第13章
数値シミュレーション

三川研 3年
有馬祥太

目次

1. 数値シミュレーションとは
2. 差分化について
3. ニュートンの運動方程式について
4. 反応拡散方程式について
5. 実践について

1. 数値シミュレーション(Numerical Simulation)とは

物理学とは、この宇宙を記述する学問である。そして、この宇宙は微分方程式で記述されている。方程式さえわかれば、数値的に解くことが可能である。よってある現象に着目した際の方程式を「支配方程式」(Governing Equation)と言い、その振る舞いを調べることを「数値シミュレーション」という。

微分方程式へ変換

$$m\frac{dv}{dt} = F$$

1-1. 離散化(Discretization)とは

　離散化とは、連続的な表現を行うために、離散的な値に変換することを指す。動画のように、静止画像をコマ送りすることで表現しているため、機械は連続的な表現が難しい。

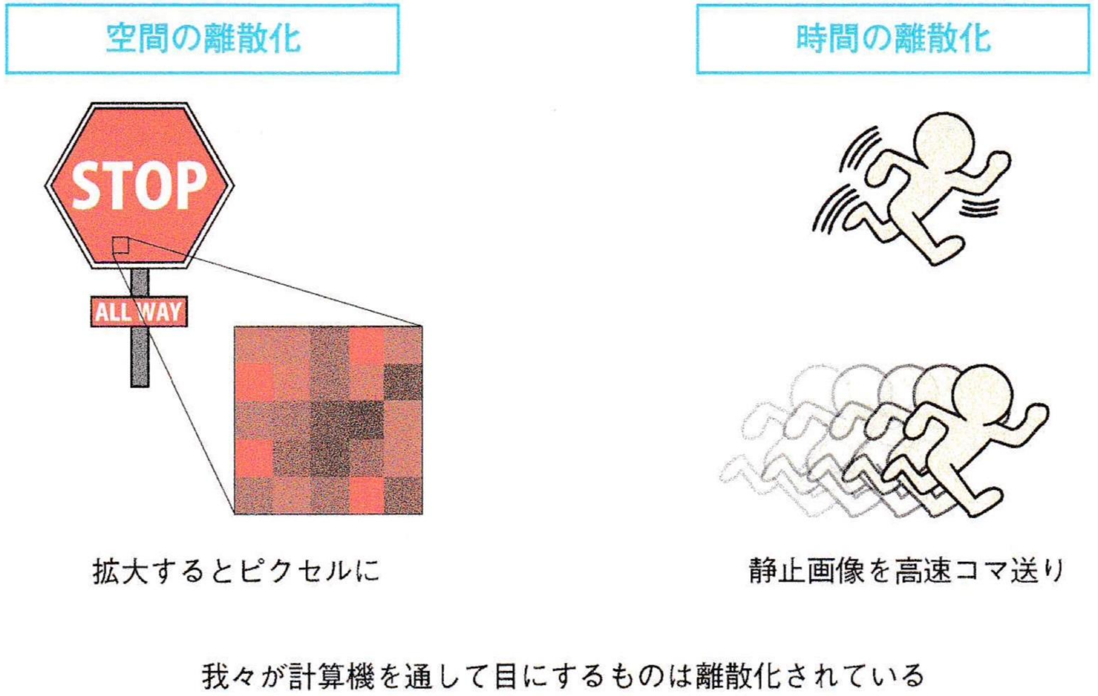


図 13.1　時間と空間の離散化

2. 差分化(Finite Difference Method)について

　微分を離散単位で近似することを差分化と呼び、差分化により微分方程式を扱う手法を指す。

1次近似の差分法を「オイラー法(Euler's method)」と呼ぶ

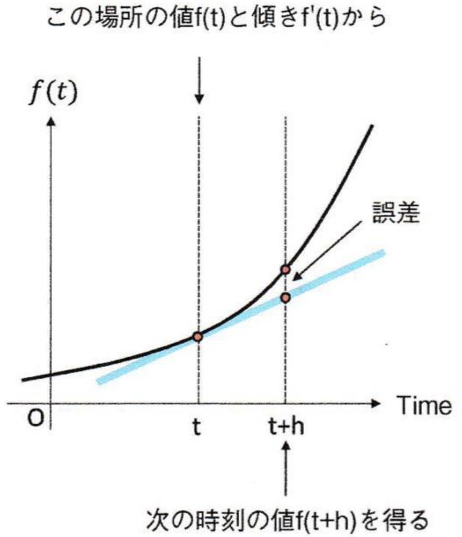


図 13.2　時間の差分化

$$\frac{df}{dt} \approx \frac{f(t+h)-f(t)}{dt}$$

$$f(t+h) = f(t) + h\,f'(t)$$

近似することができる

例)時間による差分化

　ある小さな時間刻みhに対して、f(t)の値からf(t+h)の値を推定することである

$$f(t+h) = f(t) + \int_t^{t+h} f'(t)dt$$

$$f(t+h) \sim f(t) + hf'(t)$$

3. ニュートンの運動方程式について

運動方程式「$F = ma$」について…

物質にかかる加速度と力が比例し、比例係数が物質の質量である

加速度は、速度の時間変化であるため、以下のように記述できる

$$\frac{dr}{dt} = \mathrm{v}$$

速度の概念

$$\frac{dv}{dt} = a$$

加速度の概念

$$m\frac{dv}{dt} = F$$

加速度の概念を適用した運動方程式

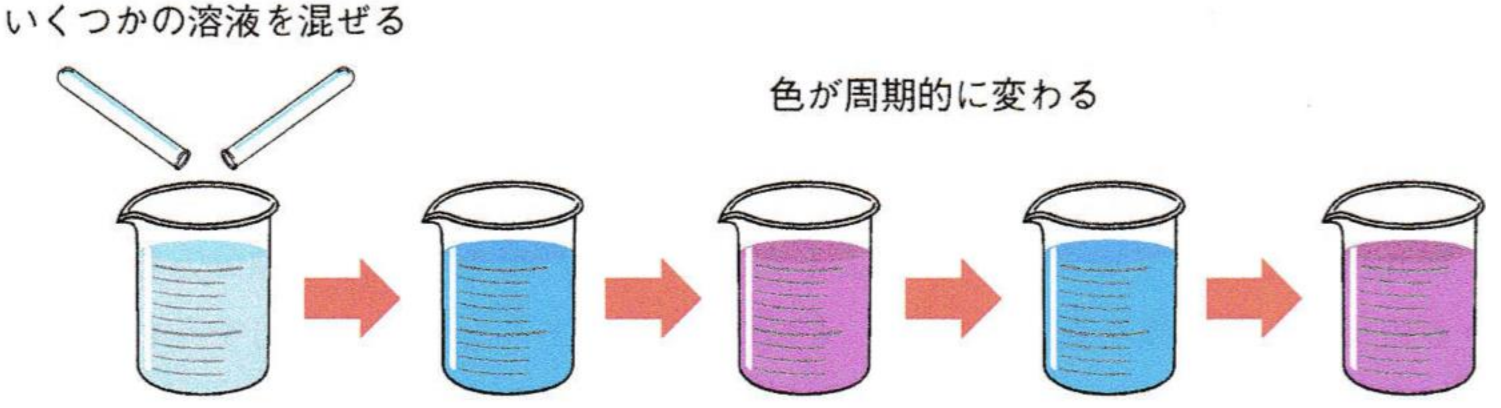
運動方程式=時間に関する「連立常微分方程式」

4. 反応拡散方程式(反応拡散系:Diffusion-reaction-system)について

「時間」「空間」といった2つの次元を同時に離散化する手法

例)BZ反応(ベゾフ・ジャボチンスキー反応;Belousov-Zhabotinsky reaction)

ある溶液を混ぜ、その後周期的に溶液の色が変化する現象



時間的に変動が空間的に伝播している

「化学反応」と「拡散」が組み合わさった現象

4. 反応拡散方程式(反応拡散系:Diffusion-reaction-system)について

グレイ・スコットモデル

反応拡散系のの一例

連立偏微分方程式で記述される

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \Delta u - uv^2 + F(1-u)$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \Delta v + uv^2 - (F+k)\mathrm{v}$$

2種類の化学物質uとvがお互いに反応しながら拡散する式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \boxed{D_u \Delta u} - \boxed{uv^2 + F(1-u)}$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = \boxed{D_v \Delta v} + \boxed{uv^2 - (F+k)v}$$

拡散　反応

図 13.5　Gray-Scott 模型

4. 反応拡散方程式(反応拡散系:Diffusion-reaction-system)について

空間の差分化を行う

連続的な空間をグリッドに分割することで離散的な表現を行う

Δとはラプラシアンと呼び、2回微分演算子である。2次元以下なら右のように定義されます。

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

2変数関数の2階微分(ラプラシアン)は以下のように表現できます。

$$\Delta f(x,y) \sim \frac{f(x+h,y) + f(x-h,y) + f(x,y+h) + f(x,y-h) - 4f(x,y)}{h^2}$$

4. 反応拡散方程式(反応拡散系:Diffusion-reaction-system)について

時間微分は1次の差分をとることで計算可能

時間発展にはラプラシアンという空間微分が含まれており、右では中央差分で近似している

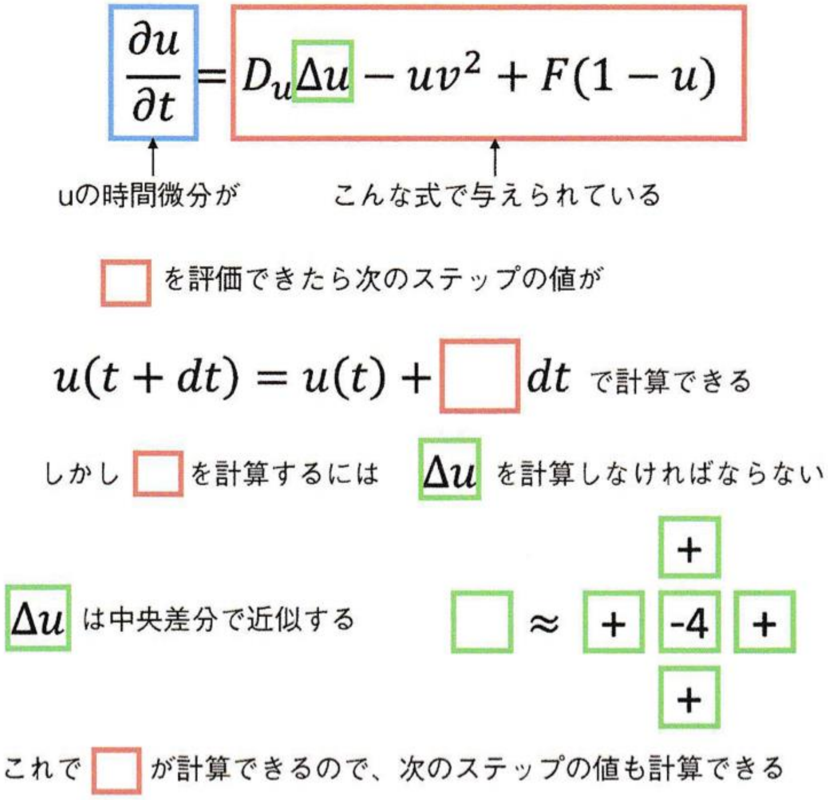


図 13.6　差分計算の流れ

5. 実践

ライナップ

- 運動方程式
- 運動方程式(初速依存性)
- 反応拡散方程式

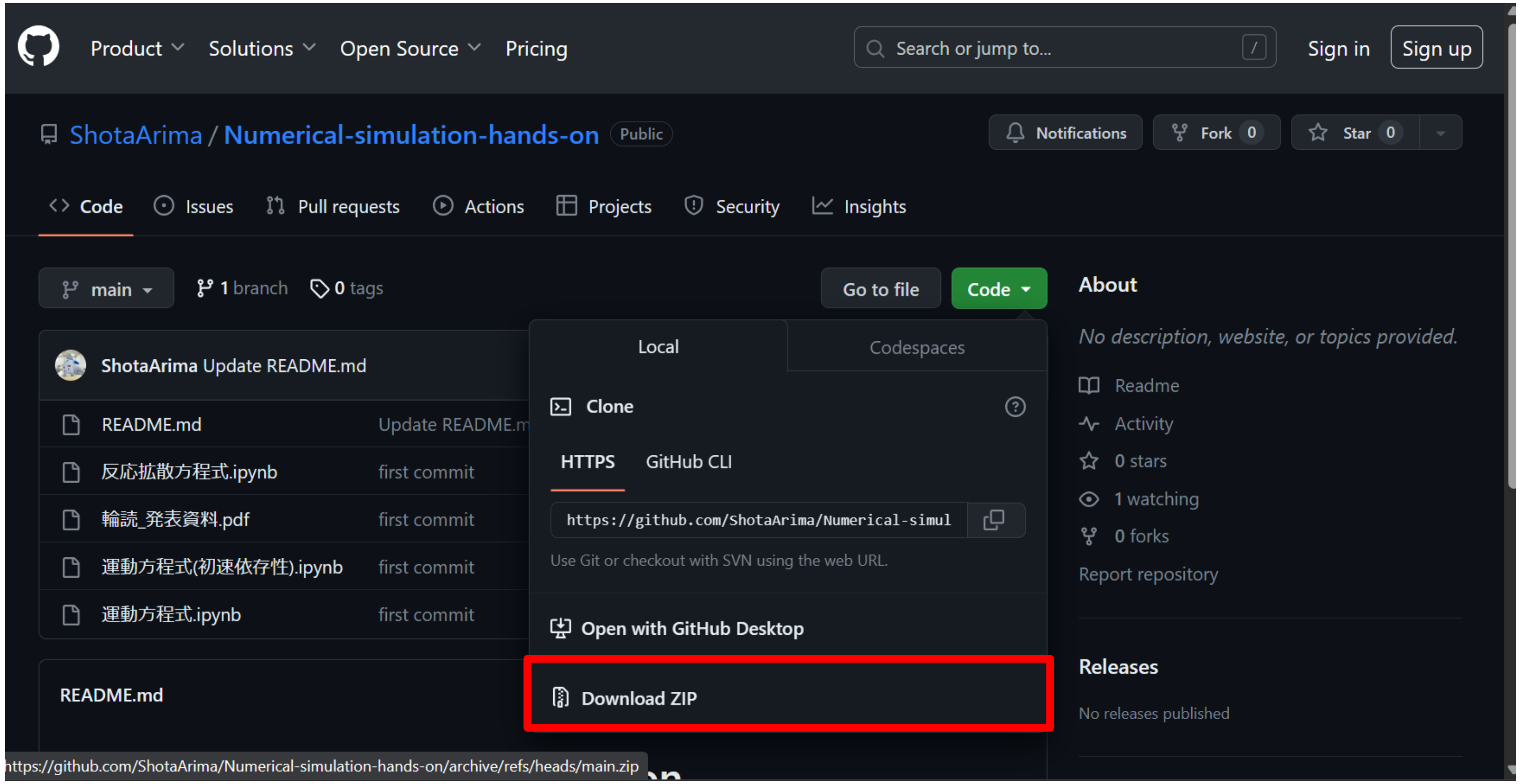
5. 実践

https://github.com/ShotaArima/Numerical-simulation-hands-on

よりソースコードをダウンロードしてGoogle Cloudに上げてください。

5. 実践

1. zipファイルをダウンロードする方法



5. 実践

2. cloneする方法

- ダウンロードフォルダに移動し、コマンドプロンプトを開きます。
- git clone https://github.com/ShotaArima/Numerical-simulation-hands-on.gitと入力するとcloneできます。