

# 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、数值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。



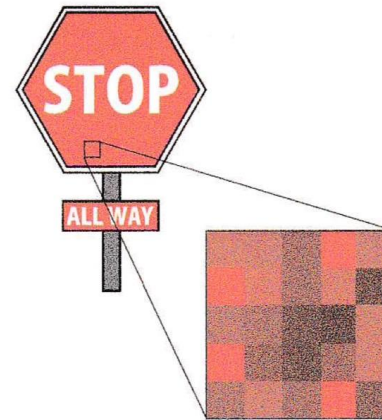
微分方程式へ変換

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

# 1-1. 離散化(Discretization)とは

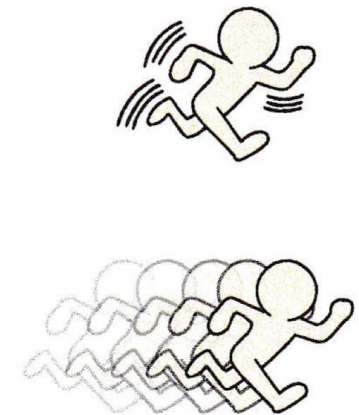
離散化とは、連続的な表現を行うために、離散的な値に変換することを指す。動画のように、静止画像をコマ送りすることで表現しているため、機械は連続的な表現が難しい。

空間の離散化



拡大するとピクセルに

時間の離散化



静止画像を高速コマ送り

我々が計算機を通して目にするものは離散化されている

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

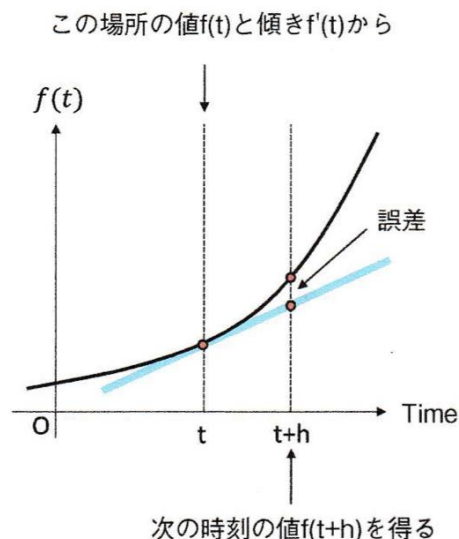


図 13.2 時間の差分化

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



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

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

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



近似することができる

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

### 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

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

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

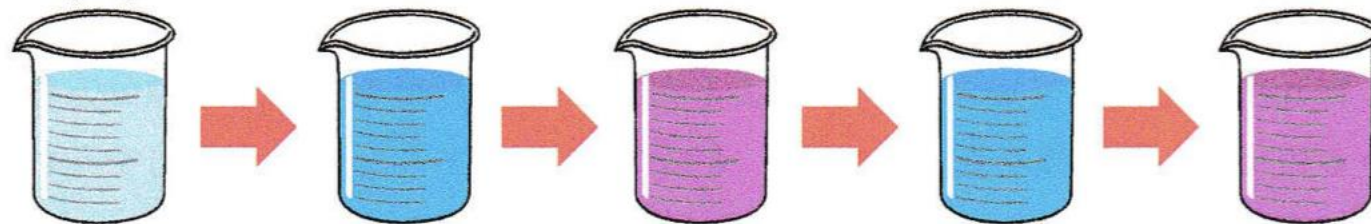
例)BZ反応(ベゾフ・ジャボチンスキー反応;Belousov-Zhabotinsky reaction)

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

いくつかの溶液を混ぜる



色が周期的に変わる



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

反応拡散系の一例

連立偏微分方程式で記述される

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

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

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

↑                      ↑  
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

$\Delta$ 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

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

↑  
uの時間微分が

↑  
こんな式で与えられている

□ を評価できたら次のステップの値が

$$u(t + dt) = u(t) + \square dt \text{ で計算できる}$$

しかし □ を計算するには  $\Delta u$  を計算しなければならない

$\Delta u$  は中央差分で近似する

$$\square \approx \begin{array}{c} + \\ + \quad -4 \quad + \\ + \end{array}$$

これで □ が計算できるので、次のステップの値も計算できる

図 13.6 差分計算の流れ

## 5. 実践



### ラインナップ

- 運動方程式
- 運動方程式(初速依存性)
- 反応拡散方程式

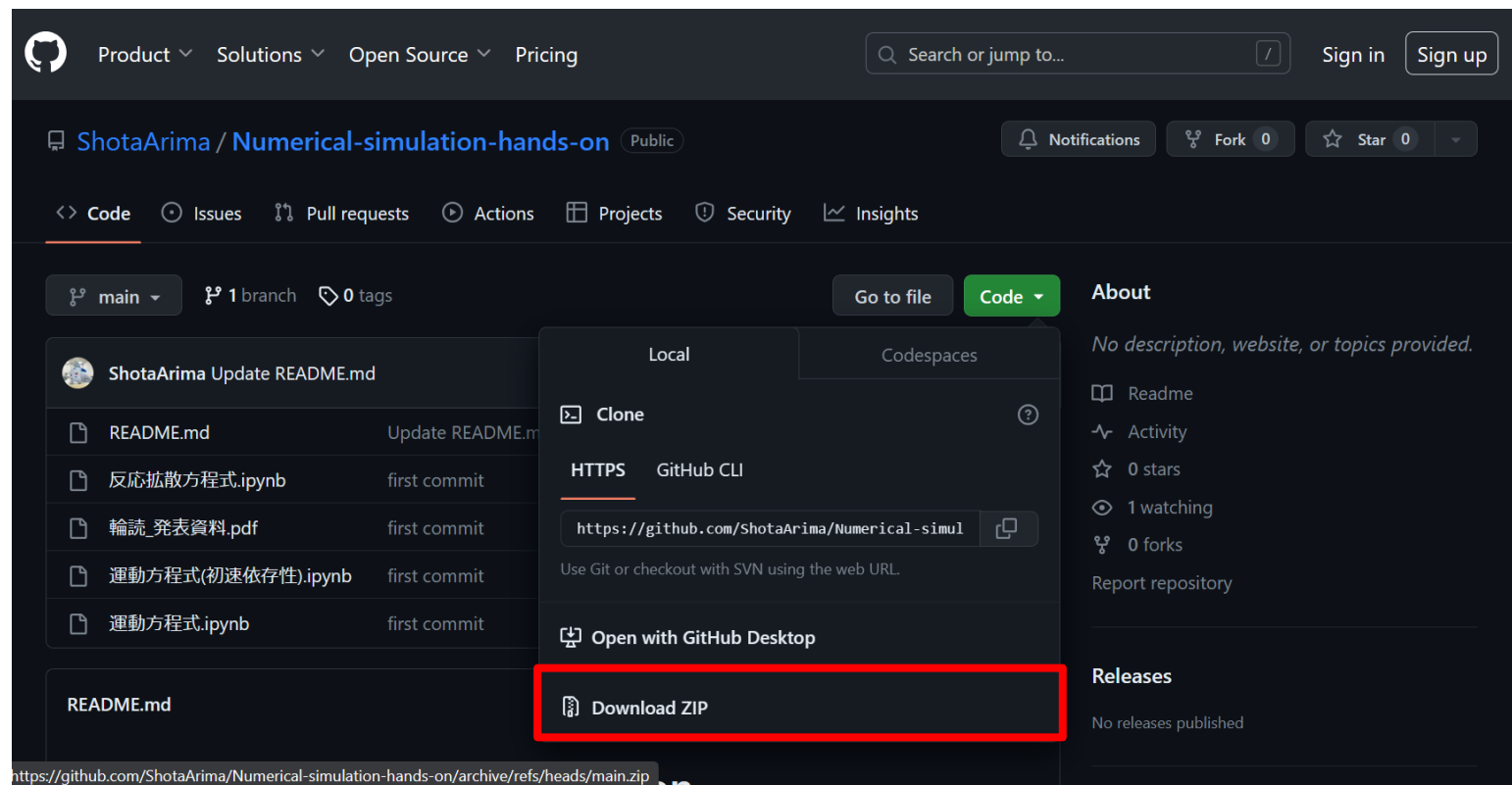
## 5. 実践

<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。

## 5. 実践

```
PS C:\Users\kw14f\Downloads> git clone https://github.com/ShotaArima/Numerical-simulation-hands-on.git
Cloning into 'Numerical-simulation-hands-on'...
remote: Enumerating objects: 24, done.
remote: Counting objects: 100% (24/24), done.
remote: Compressing objects: 100% (17/17), done.
remote: Total 24 (delta 10), reused 14 (delta 6), pack-reused 0
Receiving objects: 100% (24/24), 751.04 KiB | 11.21 MiB/s, done.
Resolving deltas: 100% (10/10), done.
```

```
PS C:\Users\kw14f\Downloads\Numerical-simulation-hands-on> ls
```

ディレクトリ: C:\Users\kw14f\Downloads\Numerical-simulation-hands-on

Mode	LastWriteTime	Length	Name
-a----	2023/07/26 水曜日 13:12	410	README.md
-a----	2023/07/26 水曜日 13:12	3096	反応拡散方程式.ipynb
-a----	2023/07/26 水曜日 13:12	697464	輪読_発表資料.pdf
-a----	2023/07/26 水曜日 13:12	3395	運動方程式(初速依存性).ipynb
-a----	2023/07/26 水曜日 13:12	2108	運動方程式.ipynb