 j_i に対応するビットを「1」にし、 \vec{c}_i をもつ仮想粒子が存在しないときは、 j_i に対応するビットを「0」にすればよい。この有限個ビットの状態ベクトルは、仮想粒子の存否情報を記述するもので、すべての物理量(質量、運動量、エネルギー等)は、この状態ベクトルから算出できる。また、各格子点にとりうる状態ベクトルの種類は、 $2^{\text{有限個}}$ 通りの可能性がある。

(2) 仮想粒子の衝突による状態ベクトルの遷移

ここでは、局所時空間領域 (\vec{x}, t) に存在する一様定常速度 $\vec{u}(\vec{x}, t)$ の流体中に配置された格子点の状態ベクトルを $\overline{n(\vec{u}(\vec{x}, t))}$ で表す。各格子点では、到着した粒子どうしが相互作用(衝突)を起こし、お互いが

もつ速度ベクトルを変化させて、近傍の格子点に向けて出発する粒子となる。すなわち、到着粒子の存否情報を記述する状態ベクトルが、出発粒子の存否情報を記述する状態ベクトルへと遷移することになる。この衝突による状態遷移の規則を“衝突規則”と呼べば、“衝突規則”は、入力となる状態ベクトル $\overrightarrow{S(p)}$ を、出力となる状態ベクトル $\overrightarrow{S(q)}$ に遷移させるとき「1」、させないとき「0」になる2値数： $\xi(\overrightarrow{S(p)} \rightarrow \overrightarrow{S(q)})$ で表現できる。ただし、すべての状態遷移の可能性を考えると、この2値数は、 $(2^{\text{有限個}}) \times (2^{\text{有限個}})$ 通り必要である。状態遷移を確率的に行う場合は、 $\xi(\overrightarrow{S(p)} \rightarrow \overrightarrow{S(q)})$ の値を確率的に「1」または「0」に変化させればよい。この場合、その平均値を $\overline{\xi(\overrightarrow{S(p)} \rightarrow \overrightarrow{S(q)})}$ で表現する。[解説1]テシャラの格子ガス法169速度モデルにおける仮定：の5. に述べたとおり、通常の格子ガス法では、衝突規則を、 $\overline{\xi(\overrightarrow{S(p)} \rightarrow \overrightarrow{S(q)})} = \overline{\xi(\overrightarrow{S(q)} \rightarrow \overrightarrow{S(p)})}$ が成立するように設定する。

以上のことから、各格子点においては、到着粒子の状態ベクトル $\overrightarrow{n(\vec{u})}$ は、それが衝突規則のいずれかの入力状態ベクトル $\overrightarrow{S(p)}$ に一致したとき、出力状態ベクトル $\overrightarrow{S(q)}$ への遷移規則が適用され、それが出発粒子の状態ベクトルになる。 $\overrightarrow{n(\vec{u})}$ が $\overrightarrow{S(p)}$ に一致するとき「1」、一致しないとき「0」になる2値数を $(\overrightarrow{n(\vec{u})} == \overrightarrow{S(p)})$ 、その平均値を $\overline{(\overrightarrow{n(\vec{u})} == \overrightarrow{S(p)})}$ で表現すれば、到着粒子の状態ベクトルが、衝突によって $\overrightarrow{S(q)}$ に遷移し、それが出発粒子になる確率は、 $\overline{\xi(\overrightarrow{S(p)} \rightarrow \overrightarrow{S(q)})} \cdot \overline{(\overrightarrow{n(\vec{u})} == \overrightarrow{S(p)})}$ で与えられる。

(3) 局所平衡状態の仮定

十分局所的な時空間領域 (\vec{x}, t) では、マクローな流体速度が $\vec{u}(\vec{x}, t)$ の局所平衡状態が成り立ち、「局所平衡状態では、衝突によって互いに移りかわれる仮称粒子の状態ベクトルの間の遷移はつりあっている。 (“詳細

つりあい”）」と仮定する。すなわち、次式が成り立つ。

$$\overline{\xi(\overrightarrow{S(p)} \rightarrow \overrightarrow{S(q)})} \cdot \overline{(\overrightarrow{n(\vec{u})} == \overrightarrow{S(p)})} = \overline{\xi(\overrightarrow{S(q)} \rightarrow \overrightarrow{S(p)})} \cdot \overline{(\overrightarrow{n(\vec{u})} == \overrightarrow{S(q)})}$$

ここで考えている格子ガス法モデルでは、その衝突規則で、 $\overline{\xi(\overrightarrow{S(p)} \rightarrow \overrightarrow{S(q)})}$ と $\overline{\xi(\overrightarrow{S(q)} \rightarrow \overrightarrow{S(p)})}$ を等しく設定するので、 $\overline{(\overrightarrow{n(\vec{u})} == \overrightarrow{S(p)})} = \overline{(\overrightarrow{n(\vec{u})} == \overrightarrow{S(q)})}$ 。

さらに、到着粒子の状態ベクトルが、衝突規則の入力状態ベクトル $\overrightarrow{S(p)}$ に一致する確率は、個々の速度ベクトル \vec{C}_μ について、到着粒子分布が衝突規則の入力状態に一致するか否かの確率の積で、次式のように与えられると仮定する。 (“分子混沌の仮定”)

$$\begin{aligned} \overline{(\overrightarrow{n(\vec{u})} == \overrightarrow{S(p)})} &= \prod_{\mu=1}^{\text{有限個}} \{ \overline{n_{\vec{C}_\mu}(\vec{u})} \}^{s_{\vec{C}_\mu}(p)} \cdot \{ 1 - \overline{n_{\vec{C}_\mu}(\vec{u})} \}^{1-s_{\vec{C}_\mu}(p)} \\ &= \prod_{\mu=1}^{\text{有限個}} \{ \overline{n_{\vec{C}_\mu}(\vec{u})} \}^{s_{\vec{C}_\mu}(p)} \cdot \{ 1 - \overline{n_{\vec{C}_\mu}(\vec{u})} \}^{1-s_{\vec{C}_\mu}(p)} \end{aligned}$$

ここで、 $n_{\vec{C}_\mu}(\vec{u}), s_{\vec{C}_\mu}(p)$ は、それぞれ、状態ベクトル $\overrightarrow{n(\vec{u})}, \overrightarrow{S(p)}$ の中の、速度ベクトル \vec{C}_μ をもつ仮想粒子の存否情報を表現するビットの数値を表わし、「1」または「0」である。また、「 $1^1=1, 1^0 \equiv 1, 0^1=0, 0^0 \equiv 1$ 」であることに注意すれば、 $\prod_{\mu=1}^{\text{有限個}} \{ \overline{n_{\vec{C}_\mu}(\vec{u})} \}^{s_{\vec{C}_\mu}(p)} \cdot \{ 1 - \overline{n_{\vec{C}_\mu}(\vec{u})} \}^{1-s_{\vec{C}_\mu}(p)}$ は、 $n_{\vec{C}_\mu}(\vec{u})$ と $s_{\vec{C}_\mu}(p)$ の全ビットが一致したときのみ「1」で、それ以外の場合は「0」になることがわかる。なお、 $\overline{n_{\vec{C}_\mu}(\vec{u})}$ は、 $n_{\vec{C}_\mu}(\vec{u})$ の平均値を表す。

(4) 仮想粒子とホールの存在を隠すマスク処理の導入

衝突規則を適用する前に、“エネルギー jmc^2 の仮想粒子が存在することを隠すマスク” F_j と “エネルギー jmc^2 の仮想粒子が存在しないこと (ホールが存在すること) を隠すマスク” I_j を導入する。 F_j と I_j は2値数であり、通常は「1」で何の効果も発揮しない。マスク効果を発揮させるときの

み、値を「0」にする。シミュレーション計算では、ある一定の確率で「0」の値をとらせる。このとき、「 F_j が1になる確率」を \bar{F}_j 、「 I_j が1になる確率」を \bar{I}_j で表すと、上記(3)の最終式は、次式になる。

$$\begin{aligned} & \overline{(n(\vec{u}) = S(p))} \\ &= \prod_{j=1}^{\text{有限個}} \left[\{\bar{F}_j n_{\vec{c}_j}(\vec{u})\}^{s_{\vec{c}_j}(p)} \cdot \{\bar{I}_j (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))\}^{1-s_{\vec{c}_j}(p)} \right] \end{aligned}$$

(5) 衝突不変量の導出

以上の仮定から、局所平衡状態では、次式が成立していると思なせる。

$$\begin{aligned} & \prod_{j=1}^{\text{有限個}} \left[\{\bar{F}_j n_{\vec{c}_j}(\vec{u})\}^{s_{\vec{c}_j}(p)} \cdot \{\bar{I}_j (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))\}^{1-s_{\vec{c}_j}(p)} \right] \\ &= \prod_{j=1}^{\text{有限個}} \left[\{\bar{F}_j n_{\vec{c}_j}(\vec{u})\}^{s_{\vec{c}_j}(q)} \cdot \{\bar{I}_j (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))\}^{1-s_{\vec{c}_j}(q)} \right] \end{aligned}$$

この両辺を $\prod_{j=1}^{\text{有限個}} \{\bar{I}_j (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))\} \neq 0$ で割って、

$$\prod_{j=1}^{\text{有限個}} \left\{ \frac{n_{\vec{c}_j}(\vec{u})}{r_j \cdot (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))} \right\}^{s_{\vec{c}_j}(p)} = \prod_{j=1}^{\text{有限個}} \left\{ \frac{n_{\vec{c}_j}(\vec{u})}{r_j \cdot (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))} \right\}^{s_{\vec{c}_j}(q)}$$

ここで、 r_j は、「 I_j が1になる確率 \bar{I}_j 」と「 F_j が1になる確率 \bar{F}_j 」の比で、 $r_j \equiv \bar{I}_j / \bar{F}_j$ 。両辺の自然対数をとると、積は和に変換され、次式が得られる。

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{\text{有限個}} \left[s_{\vec{c}_j}(p) \cdot \ln \left\{ \frac{n_{\vec{c}_j}(\vec{u})}{r_j \cdot (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))} \right\} \right] \\ &= \sum_{j=1}^{\text{有限個}} \left[s_{\vec{c}_j}(q) \cdot \ln \left\{ \frac{n_{\vec{c}_j}(\vec{u})}{r_j \cdot (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))} \right\} \right] \end{aligned}$$

$S_{\vec{c}_j}(p)$ 、 $S_{\vec{c}_j}(q)$ は、それぞれ、速度 \vec{c}_j をもつ入力粒子または出発粒子が存在するときのみ「1」の値をとり、存在しない場合は「0」であるから、上式は、存在する各粒子についての $\ln \left\{ \frac{n_{\vec{c}_j}(\vec{u})}{r_j \cdot (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))} \right\}$ の和が衝突の前後で保存されること、すなわち、 $\ln \left\{ \frac{n_{\vec{c}_j}(\vec{u})}{r_j \cdot (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))} \right\}$ が“衝突不変量”になっていることを示している。

(6) 速度 \vec{c}_j をもつ仮想粒子が存在する確率： $n_{\vec{c}_j}(\vec{u})$ の導出

$\ln \left\{ \frac{n_{\vec{c}_j}(\vec{u})}{r_j \cdot (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))} \right\}$ が“衝突不変量”になるの

で、「参考」に述べた理由から1と \vec{c}_j と $\vec{c}_j \vec{c}_j$ の一次結合で表現できる。

$$\begin{aligned} & \ln \left\{ \frac{n_{\vec{c}_j}(\vec{u})}{r_j \cdot (1 - n_{\vec{c}_j}(\vec{u}))} \right\} \\ &= m \left\{ \alpha(\vec{u}) \cdot 1 + \gamma(\vec{u}) \vec{u} \cdot \vec{c}_j + \beta(\vec{u}) \cdot \frac{1}{2} \vec{c}_j \cdot \vec{c}_j \right\} \\ &= m \alpha(\vec{u}) + m \vec{c}_j \cdot \vec{u} \gamma(\vec{u}) + \varepsilon_j \beta(\vec{u}) \end{aligned}$$

ここで、1次結合の比例定数は \vec{u} のみに依存すると考えられる。

上式を、 $n_{\vec{c}_j}(\vec{u})$ について解くと、マクロな速度が \vec{u} の局所時空間内の格子点における、速度 \vec{c}_j をもつ仮想粒子が存在する確率として、次式が得られる。

$$n_{\vec{c}_j}(\vec{u}) = \frac{1}{1 + e^{-\ln r_j + m \alpha(\vec{u}) + m \vec{c}_j \cdot \vec{u} \gamma(\vec{u}) + \varepsilon_j \beta(\vec{u})}}$$

5. おわりに

テシャラ (Christopher M. Teixeira) は、彼のMITにおける博士論文：“Continuum Limit of Lattice Gas Fluid Dynamics”, MIT, 1993の最後を次のように締めくくっている。

A necessary prerequisite for accurate simulation of any of these applications is the removal of the discreteness artifacts from the basic conservation equations of lattice gas methods. It is only then that the promise of ~ 1000 times computational efficiency improvement over CFD becomes meaningful. With the models developed in this work, this step has been accomplished.

内容を意識的に補足解説すれば：

1格子点1ビット幅で時間発展計算を実行できる格子ガス法は、CFDに比べて、1/10のメモリサイズで100倍近い高速計算を実行できる。しかし、その計算モデルは、実際の流体粒子がもちうる連続的な速度ベクトルを離散化しているため、計算結果に“物理的に意味のない量 (discreteness artifacts)”が付加されてしまう。これを消し去るのがテシャラ

の方法であり、これによって、はじめて、CFDに比べてほぼ1000倍の効率の良さをもつ格子ガス法が重要な役割を果たせるように

なる。
筆者としても、本手法の今後の実用化をめざして、努力を継続中である。

【参考】衝突不変量が1と速度ベクトルの各成分と(速さ)²の1次結合の形で表現可能なこと：

1. テンジャラの格子ガス法モデルでは、すべての仮想粒子の質量は m [kg] で共通なので、衝突過程における質量と運動量とエネルギーの保存は、それぞれ、衝突前後に存在する各仮想粒子の 1 と \vec{C}_{1i} と $\vec{C}_{j1}\vec{C}_{j1}$ の総和が保存することになる。また、 1 と \vec{C}_{1i} と $\vec{C}_{j1}\vec{C}_{j1}$ の任意の1次結合で得られる量を考えても、衝突前後に存在する各仮想粒子に関するその総和は保存する。

2. 2粒子の衝突について、それぞれの粒子がもつ速度ベクトルの変化を、速度ベクトルの空間で考えると、「2つの粒子の速度ベクトルの先端は、同じ球の直径両端から別の直径両端に移動する。」という規則が成り立つ。実際、衝突の前後で“直径の両端”という2個の点の存在が不変であるから、これは質量(粒子数)保存則の内容を含んでいる。また、衝突の前後で球の中心位置が不変であるから、それを2倍先にまで伸ばしたベクトルも不変であり、これは、2つの粒子の速度ベクトルの和が衝突前後で保存されることを意味している。さらに、「2つの粒子の速度ベクトルの大きさの2乗の和は、原点から球の中心までの距離の2乗と球の半径の2乗の和の2倍になる。」ので、衝突の前後で“球の半径”が不変であることは、「球の中心までの距離は不変である」ことも考慮すれば、(速さ)²が衝突の前後で保存されることを意味している。

3. 逆に、すべての衝突不変量は、1と速度ベクトルの各成分と(速さ)²の1次結合の形で表現できることを証明できる。以下、多次元の場合も同様なので、2次元の場合を考察する。

①「1と速度ベクトルの各成分と速さ2乗の1次結合の形」では表すことはできないが、連続関数の衝突不変量 $\phi(\vec{v})$ が、仮に存在したとする。そして、速度空間内の4点： $\vec{v} = (0, 0)$ 、 $(1, 0)$ 、 $(0, 1)$ 、 $(-1, 0)$ において、 $\phi(\vec{v})$ がそれぞれ a, b, c, d の値をとっていたとする。

②このとき、同じ4点で同じ値をとる「1と速度ベクトルの各成分と速さ2乗の1次結合の形」で表した連続関数 $\Psi(\vec{v})$ を常に作るができる。実際、1次結合の式の形を、例えば $\phi(v_x, v_y) = p \cdot 1 + q \cdot v_x + r \cdot v_y + s \cdot (v_x^2 + v_y^2)$ と仮定すれば、その係数 p, q, r, s は、 $\phi(0, 0) = a$ 、 $\phi(1, 0) = b$ 、 $\phi(0, 1) = c$ 、 $\phi(-1, 0) = d$ の4本の式からすぐ求めることができる。

③上記の関数 $\Psi(\vec{v})$ は、連続な衝突不変量であるので、 $\Lambda(\vec{v}) = \phi(\vec{v}) - \Psi(\vec{v})$ という新しい関数をつくれれば、これも連続な衝突不変量になり、かつ、上記の4点で0の値をとる。すなわち、 $\Lambda(0, 0) = \Lambda(1, 0) = \Lambda(0, 1) = \Lambda(-1, 0) = 0$

④衝突不変量の定義から、中心が原点にある直径2の円を考えると、2つの直径の両端点における $\Lambda(v_x, v_y)$ の和どうしの値は等しいので、 $\Lambda(1, 0) + \Lambda(-1, 0) = \Lambda(0, 1) + \Lambda(0, -1)$ が成り立つ。この式で、はじめの3項の値は既知で0だから、新たに $\Lambda(0, -1) = 0$ であることがわかる。また、中心が $(0.5, 0.5)$ にある直径 $\sqrt{2}$ の円を考えると、 $\Lambda(1, 0) + \Lambda(0, 1) = \Lambda(0, 0) + \Lambda(1, 1)$ だから、新たに $\Lambda(1, 1) = 0$ であることがわかる。

⑤上記の操作は、速度空間内の周辺格子点に無限に広げていくことができ、また、はじめの4点はいくらでも原点の近くに設定できる。従って、 $\Lambda(\vec{v})$ は、いくらでも細かいメッシュの無限個の格子点上で0になる連続関数であることがわかり、 $\Lambda(\vec{v}) \equiv 0$ と考えて差し支えない。従って、 $\phi(\vec{v})$ は、1次結合で表された $\Psi(\vec{v})$ に一致するとしてよい。