

市民科学研究室 十一人劇場

人工物の設計に役立った数学

2017 年 10 月 14 日

西田 進

目 次

- 1章 人工物の設計とは何か
- 2章 一途に前進して計算するタイプの例
(微分方程式の初期値問題)
- 3章 周りから攻めて内部を計算するタイプの例
(微分方程式の境界値問題)
- 4章 複合的な計算の例
(微分方程式の初期値・境界値問題)
- 5章 「ある量」が最小になるような道を見つける問題の例
(変分法)
- 6章 まとめ

1章 人工物の設計とは何か

人工物とは何か

ここでは、人工物とはハードウェア系の人工物を指す。生物系やソフトウェア系の人工物の場合は、若干異なるかもしれない。私が設計にかかわった人工物の例を写真で示そう。



高エネルギー加速器



高出力マイクロ波電子管



人工衛星



X線CT



液晶ディスプレイ

閑話 1 設計は「客商売」である !

客 : こんなものが欲しい。

設計者 : そりゃ無理だ。こんなものなら作れるだろう。

やってみなきゃわからないけれど。 やってみましょう。

設計とは、客が所望する人工物をつくるに必要な技術資料を創ることである。

客との会話で、「設計要求」(設計目標ともいう)ができる。これから、設計の仕事が始まる。

設計者は、設計に必要なデータを得るため、解析、シミュレーション、基礎実験などを行う。

この段階で、いろいろな「数学」を使う。設計の結果は「設計書」にまとめられる。

「設計書」には、設計者の意図を、製作者に伝えるためのすべてのドキュメントが含まれる。

① 設計の手順書(どのような手順で設計したかを示す書類)

この中には解析にどんな数学を使ったかも含まれる。手順書を作っておかないと、技術が継承されず、後日類似の注文が来たときに、スムーズに設計ができない。

② 製作用の図面(機械的な図面のほか、材料、配線図、フローチャートなど)

製作用の図面には、製作者が、その人工物を製作する際に必要となる一切のドキュメントが含まれていなければならない。

設計書に従って人工物をつくるのは、製作者の仕事である。設計者が優秀で、かつ製作者のスキルが高ければ、製作することは製作者に任せられるはずである。

しかし実際はそうはいかない。特に開発製品、インデントもの(注文により少数製作するもの)では、設計者自らが製作したり、製作者と一緒に製作したりすることも多い。

閑話 2 設計で一番必要なことはリベラル・アーツである !

さぞかし設計では専門的な知識が必要だと想像されるが、実は一番必要なものはリベラル・アーツである。リベラル・アーツ(liberal arts)は、ギリシャ・ローマ時代に源流を持つが、現代的に言えば「文系・理系を問わず誰もが身に付けるべき基礎教養的科目」といいだろう。

客は何を欲しがっているのだろうか

客の要望を実現するためには、どんな技術が利用できるか

設計するためには、どんな数学が使えるだろうか、どんな実験をすればいいだろうか

これには、リベラル・アーツが答えてくれる。専門的な知識は、設計を進めながら習得していけばよい。

2章 一途に前進して計算するタイプの例 (微分方程式の初期値問題)

例として、大砲から打ち出された砲弾の弾道を計算する場合を考える。

弾道を決める計算式は、一般に次の式で表現される。(非常に簡単化してある)

$$\frac{du}{dt} = f(t, u) \quad \text{式(1)}$$

ここで、 u は位置、速度などの広義の座標、 t は時間、 f は関数である。

式(1)は常微分方程式と呼ばれる。発射点である大砲の位置、砲身の方角、発射速度など(これらを**初期条件**という)を決めると、その後の弾丸の位置は式(1)から決まるのである。初期条件を決めて微分方程式を解く問題を**微分方程式の初期値問題**という。

実際の問題では座標は3次元であり、ニュートンの運動方程式は2階の微分方程式であるので、下記のように複雑であるが、ここでは簡単な式(1)を考える。

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2x}{dt^2} &= f_2\left(t, x, y, z, \frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{dz}{dt}\right) \\ \frac{d^2y}{dt^2} &= f_2\left(t, x, y, z, \frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{dz}{dt}\right) \\ \frac{d^2z}{dt^2} &= f_2\left(t, x, y, z, \frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{dz}{dt}\right) \end{aligned} \right\}$$

さて、式(1)が解析的に解けるのは、ごく限られた場合だけである。そこで、設計者は式(1)を数値的に解く必要がある。数値的に解く方法を、**数値解法**という。

式(1)を数値的に解くには、本来連続的である時間を Δt というステップで刻んで近似的に計算する。近似計算法はいろいろあるが、1900年頃の数学者 Runge と Kutta が考案したルンゲ・クッタ法が簡単で精度がよいので、21世紀の現在でも使われている。計算の道具としては、私の若い頃は「タイガー手回し計算機」、今はコンピュータを使用する。この例では、計算の結果を図にすると、次のようになる。

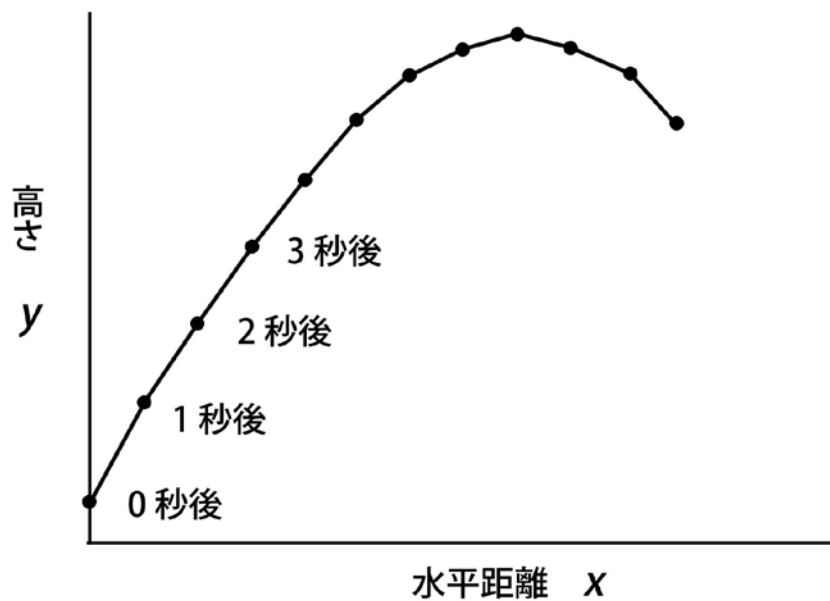


図1. 大砲から打ち出された弾丸の計算例(模擬的に示す)

時間とともに発展していく現象の場合、現象を記述する微分方程式があれば、それを数値的に解くことにより、遠い将来まで現象の予測ができるかという、そうはいかない場合がある。微分方程式が非線形の場合には、与えた初期条件にわずかな差があると、ある程度時間が経つと現象に大きな差を生じ、混沌としてしまう場合がある。これをカオス(chaos)という。気象予報で生じるカオス現象の例を後の閑話5で紹介する。

設計は、数値を出して、なんぼの世界！

閑話 3 代数学と数値解法

「代数学」によると、3次方程式はカルダノの方法で、4次方程式はフェラーリの方法で代数的に解くことが可能であるが、5次以上の代数方程式は代数的に解けないことが証明されている。

しかし、ただし3次方程式と4次方程式は「代数的に解ける」というだけで、数値が計算できない。代数方程式を数値的に解くことは、代数学とは別に数値解法として発達した歴史がある。

3章 周りから攻めて内部を計算するタイプの例（微分方程式の境界値問題）

一例として、避雷針の尖端に電界が集中する様子を計算する場合を考える。

最初に、計算した結果を図2を示そう。

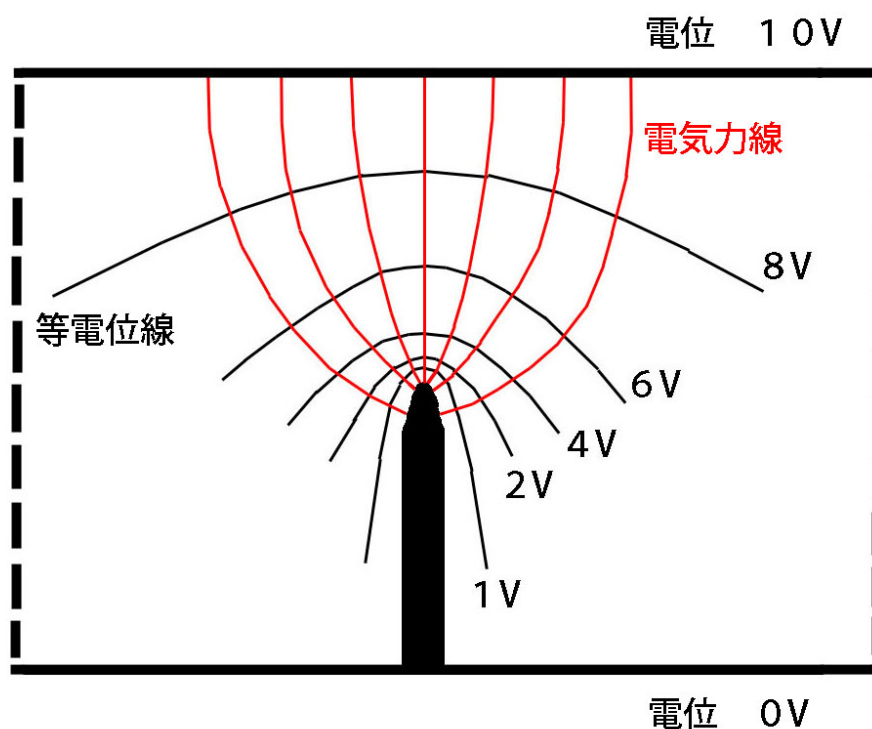


図2. 避雷針の尖端に電界が集中することを示す図（模擬的に示す）

次に、計算方法を説明しよう。

考える領域の周囲の条件（数学では境界条件という）が与えられた場合に、領域の内部の電位計算するには、次のポアソンの式を解けばよいことが分っている。（2次元の場合の例）

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad \text{式(2)}$$

ここで、 u は電位、 x, y は2次元の空間座標である。

式(2)は数学的には偏微分方程式と呼ばれるものである。考える領域の境界条件を与えて、式(2)から、内部の電位 u を求めるような問題は、微分方程式の境界値問題と呼ばれる。

微分方程式の境界値問題が解析的に解けるのは、ごく限られた場合だけである。そこで、世の中の設計者は数値的に解く**数値解法**を考えた。

式(2)の数値解法の例を示そう。

図3に示すように、領域を碁盤の目(格子)に分ける。

点0, 1, 2, 3, 4における u の値を u_1, u_2, u_3, u_4 とすると、 u_0 を次のように決めると、よい近似になることが導かれる。

$$u_0 = \frac{1}{4}(u_1 + u_2 + u_3 + u_4) \quad \text{式(3)}$$

u の値が分っている周辺(境界ともいう)から始めて、式(3)に従って内部の u の値を逐次決定することを繰り返すと、 u の真の値に近付いて行く。このような数値計算法を、**繰り返し法**とか**逐次近似法**という。大変時間のかかる数値計算法である。

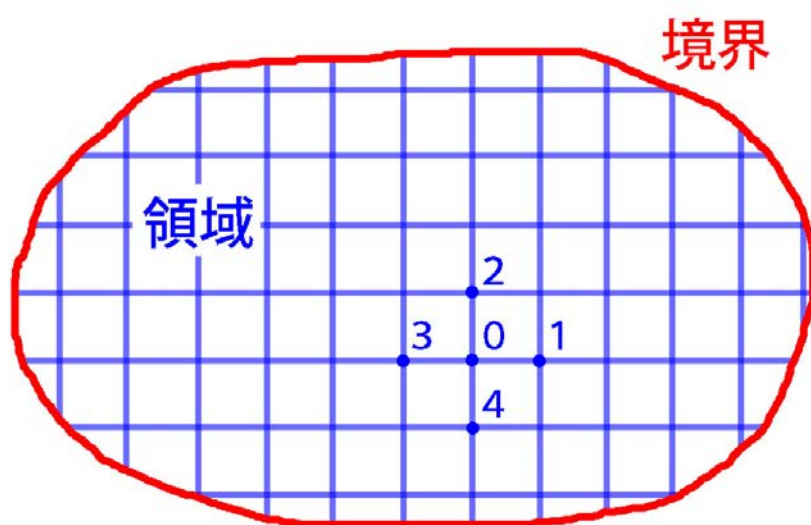


図3. 境界で囲まれた領域に格子点を設ける

「微分方程式の初期値問題」の場合には、**ルンゲ・クッタ法**という高速で精度のよい数値解法があったが、「微分方程式の境界値問題」の場合には、上に述べた**逐次近似法**のような遅い数値計算法しかないので、タイガー計算機時代には時間がかかるため実用にならず、高速のコンピュータが出現して、やっと実用になった。

4章 複合的な計算の例（微分方程式の初期値・境界値問題）

実際に私が「マイクロ波電子管」の設計で行った計算の例を簡単に説明する。

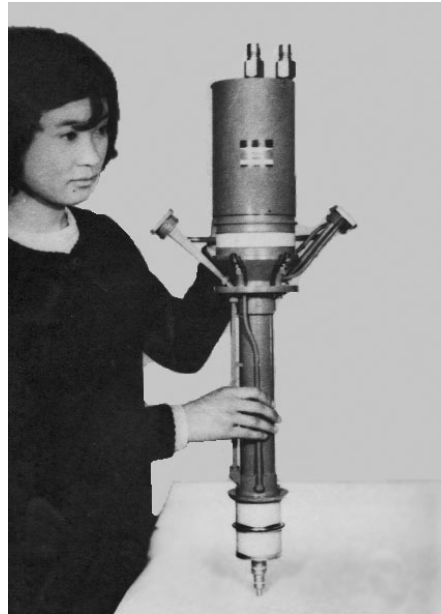


図4. 私が設計したマイクロ波電子管の例

「マイクロ波電子管」というのは、マイクロ波を発生させる装置である。身近なところでは電子レンジ、レーダーなどに使われている。また高エネルギー加速器、核融合実験装置などにも使われている。

従来のマイクロ波電子管では、円形の棒状に電子ビームが使用されていたが、マイクロ波電子管の高性能化のためには、竹輪（ちくわ）状の中空電子ビームが必要になった。そこで中空電子ビームを発生できる電子銃の設計を行った。設計段階で計算した電子軌道と電極形状を、下左に、実際に中空の電子ビームを発生させて写真を下右に示す。

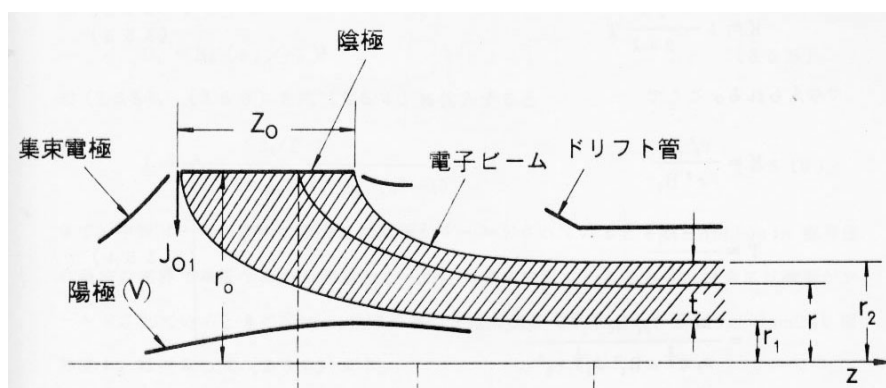


図5A. 電子軌道と電極形状の計算値

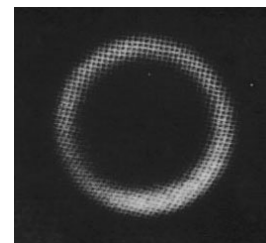


図5B. 中空電子ビームの写真

閑話 4 技術者は実験をしなさい !

私は入社したころ、上長からよくいわれたものである。

「西田君、実験をしなさい。実験はあなたの考えが正しいかどうかを教えてくれる！」

さて、電極形状が与えられたときに電位を計算するのは、「避雷針の電界」の場合と同じ「微分方程式の境界値問題」である。電位が与えられたときにその中を飛ぶ電子の軌道を計算するのは、大砲から打ち出された砲弾の弾道を計算する場合と同じ「微分方程式の初期値問題」である。

実は、この中空電子ビームを発生させる設計は、通常の解析とは反対に、与えられた軌道を電子が飛ぶように電極の形状を決めるという逆問題であった。そのため双曲型偏微分方程式の初期値問題という数学的には特異な問題となり、領域を複素平面に拡張することにより解決した。これについてはここでは述べない。

(文献)西田進:”指数関数形マグネトロン入射電子銃” 電子情報通信学会誌論文集、54B、8、P.498
(1971年8月)

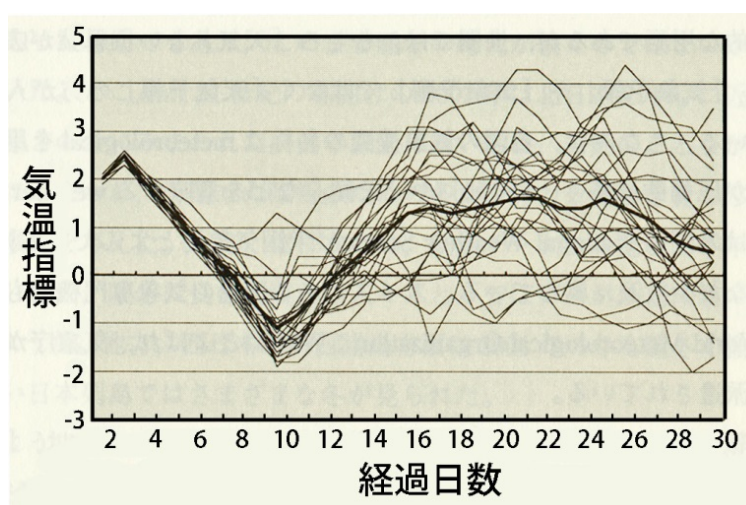
全文は、<http://www.nishida-s.com/yg/iece-1971-54b-8.pdf> から入手可能

閑話 5 気象予報と気候予測

このコラムは、私の職業経験ではなく、退職後の見聞である。

気象予報(いわゆる天気予報)は気象を支配する多元の微分方程式の初期値・境界値問題である。たとえば、空間を一辺100kmの基盤の目(格子)に分け、時間を10分間刻みにする。これを連続値の離散化という。空間と時間を離散化することにより、数値計算が可能となる。このようにして数値計算した結果は、下の図のように経過日数が1週間を過ぎると初期条件により計算結果に大きな違いを生じ(カオス)、気温の予測が困難になる。(週間予報が限度!)そこで平均値をもって予測とする。これをアンサンブル予報という。

地球温暖化で50年後の気温を予測するのは、このようなアンサンブル予測である。



1か月アンサンブル予報の例(気象庁データより)

5章 「ある量」が最小になるような道を見つける問題の例（変分法）

光が、点 A から出て点 B に達するとき、どのような経路を通るだろうか。物理学によると、光は最短時間で到達できる道を選ぶという。（「最短距離」ではない！）

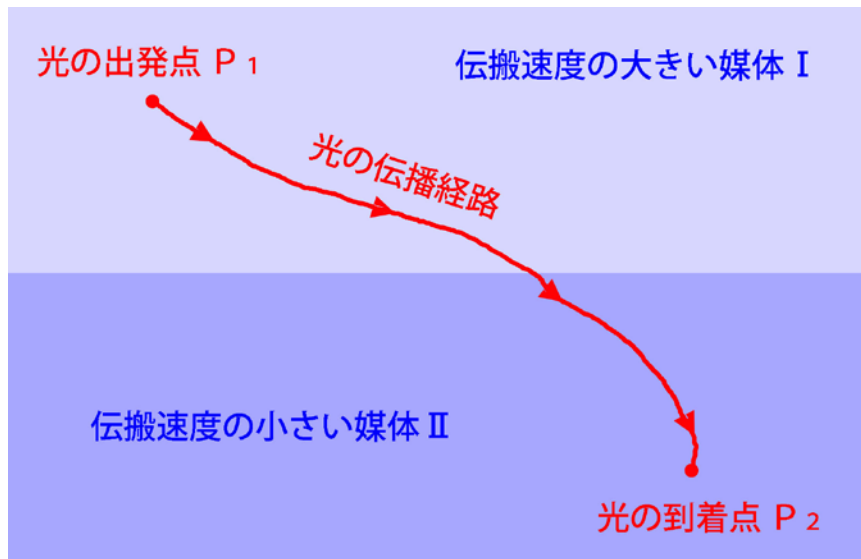


図6で、光の伝播速度の大きい媒体 I と小さい媒体 II が平面で接しているとする。点 P₁ から点 P₂ まで光が伝播するに要する時間 t は次式で表される。

$$\text{伝播時間} = \int_{P_1}^{P_2} \frac{ds}{v} \quad \text{式(4)}$$

ここで、 v は、その場所での光の伝搬速度である。 ds/v は、光が距離 ds を進むに要する時間である。

光は最短時間で到達できる経路を選ぶので、その経路を決める問題は、次の変分問題に帰着される。

$$\delta \int_{P_1}^{P_2} \frac{ds}{v} = 0 \quad \text{式(5)}$$

数学の本によると、変分問題は、「変分問題から導かれるオイラーの微分方程式を解けばよい」とされている。今の例では、幸いにも、オイラーの微分方程式は正確に解くことができ、その答から図7に示す「**光の屈折におけるスネルの法則**」が得られる。

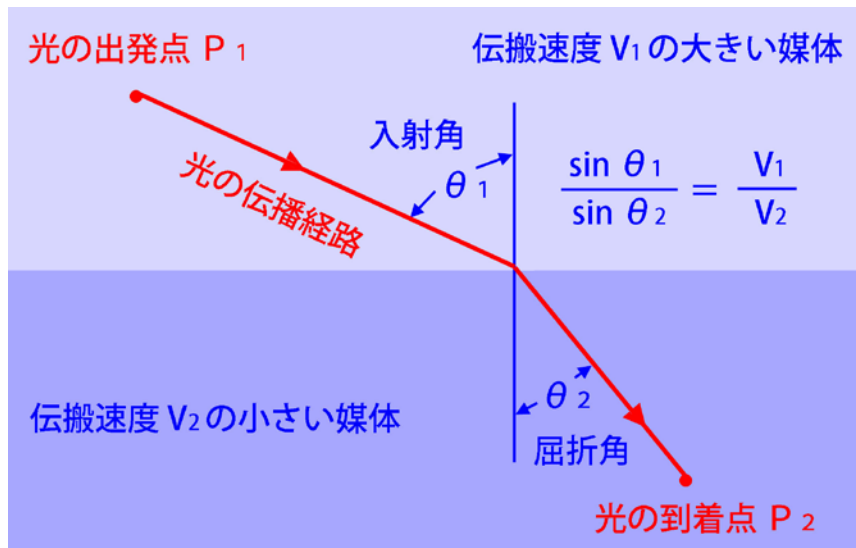


図7. 光の屈折におけるスネルの法則

しかしながら、多くの場合にオイラーの微分方程式は複雑で解くことができない。そのため、変分法は設計者が行う数値解法には馴染まないものとされてきた。私は液晶ディスプレイの研究で、変分問題の新しい数値解法を考案し成果を得たので、紹介する。

液晶ディスプレイの研究の一例

液晶ディスプレイの研究では、図8のように2枚の透明電極の間に挟まれた液晶分子の並び方（配向という）を計算する必要がある。

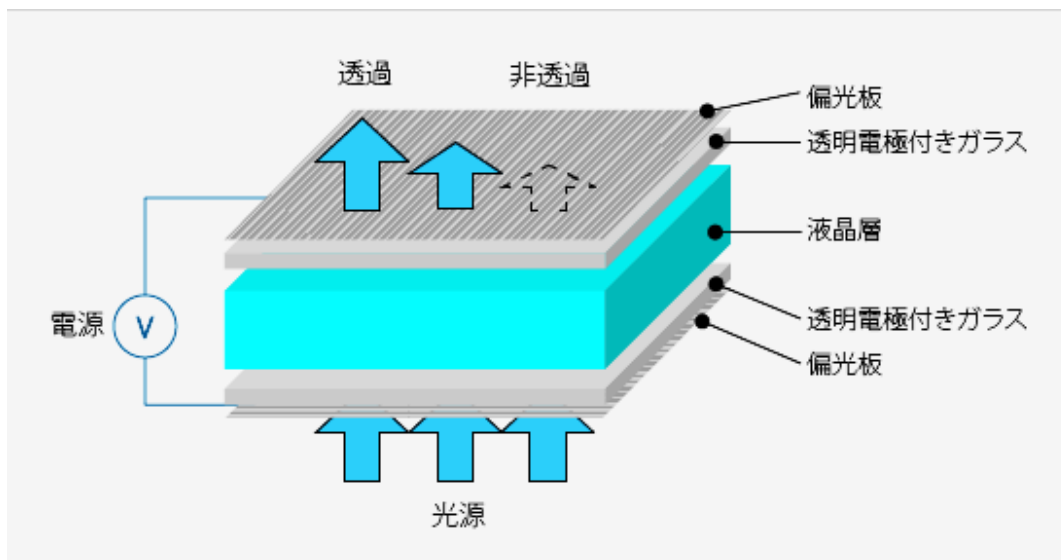


図8液晶ディスプレイの原理

さて、液晶が持つ自由エネルギー F は、液晶物理学によると、式(6)で与えられる。

$$F = \int_V \left[\frac{1}{2} K_1 (\nabla \cdot n)^2 + \frac{1}{2} K_2 (n \cdot \nabla \times n)^2 + \frac{1}{2} K_3 \{ (n \times (\nabla \times n))^2 \} \right] dV \quad \text{式(6)}$$

ここで、 V は、液晶の体積空間、 ∇ はベクトル演算子、 n は液晶のディレクタベクトル、 K_1 、 K_2 、 K_3 は液晶の物性値であるが、ここでは説明を省略する。

物理学の法則として、自由エネルギーが最小となるように液晶ディレクタベクトルの空間分布が決まる。

すなわち、液晶の配向を求める問題は下記の変分問題に帰着する。

$$\delta \int_V F dV = 0 \quad \text{式(7)}$$

さて、式(7)は、一部の簡単な場合を除いて解析的に解くことができない。そこで、液晶の自由エネルギーが最小となるような配向をコンピュータに探させるという「**変分法の数値解法**」を試みた。

私が試みた「変分法の数値解法」の考え方は、次の通りである。

まず、配向(すなわち、液晶ディレクタの空間分布)は、次のように表すことができると仮定する。

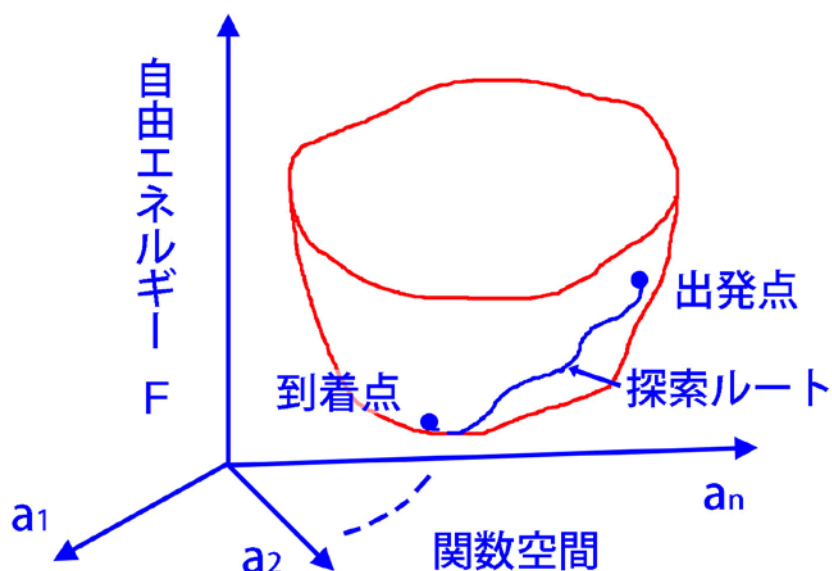
$$n = a_1 \cdot n_1 + a_2 \cdot n_2 + a_3 \cdot n_3 + \dots \quad \text{式(8)}$$

ここで、 n_1, n_2, n_3, \dots は境界条件を満たす関数列である。 a_1, a_2, a_3, \dots は、これから決めるべき未定係数である。自由エネルギー F が最小になるように未定係数を決めることができれば、目的が達せられる。

最初に、未定係数 a_1, a_2, a_3, \dots に仮の値を与えてコンピュータに自由エネルギー F を計算させる。次に、 a_1, a_2, a_3, \dots を少し変更して、 F を計算させる。その結果、前の F の値よりも小さくなれば、いい方向に進んでいると判断し、その方向にさらに a_1, a_2, a_3, \dots を少し変更して、 F を計算させる。これを繰り返す。

a_1, a_2, a_3, \dots を変更すると、どうしても F の値が大きくなる場所に到着すれば、 F が最小になったものと判断する。そのときの a_1, a_2, a_3, \dots を使って式(8)で計算される液晶ディレクタが、物理的に実現される液晶の配向である。

変分法の数値解法の考え方を図9に示す。



計算の結果得られた液晶配向の例を、図10に示す。

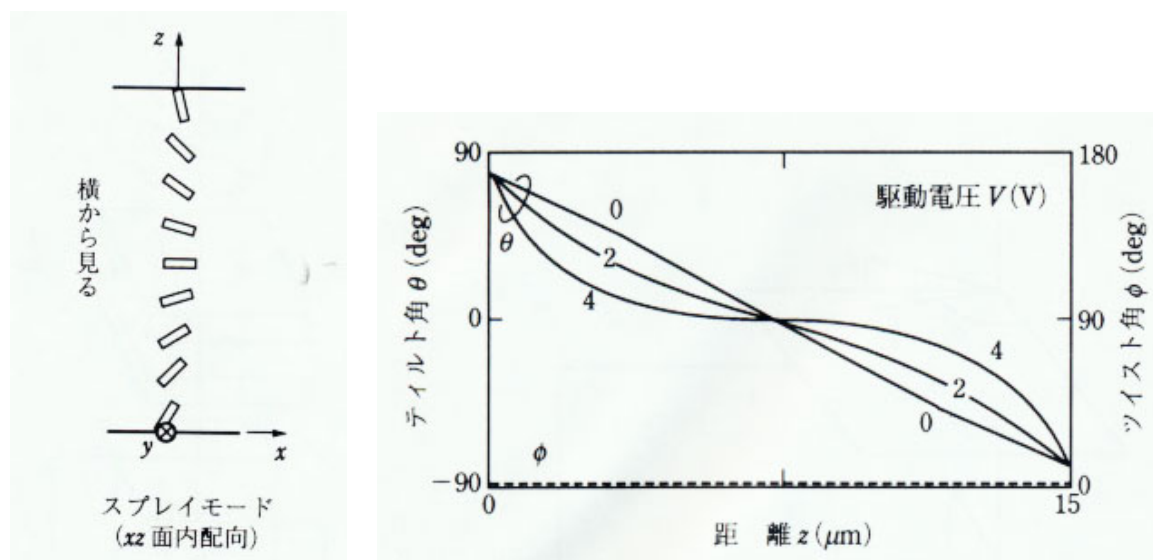


図10. 変分法の数値解法で得られた液晶の配向の一例

図10で得られた配向を使用した液晶ディスプレイは、正面のみならず斜め方向から見たときにも視認性がよいことがシミュレーションと実験で示された。

(文献) 西田進ほか: "垂直配向スプレッド・ネマティック型液晶ディスプレイの検討" 映像情報メディア学会誌、Vol.52、No.7、PP.1000－1009、1998年7月
全文は、https://www.jstage.jst.go.jp/article/itej1997/52/7/52_7_1000/_pdf から入手可能

6章 まとめ

以上、「人工物の設計に役立った数学」の中からいくつかの例を説明した。

数学が、設計の世界でどのように使われているかを知る一助となれば幸いである。

閑話 6 設計に従事する技術者(設計者)に望むこと

1. 設計は客商売である。客の要望を満足させることに、自分も満足しなければならない。
2. 設計とは、設計者から製作者に供給する技術資料(数値の入った図面など)を作成することである。
3. 既存の「数学」は必ずしも数値計算を目的にしていないので、設計ににすぐに役立つとは限らない。しかし、数値計算のためのヒントは、「数学」にある。
4. 設計に使える数学を貪欲に探そう。もし見つからなかったら、自分で造り出そう。
5. 設計は実物を作ることで確認される。実験・製作は設計者の命である。