

数値シミュレーションへの誘い

田端正久

早稲田大学理工学術院
基幹理工学部数学科

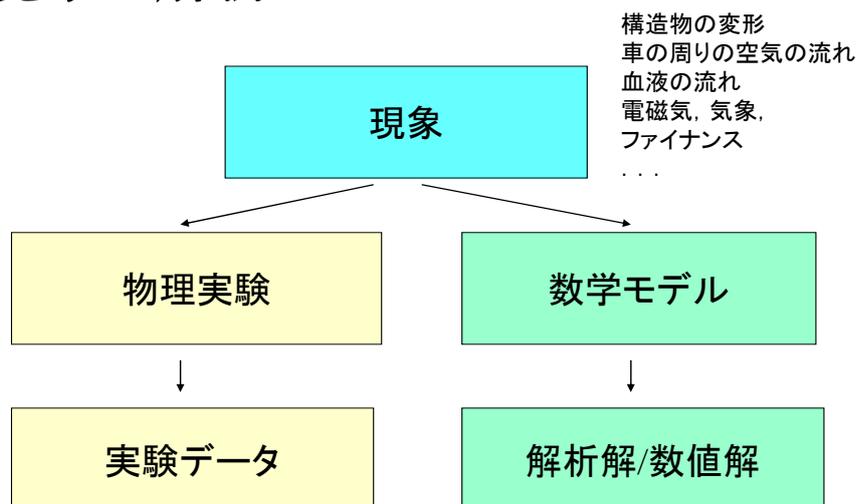
内容

- はじめに-数値シミュレーション
- 解析的に解ける問題の場合
- 解析的には解けない問題の場合
- おわりに

はじめに-数値シミュレーションとは

- 種々の現象を解明し事前にそれらを予測し，有害なものは未然に防ぎ，有用なものはそれらを得る方法を開発する.
- 現象の解析には，数学モデルを作成.
- 現象が複雑になれば，その数学モデルを解くにはコンピュータが必須.
- 数値的に現象を模擬することを，数値シミュレーションという.

現象の解析



解明すべき最近の重大現象

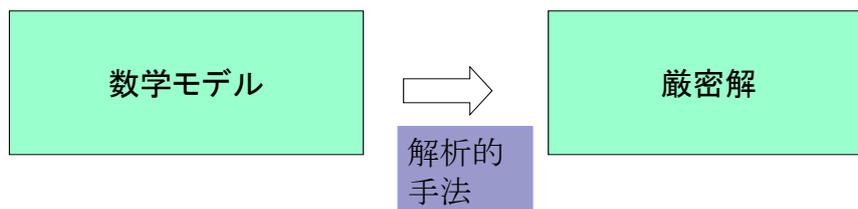
- 東日本大震災の津波
- 福島第一原発事故, 放射能汚染

数値シミュレーションの特長

- 定量的解析が可能.
- 2 次的な物理量の計算も容易.
- パラメータの変更, 形状の変更が容易.
- 物理実験では危険, 不可能な状況のシミュレーションも可能.
- コストと時間の軽減 (産業界)

1. 数学モデルが解析的に 解けるとき

数学モデルが解析的に解けるとき



飛球の運動

現象:ボールの運動
飛球の解析

城島の飛球はどこまで飛ぶか？

- ホームランか？
- フライでアウトか？

数学モデルの作成

11

$t \in [0, T]$: 時刻, 独立変数

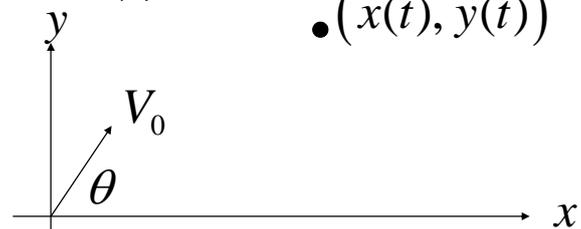
$(x, y): [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^2$ 未知関数

$(x(t), y(t))$: 時刻 t でのボールの位置

原点: ホームベース(バットのの高さは無視する)

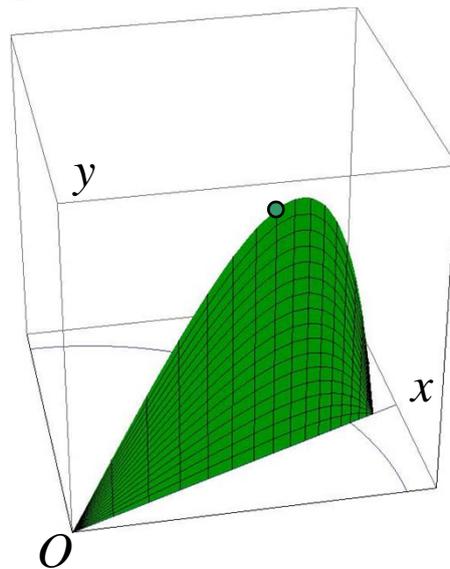
x : ボールの飛ぶ方向への原点からの水平距離

y : ボールの高さ



座標を定める

12



数学モデル1

13

ボールに働く力：

重力

林檎は地面に落ちる



重力

ニュートンの第2法則： $m\alpha = f$

質量×加速度=力

数学モデル1の常微分方程式系

14

V_0 : ボールがバットに当たって飛び出すときの
初速度, 50 m/s

g : 重力加速度, 9.8 m/s² $(x(t), y(t))$

θ : ボールが飛ぶ角度

m : ボールの質量



mg

$$\left\{ \begin{array}{l} m \frac{d^2 x}{dt^2} = 0 \quad (0 < t) \\ \frac{dx}{dt}(0) = V_0 \cos \theta \\ x(0) = 0 \end{array} \right.$$

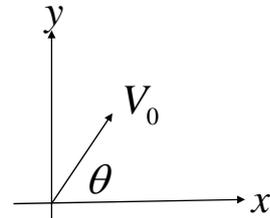
$$\left\{ \begin{array}{l} m \frac{d^2 y}{dt^2} = -mg \quad (0 < t) \\ \frac{dy}{dt}(0) = V_0 \sin \theta \\ y(0) = 0 \end{array} \right.$$

数学モデル1の解

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = 0 \quad (0 < t) \quad : \text{常微分方程式}$$

$$\frac{dx}{dt}(0) = V_0 \cos \theta \quad : \text{初期条件}$$

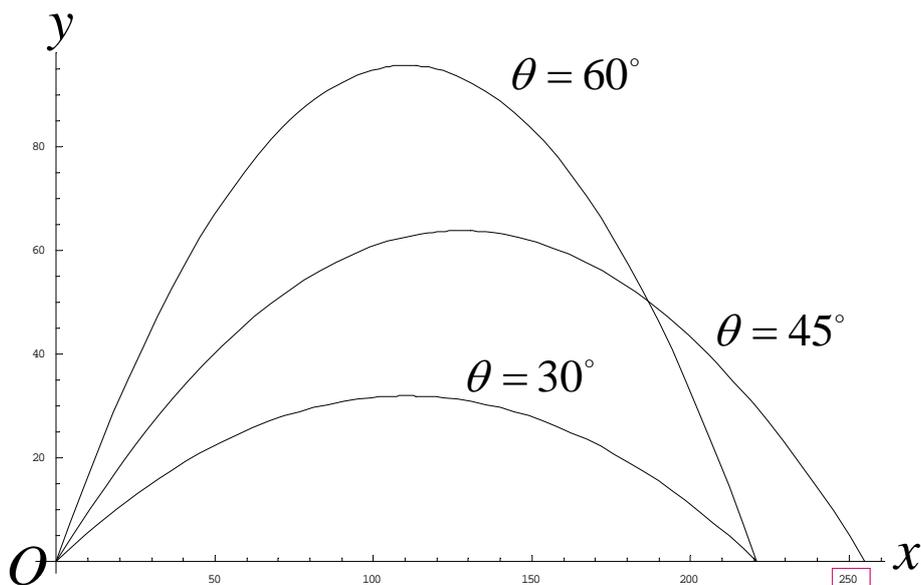
$$x(0) = 0$$



この方程式の解： $x(t) = (V_0 \cos \theta) t$

同様にして $y(t) = (V_0 \sin \theta) t - \frac{g}{2} t^2$

数学モデル1: いくつかの軌跡



数学モデル2

17

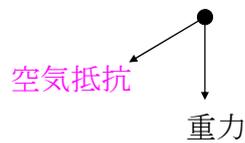
ボールに働く力：

重力

林檎は地面に落ちる

空気抵抗

動いている物はやがて止まる



数学モデル2の常微分方程式系

18

k : 空気抵抗係数, 0.245 s^{-1}
速度と反対方向に働く力

$(x(t), y(t))$
粘着境界条件

$$mk\left(\frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}\right)$$

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x}{dt^2} = -mk \frac{dx}{dt} & (0 < t) \\ \frac{dx}{dt}(0) = V_0 \cos \theta \\ x(0) = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} m \frac{d^2 y}{dt^2} = -mg - mk \frac{dy}{dt} & (0 < t) \\ \frac{dy}{dt}(0) = V_0 \sin \theta \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

数学モデル2の解

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -mk \frac{dx}{dt} \quad (0 < t) \quad : \text{常微分方程式}$$

$$\frac{dx}{dt}(0) = V_0 \cos \theta \quad : \text{初期条件}$$

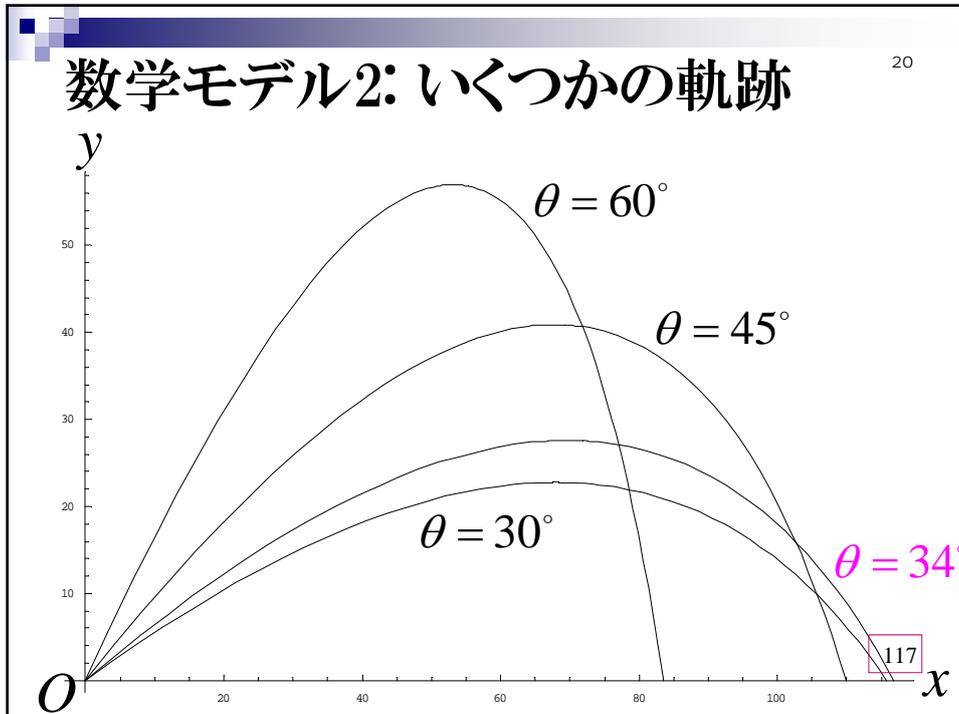
$$x(0) = 0$$

$$\text{この方程式の解 : } x(t) = (1 - e^{-kt}) \frac{V_0 \cos \theta}{k}$$

同様にして

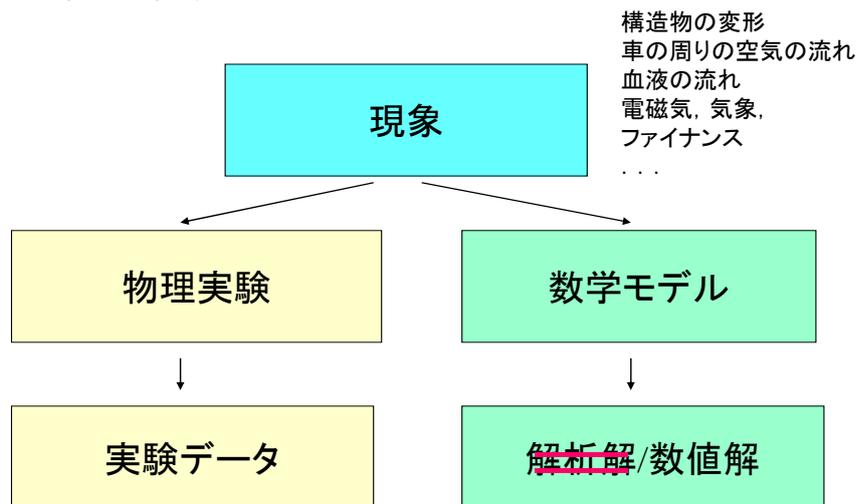
$$y(t) = \frac{1}{k^2} \left\{ -gkt + (1 - e^{-kt})(g + kV_0 \sin \theta) \right\}$$

数学モデル2: いくつかの軌跡



2. 数学モデルが解析的に 解けないとき

現象の解析



偏微分方程式によるモデル化

人間の生活空間:

空間: 3次元, x, y, z

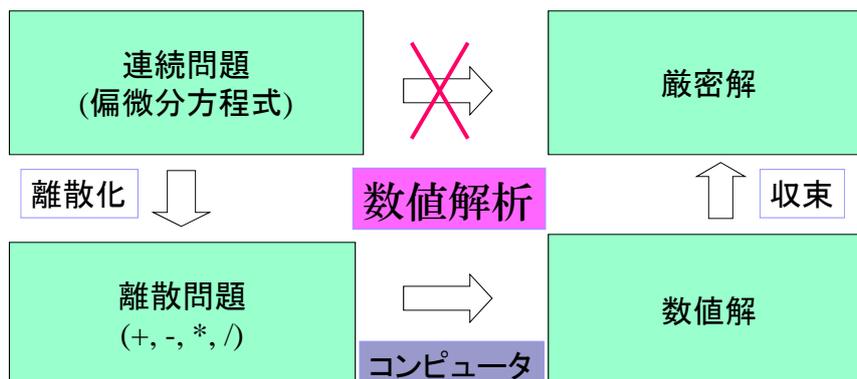
時間: 1次元, t

複数の独立変数

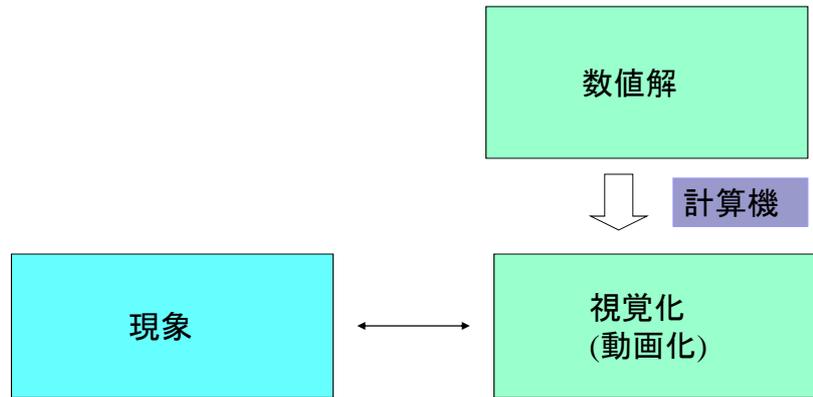
偏微分: $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}, \frac{\partial}{\partial t}$

ほとんどの現象は偏微分方程式でモデル化され, ほとんどの場合, 解析的に解けない.

数学モデルの解法



数値解の後処理



連続体力学の巨人達

- Newton (1642-1727) ニュートン
- Euler (1707-1783) オイラー
- Lagrange (1736-1813) ラグランジュ
- Laplace (1749-1827) ラプラス
- Fourier (1768-1830) フーリエ
- Gauss (1777-1855) ガウス
- Poisson (1781-1840) ポアソン
- Navier (1785-1836) ナヴィエ
- Green (1793-1841) グリーン
- Dirichlet (1805-1859) ディリクレ
- Stokes (1819-1903) ストークス
- Maxwell (1831-1879) マクスウェル
- Neumann (1832-1925) ノイマン

ナビエ・ストークス方程式

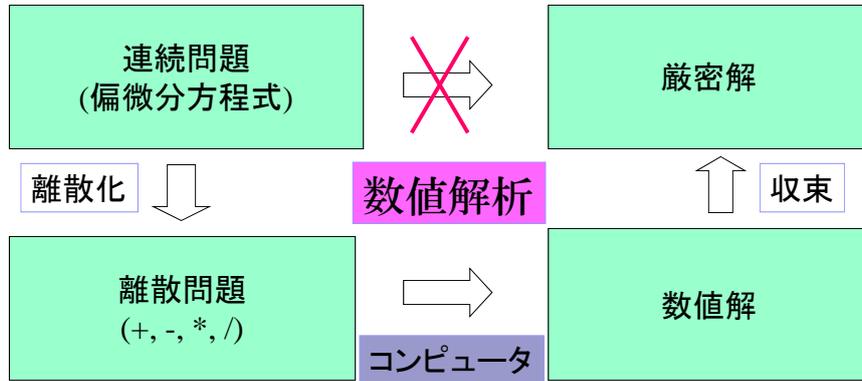
$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}$$
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

非線形偏微分方程式系

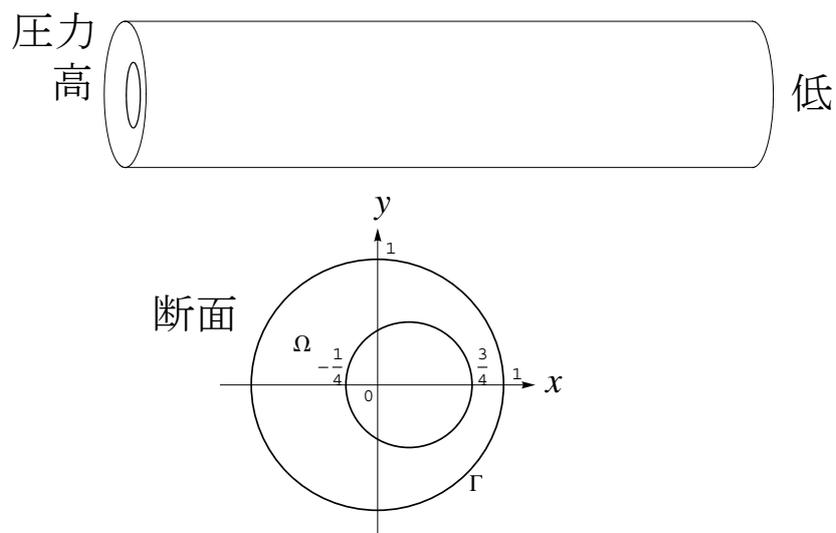
コンピュータは必須

- 世界最初のコンピュータENIAC, 1945年
それ以前には考えられなかった方法
- 高速のコンピュータで代表的な偏微分方程式が現実的に解けるようになったのは, 20世紀末
- 連続体力学の巨人達は, 重要な偏微分方程式を導いたが, それらの解の詳細を見ることができなかった!

数学モデルの解法, 数値解析

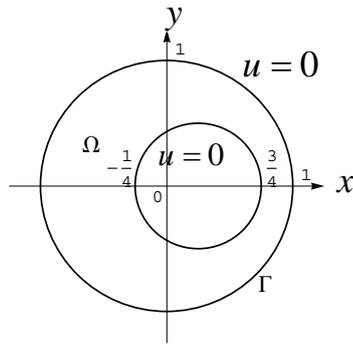


偏心円管領域を流れる流量の解析



流速から流量を求める

流速 : $(0, 0, u(x, y))$



ポアソン方程式

$$-\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\alpha}{\mu}$$

α : 圧力勾配

μ : 流体の粘性

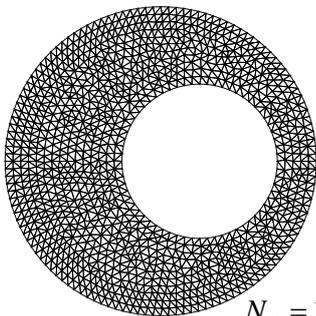
$$\text{流量 } Q = \int_{\Omega} u(x, y) dx dy$$

$u(x, y)$ を解析的に求めることはできない!

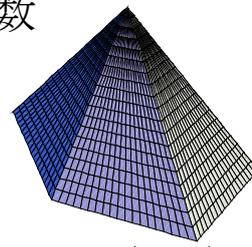
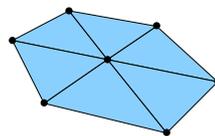
離散化手法: 有限要素法

$$u_h(x, y) = \sum_{j=1}^{N_p} u_j \phi_j(x, y)$$

u_j : 未定係数



$N_p = 1,149$ P_j : 節点



$\phi_j(x, y)$

要素分割
 h : 要素サイズ

離散問題
大規模 (N_p 元) 連立一次方程式
未知数 $u_j, j = 1, \dots, N_p$

N元連立一次方程式

$N = 2$: 鶴亀算, 鶴亀2種

鶴と亀は全部で5匹, 足の数は全部で16本るとき
鶴は何匹(羽), 亀は何匹いるか.

$$\begin{aligned}x + y &= 5 \\ 2x + 4y &= 16\end{aligned}$$

$N = 1,149$: 1,149種類の動物の問題

$N = 10,000$ (PC)

$N = 100,000,000$ (スーパーコンピュータ)

コンピュータは必須

数値解 u_h

未知数 u_j に関する大規模 (N_p 元) 連立一次方程式を解く

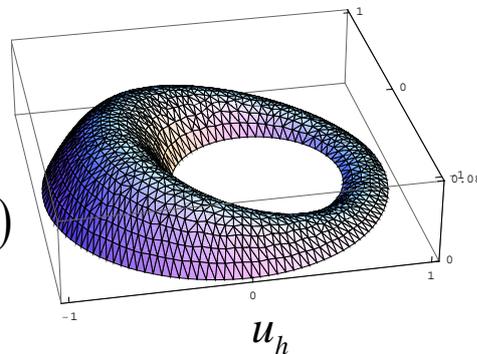
コンピュータ

解 $u_j, j = 1, \dots, N_p$, を得る

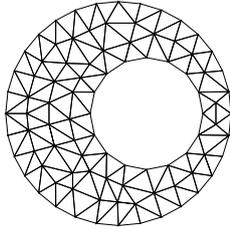
数値解

$$u_h(x, y) = \sum_{j=1}^{N_p} u_j \phi_j(x, y)$$

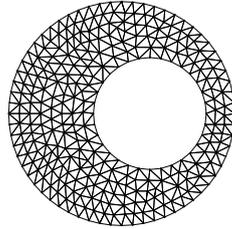
$$\text{流量 } Q_h = \int_{\Omega_h} u_h(x, y) dx dy$$



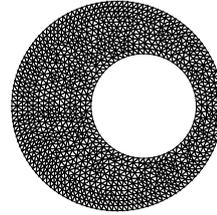
収束性と誤差評価



粗分割



$h \downarrow 0$



密分割

$u_h \rightarrow u$: 収束性

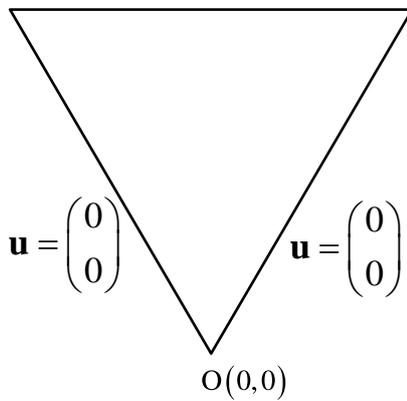
$\|u_h - u\|_X \leq ch^\alpha$: 誤差評価, α : 収束精度

$X = H^1(\Omega)$: $\alpha=1$

$X = L^2(\Omega)$: $\alpha=2$

非圧縮粘性流体の定常流

$$B\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} 1-2x^2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad A\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$$

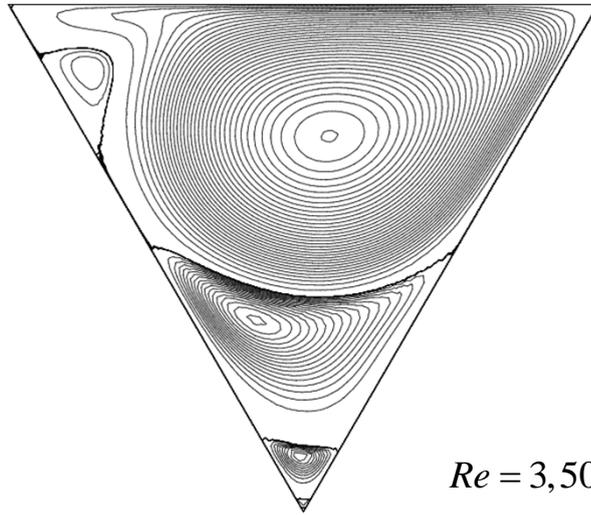


$$-\frac{1}{\text{Re}} \Delta \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{0}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

定常ナビエ・ストークス方程式

定常流の流線



$Re = 3,500$

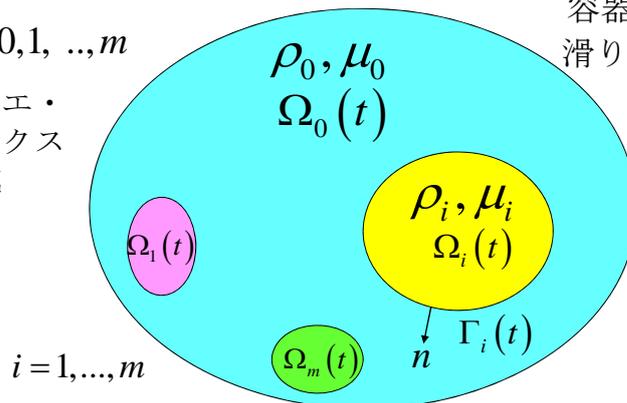
37

複数流体の流れ問題

38

流体 $0, 1, \dots, m$

ナビエ・
ストークス
方程式



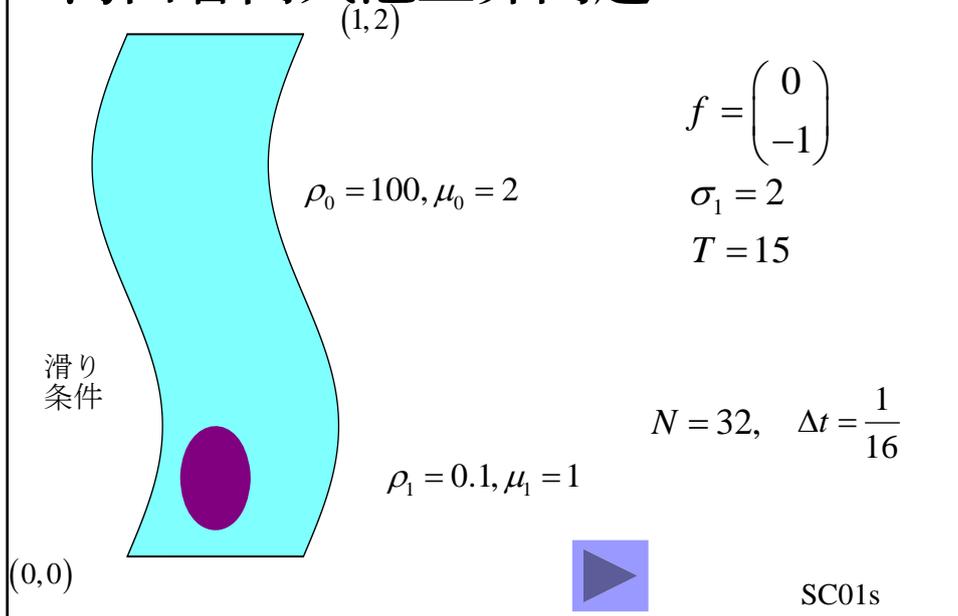
容器境界
滑り, または粘着

界面で曲率に比例した表面張力

それぞれの流体の占める領域が未知：
それらも求めなければならない

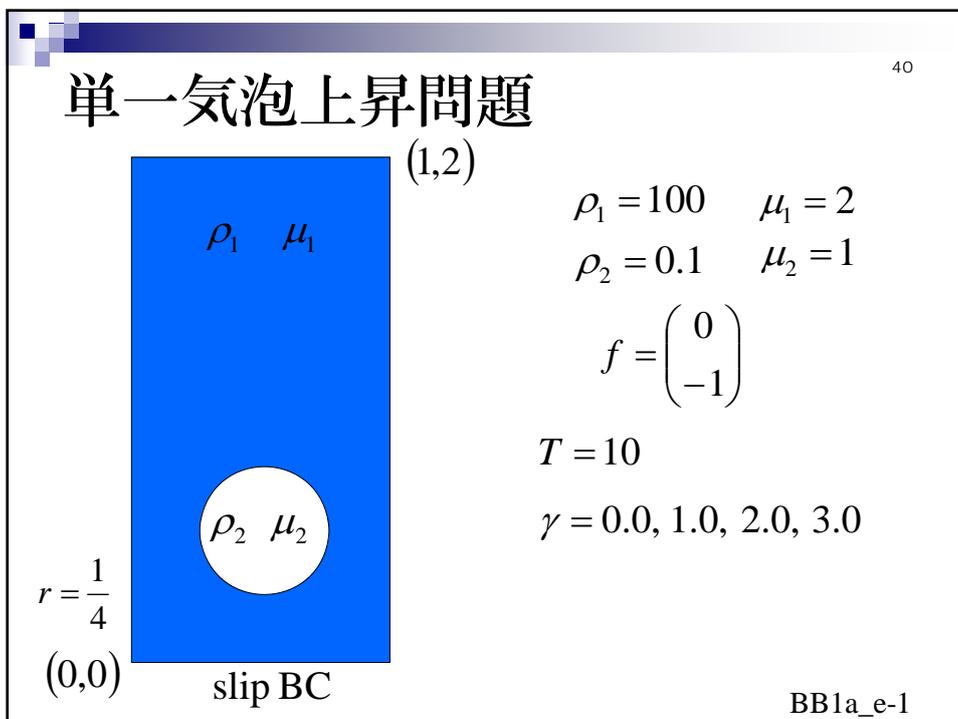
湾曲管内気泡上昇問題

39

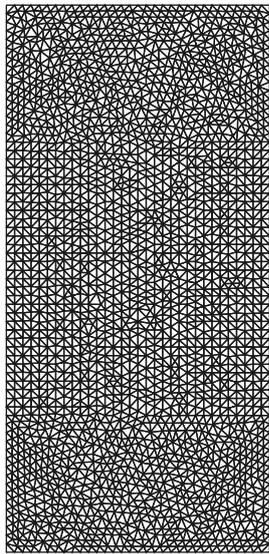


単一気泡上昇問題

40



気泡上昇問題, 表面張力依存性 ⁴¹



$$N = 32$$

$$N_e = 4,580$$

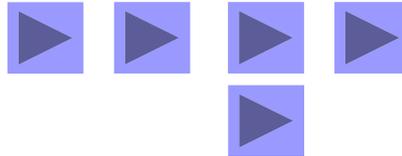
$$\text{DOF}(u) = 9,353 * 2 = 18,706$$

$$\text{DOF}(p) = 2,387$$

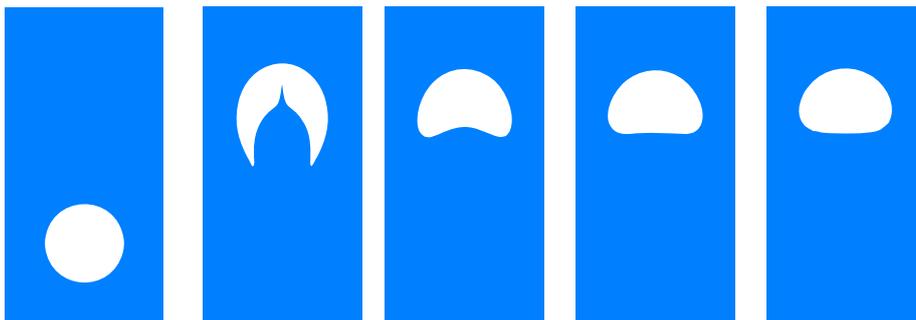
$$\Delta T = \frac{1}{8} \quad (T = 10)$$

$$\text{Re} \approx 8.8$$

$\gamma = 0.0$ 1.0 2.0 3.0



形状の表面張力依存性 ⁴²



$t = 0.0$

$t = 5.0$

$t = 5.0$

$t = 5.0$

$t = 5.0$

$\gamma = 0.0$

$\gamma = 1.0$

$\gamma = 2.0$

$\gamma = 3.0$

湾曲管内複数気泡上昇問題

43

slip BC

$(0,0)$ $t=0.00000$

$(1,2)$

$\rho_0 = 100, \mu_0 = 2$

$\rho_i = 0.1, \mu_i = 1$
 $i = 1, \dots, 9$

$f = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

$\sigma = 1$

$T = 30$

$N = 32, \Delta t = \frac{1}{64}$

NSC01s 43

複数液滴落下問題

44

slip BC

$(0,0)$ $t=0.00000$

$(1,2)$

$\rho_0 = 0.1, \mu_0 = 0.01$

$\rho_i = 100, \mu_i = 0.2$
 $(i = 1, 2, 3)$

$f = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

$\sigma = 0.1$

$T = 15$

$N = 32, \Delta t = \frac{1}{128}$

FDT03s 44

複数液滴落下問題(縦)

45

(1,2)

slip BC

$\rho_0 = 0.1, \mu_0 = 0.01$

$\rho_i = 100, \mu_i = 0.2$
($i = 1, 2, 3, 4$)

$f = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

$\sigma = 0.1$

$T = 15$

$N = 32, \Delta t = \frac{1}{128}$

(0,0) $t=0.00000$

FDT04s

砂時計形状容器内流体移動問題

46

(0.5,2)

ρ_1

$(\rho_1, \mu_1, \sigma_1) = (100, 0.5, 0.1)$

nonslip BC

$(\rho_0, \mu_0) = (1, 1)$

$f = \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \end{pmatrix}$

$T = 75$

$N = 32, \Delta t = \frac{1}{8}$

ρ_0

(-0.5,0) $t=0.00000$ $r_\rho = 100, r_\mu = 0.5, W_e = 10, R_e = 1, F_r^2 = 0.5$

HG02d-ch1-rm0.5

おわりに

47

- 「紙と鉛筆があればできる」というわけにはいかない。コンピュータは必要。
- 京スーパーコンピュータ, K-computer
演算性能 10^{16} (=京=10 Peta)フロップス
をすぐに使える環境でなくても. . .
- 最近のPCは数値シミュレーションを行う能力を十分備えている (ほとんどの2次元問題, 工夫により3次元問題も) .
- 新しい離散スキームの開発
- 大規模連立一次方程式の効率的な解法の開発
- 収束性の証明など数値解の解析
- これらに対しては数学からの大きい寄与が切望されている.
- 「数学とコンピュータは現代の万能ツール」
ジャック・ルイ・リオンス, 1991年日本賞受賞講演での言葉

参考文献

48

- [1] R. アデア, ベースボールの物理学, 中村和幸訳, 紀伊国屋書店, 1996.
- [2] 田端正久/中尾充宏, 偏微分方程式から数値シミュレーションへ/計算の信頼性評価, 講談社, 2008.
- [3] 田端正久, 偏微分方程式の数値解析, 岩波書店, 2010.
- [4] 田端正久, 数値解析で解く, 特集: 解けない方程式を解くには, 数学セミナー, 45(2008), 34-39.
- [5] Tabata, M. Numerical simulation of fluid movement in an hourglass by an energy-stable finite element scheme, Computational Fluid Dynamics Review 2010, 29-50, Eds. Hafez, M. N. et al., World Scientific, Singapore, 2010.