

数値シミュレーションへの誘い*

早稲田大学理工学術院 基幹理工学部数学科 教授

田端正久

1

日本数学会秋季総合分科会市民講演会
2011年10月1日, 松本中央公民館6階ホール

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

2

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

3

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.

4

現象の解析

構造物の変形
車の周りの空気の流れ
血液の流れ
電磁気, 気象,
ファイナンス
...

```
graph TD; A[現象] --> B[物理実験]; A --> C[数学モデル]; B --> D[実験データ]; C --> E[解析解/数値解];
```

* 日本数学会市民講演会, 松本中央公民館 6 階ホール, 2011 年 10 月 1 日

解明すべき最近の重大現象

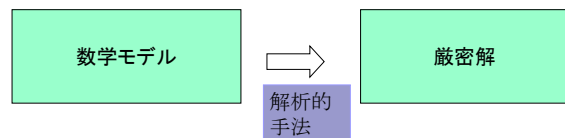
- 東日本大震災の津波
- 福島第一原発事故, 放射能汚染

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

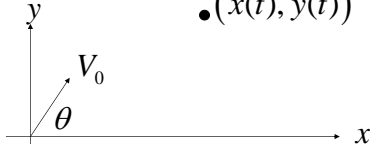
城島の飛球はどこまで飛ぶか?

- ホームランか?
- フライでアウトか?

数学モデルの作成

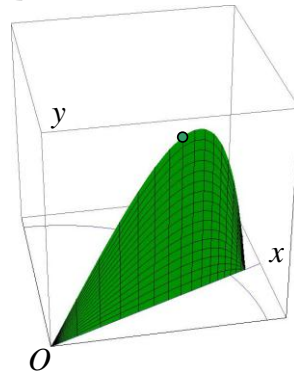
11

$t \in [0, T]$: 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



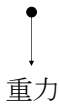
数学モデル1

13

ボールに働く力:

重力

林檎は地面に落ちる



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, 50m/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

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

数学モデル1の解

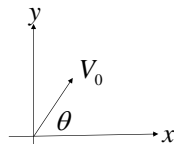
15

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

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

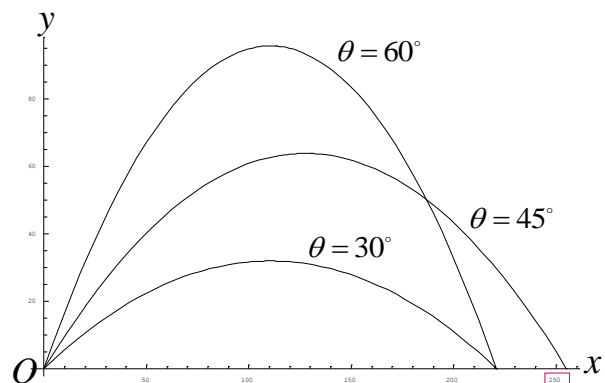
この方程式の解: $x(t) = (V_0 \cos \theta) t$

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

16



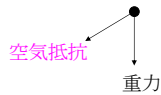
数学モデル2

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

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

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

数学モデル2の解

19

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

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

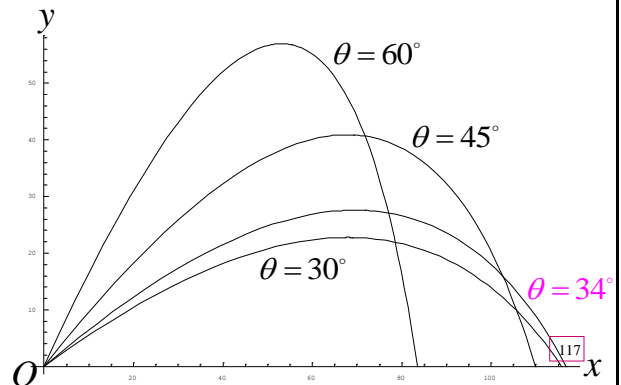
$$x(0) = 0$$

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

同様にして $y(t) = \frac{1}{k^2} \{ -gkt + (1 - e^{-kt})(g + kV_0 \sin \theta) \}$

数学モデル2: いくつかの軌跡

20

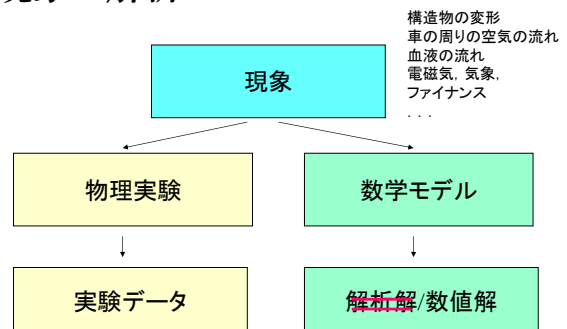


2. 数学モデルが解析的に 解けないとき

21

現象の解析

22



偏微分方程式によるモデル化

23

人間の生活空間:

空間: 3次元, x, y, z

時間: 1次元, t

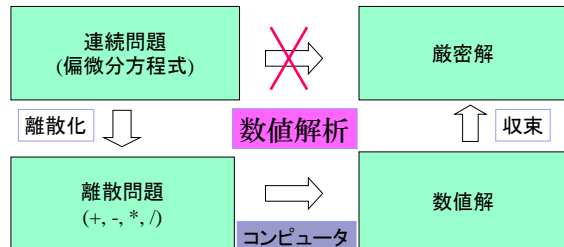
複数の独立変数

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.

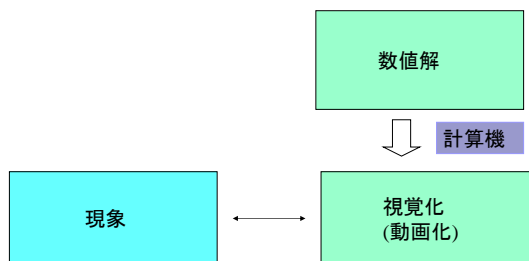
数学モデルの解法

24



数値解の後処理

25



25

連続体力学の巨人達

26

- 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

ナヴィエ・ストークス方程式

27

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

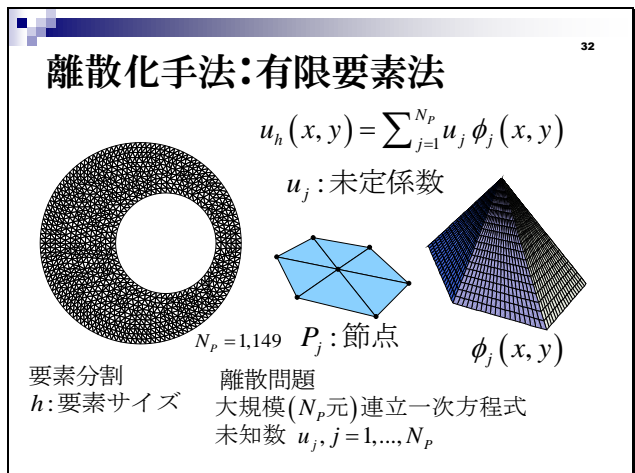
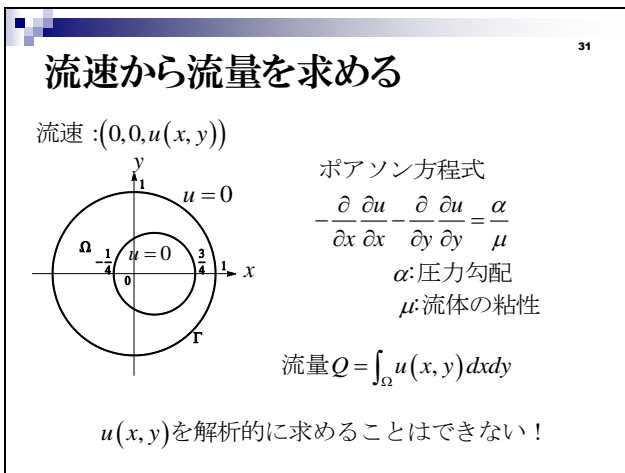
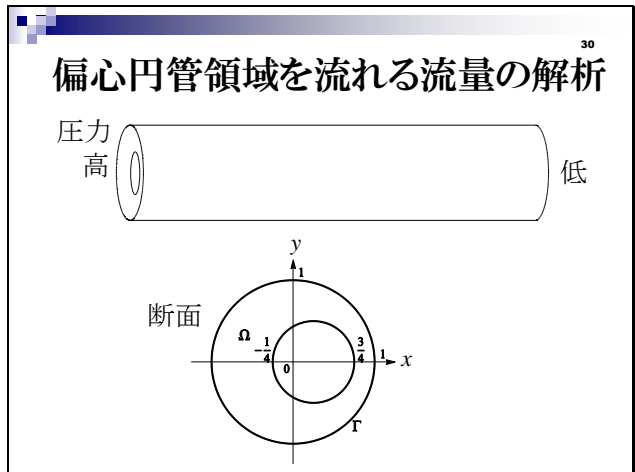
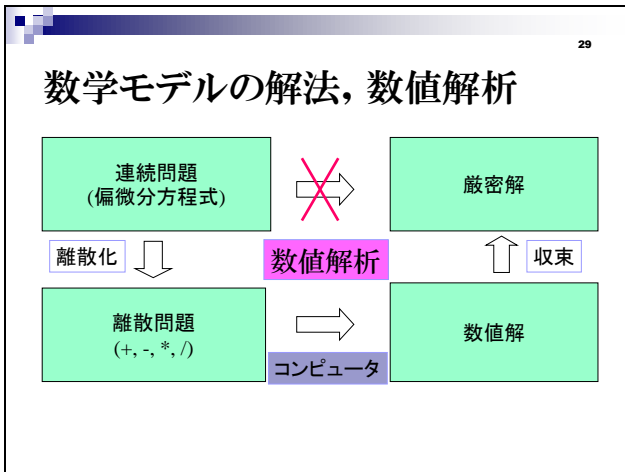
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

非線形偏微分方程式系

コンピュータは必須

28

- 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!



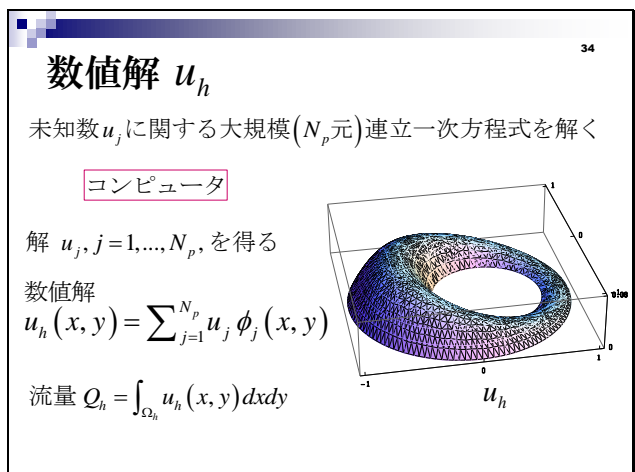
33

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



収束性と誤差評価

35

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

36

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

$u = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ at vertices

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

定常ナビエ・ストークス方程式

定常流の流線

37

$Re = 3,500$

複数流体の流れ問題

38

流体 $0, 1, \dots, m$
 ナヴィエ・ストークス方程式

容器境界
 滑り, または粘着

$i = 1, \dots, m$

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

$\rho_0 = 100, \mu_0 = 2$
 $\rho_1 = 0.1, \mu_1 = 1$

滑り条件

$f = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$
 $\sigma_1 = 2$
 $T = 15$

$N = 32, \Delta t = \frac{1}{16}$

SC01s

単一気泡上昇問題

40

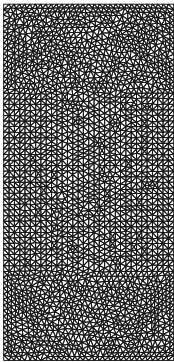
$\rho_1 = 100, \mu_1 = 2$
 $\rho_2 = 0.1, \mu_2 = 1$

$f = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$
 $T = 10$
 $\gamma = 0.0, 1.0, 2.0, 3.0$

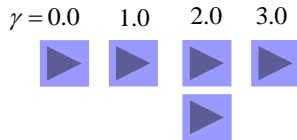
$r = \frac{1}{4}$
 (0,0) slip BC

BB1a_e-1

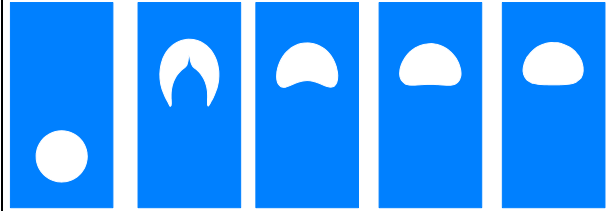
気泡上昇問題, 表面張力依存性 ⁴¹



$N = 32$
 $N_e = 4,580$
 $\text{DOF}(u) = 9,353 * 2 = 18,706$
 $\text{DOF}(p) = 2,387$
 $\Delta T = \frac{1}{8} \quad (T = 10)$
 $\text{Re} \approx 8.8$

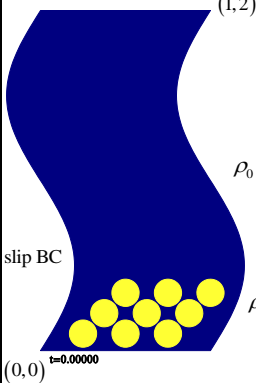


形状の表面張力依存性 ⁴²



$t = 0.0$ $t = 5.0$ $t = 5.0$ $t = 5.0$ $t = 5.0$
 $\gamma = 0.0$ $\gamma = 0.0$ $\gamma = 1.0$ $\gamma = 2.0$ $\gamma = 3.0$

湾曲管内複数気泡上昇問題 ⁴³



$\rho_0 = 100, \mu_0 = 2$

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

$\sigma = 1$
 $T = 30$

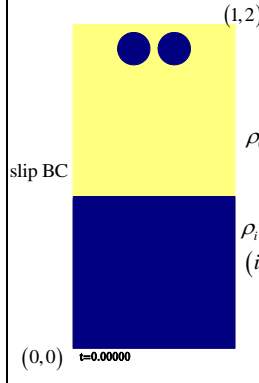
$N = 32, \Delta t = \frac{1}{64}$

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



NSC01s ⁴³

複数液滴落下問題 ⁴⁴



$\rho_0 = 0.1, \mu_0 = 0.01$

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

$\sigma = 0.1$
 $T = 15$

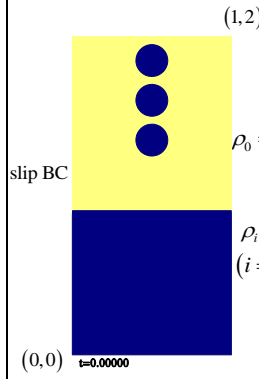
$\rho_i = 100, \mu_i = 0.2$
 $(i = 1, 2, 3)$

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



FDT03s ⁴⁴

複数液滴落下問題(縦) ⁴⁶



$\rho_0 = 0.1, \mu_0 = 0.01$

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

$\sigma = 0.1$
 $T = 15$

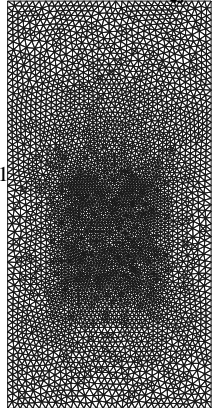
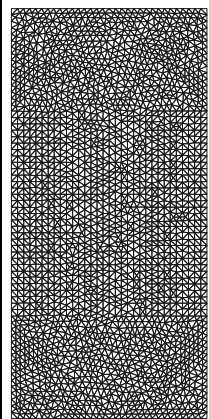
$\rho_i = 100, \mu_i = 0.2$
 $(i = 1, 2, 3, 4)$

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



FDT04s

$ne = 4,564$
 $np3 = 21,021$
 $ne = 8,524$
 $np3 = 38,841$



砂時計形状容器内流体移動問題 47

$(0.5, 2)$

ρ_1

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

nonslip BC

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

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

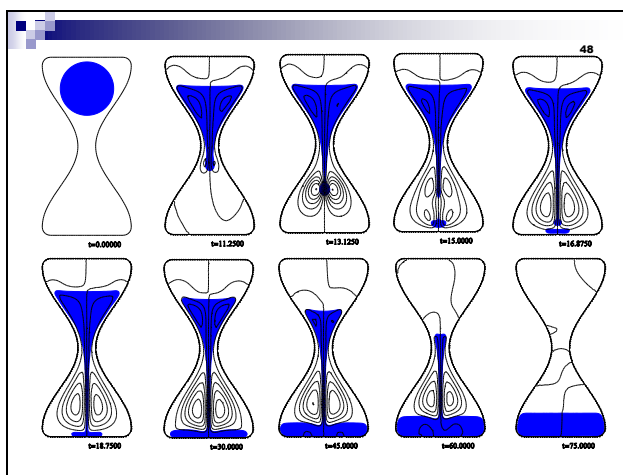
$T = 75$

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

ρ_0

HG02d-ch1-rm0.5

$(-0.5, 0) \quad t=0.00000 \quad r_p=100, r_\mu=0.5, W_c=10, R_c=1, F_v^2=0.5$



おわりに 49

- 「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 50

- [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.