

2025年度

総合演習2

マクロ系シミュレーション

(第3回)

🎙 中島 涼輔 (システム情報)

@ NSSOL Lab.

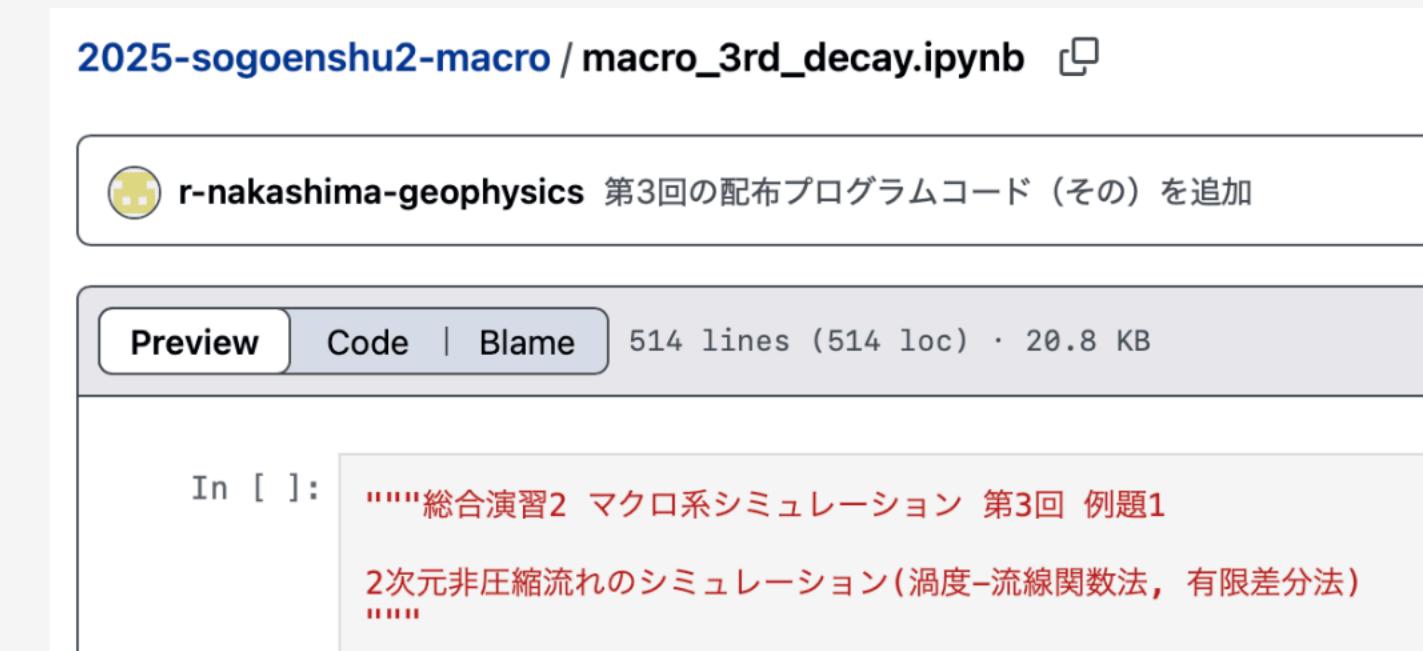
2025/10/29

マクロ系シミュレーションの予定

- ✓ 第0回 (2025/10/01)
 - ▶ 概要
- ✓ 第1回 (2025/10/08)
 - ▶ 偏微分方程式の数値解法
 - ▶ 楕円型方程式 (定常拡散方程式) のシミュレーション
- ✓ 第2回 (2025/10/22)
 - ▶ 放物型方程式 (非定常拡散方程式) のシミュレーション
 - ▶ 双曲型方程式 (移流方程式) のシミュレーション
- ✓ 第3回 (2025/10/29)
 - ▶ ソレノイダル場 (非圧縮流体) のシミュレーション
 - ▶ 逆問題, データ同化
- ✓ 第4回 (2025/11/05)
 - ▶ 質問・課題

プログラムコードの配布

- ✓ <https://github.com/r-nakashima-geophysics/2025-sogoenshu2-macro.git> で配布します
 - ▶ macro_3rd_decay.ipynb と macro_3rd_adjoint.ipynb をダウンロードしてください



- ✓ git pull でも可

```
git remote -v # リモートリポジトリ (origin) を確認  
git pull origin main
```

- ✓ 本日の演習と第3回小課題で使います

流体力学の基礎方程式

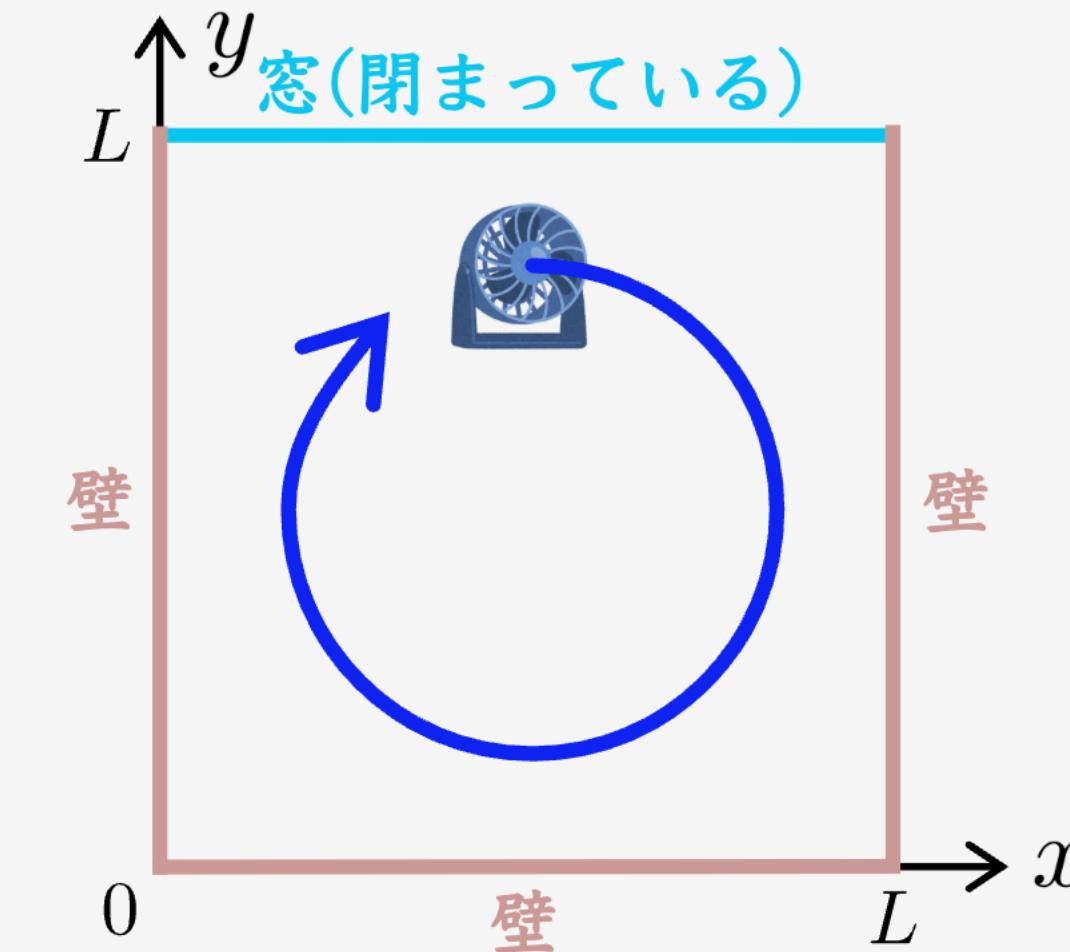
- ✓ 質量保存則: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$
- ✓ 運動方程式 (運動量保存則): $\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \rho \mathbf{F}$
- ✓ これらの式に (1) Newton 流体, (2) **非圧縮 (空気や水の体積が変わらず, 密度一定)**, (3) 空間的に一様な粘性率を仮定すると, (非圧縮) Navier-Stokes 方程式が得られる

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}$$

\mathbf{v} は流速, p は圧力, ρ は密度 (定数), ν は動粘性係数 (定数), \mathbf{F} は単位質量あたりの外力, $(D/Dt) \equiv (\partial/\partial t) + (\mathbf{v} \cdot \nabla)$ は Lagrange 微分

演習問題

- ✓ 前回登場したサーチューラー付きの正方形の部屋を再度考える
 - ▶ 人が全員退室したので、窓を閉め、サーチューラーの電源を切った
 - ▶ 電源を切ったタイミングを $t = 0$ とし、それ以降の空気の流れの時間変化を調べる
- ✓ このような流れでは、空気の体積は大きく変わらないので、**非圧縮流体シミュレーション**が有効



$$v_x = -v_0 \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{L}\right)$$

$$v_y = v_0 \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{L}\right)$$

非圧縮流体シミュレーションの難しさ

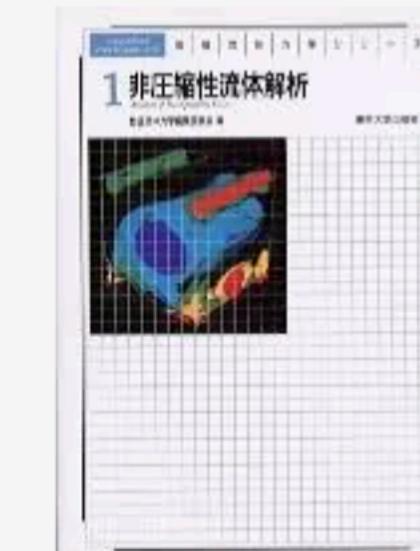
- ✓ これまでのシミュレーションでは, 求めたい未知関数(例えば, CO_2 濃度)に境界条件や初期条件だけが課されていた
- ✓ しかし, 非圧縮流体の方程式には $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ という追加の条件があり,これを満たしながら時間ステップを進める必要がある

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}$$

- ✓ $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$ を満たすベクトル場 \mathbf{V} のことをソレノイダル場, 発散をとると 0 になる条件のことをソレノイダル条件という
 - ▶ ソレノイダル場の例: 非圧縮流体の速度場 \mathbf{v} , 磁場 \mathbf{B}
 - ▶ 本日の前半は, ソレノイダル場をシミュレーションする方法を勉強します

ソレノイダル場のシミュレーション

- ✓ 様々な方法が提案されている
- ✓ ソレノイダル条件を自動的に満たす, 新たな量を導入する方法
 - ▶ **渦度-流線関数法**, トロイダル-ポロイダル分解など
 - ▶ 総合演習2では, この方法を扱います
- ✓ Poisson 方程式などを用いて, 発散を除去する方法
 - ▶ **MAC** (Marker and Cell) 法
 - ▶ **フラクショナルステップ法 (射影法)**
 - ▶ SMAC (Simplified MAC) 法
 - ▶ HSMAC (Highly Simplified MAC) 法 (SOLA 法)
 - ▶ SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) 法など
- ✓ 方程式を人為的に変更して, 発散を伝播・減衰させる方法
 - ▶ 擬似圧縮性 (音速抑制法), divergence cleaning など



渦度一流線関数法

- ✓ 2次元の場合のソレノイダル条件 (デカルト座標)

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0$$

- ✓ 以下のような**流線関数 (流れ関数) ψ** を導入する

$$v_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

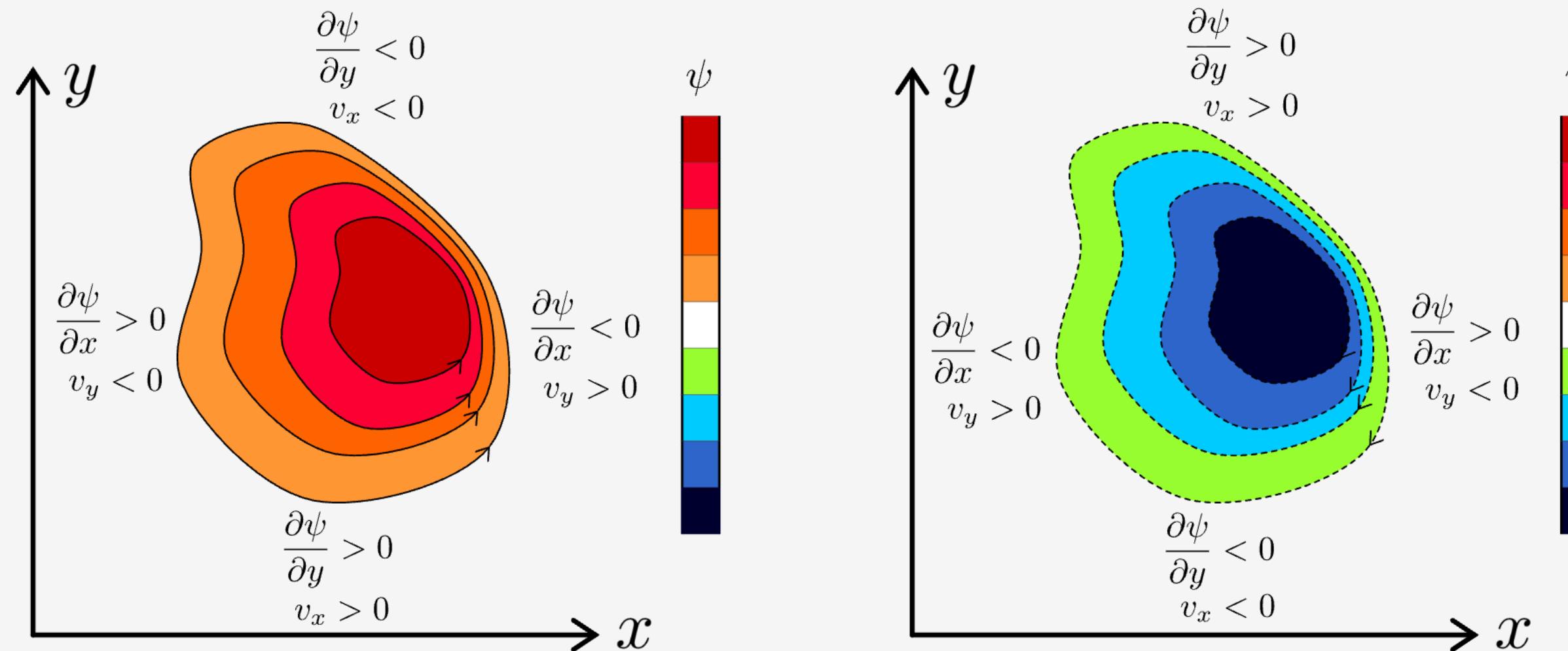
- ▶ ベクトルで書くと $\mathbf{v} = \nabla \times (\psi \hat{\mathbf{e}}_z)$
- ▶ $\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = 0$ (または, ベクトル解析の公式 $\nabla \cdot [\nabla \times (\dots)] = 0$) より, **自動的にソレノイダル条件が満たされる** → ψ の式を使ってシミュレーションすればよい

- ✓ デメリット: **3次元の問題では使用不可**

- ▶ しかし, 他の手法に比べるとシンプルなので, この方法を扱います

流線関数の性質

$$v_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$$



- ✓ ψ の極大値のまわりでは等値線に沿って反時計回りの流れ, 極小値のまわりでは等値線に沿って時計回りの流れ
- ✓ 等値線の間隔が狭いほど, 流速が速い

流体シミュレーションの境界条件

- ✓ **すべりなし条件**: 固体の壁面では流速が 0 になっているだろうと考える境界条件

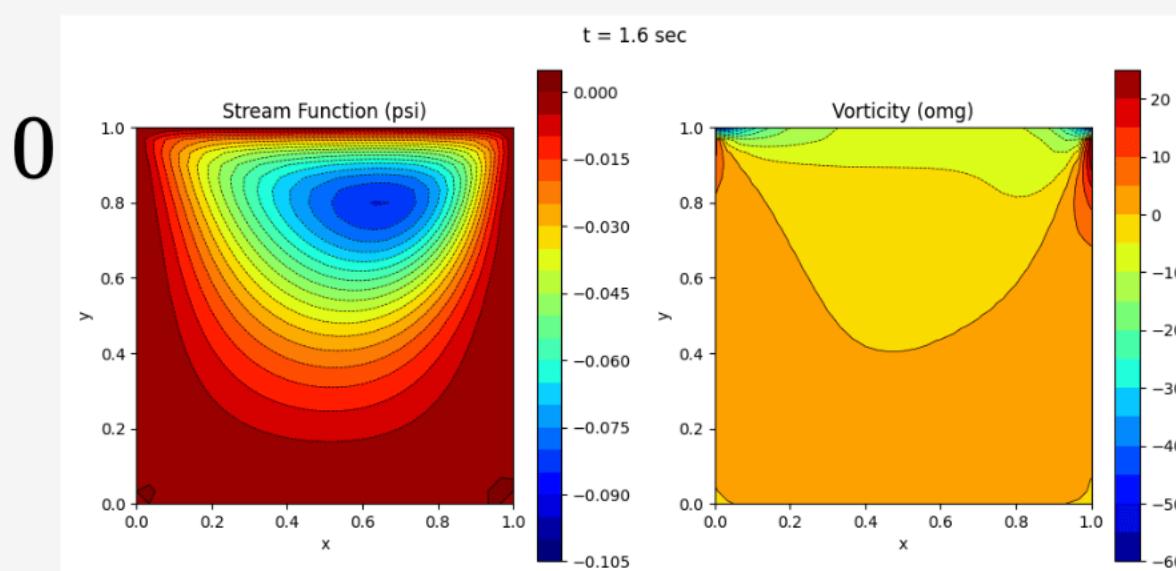
$$v_x = 0, \quad v_y = 0 \quad (x, y = \text{壁がある位置})$$

- ✓ 涡度-流線関数法を使う場合は, v_x, v_y の代わりに流線関数 ψ を使うので, 境界条件を ψ バージョンに変換する必要がある
 - ▶ 例えば, $x = 0, 0 \leq y \leq L$ にある壁では

$$v_x = \frac{\partial \psi}{\partial y} = 0, \quad v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = 0 \quad (x = 0, 0 \leq y \leq L)$$

\therefore その壁上で $\psi = \text{定数}$, $\frac{\partial \psi}{\partial x} = 0$

- ▶ 多くの場合, $\psi = \text{定数}$ は $\psi = 0$ とすれば OK
- ▶ 他の壁も同じように考えると 同様の境界条件が得られる



2次元非圧縮キャビティ流れの場合

渦度を導入する

✓ 速度場 v の回転を**渦度**という: $\omega \equiv \nabla \times v$

► 今のような2次元の場合は, $\omega = (0, 0, \omega)$

$$\omega = \frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y}$$

► ここで渦度をわざわざ導入した理由は, Helmholtz 分解というものが関係しているが, この授業では深入りしない

► 流線関数 ψ を用いて渦度を表すと

$$\omega = \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi$$

► この式は, 第1回で扱った**定常拡散方程式**と同じ形

► ベクトルで書くと

$$\omega = \nabla \times [\nabla \times (\psi \hat{e}_z)] = \nabla (\nabla \cdot (\psi \hat{e}_z)) - \nabla^2 (\psi \hat{e}_z) = (-\nabla^2 \psi) \hat{e}_z$$

渦度の時間発展式

✓ 渦度 ω の時間発展式を求めるため, 運動方程式

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} + \left(v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} \right) v_x = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) v_x \quad (1)$$

$$\frac{\partial v_y}{\partial t} + \left(v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} \right) v_y = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) v_y \quad (2)$$

に対し, $\frac{\partial(2)}{\partial x} - \frac{\partial(1)}{\partial y}$ を計算する

► 積の微分に気をつけながら計算すると

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \left(v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \omega + \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \right) v_y - \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} \frac{\partial}{\partial y} \right) v_x = \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \omega$$

となる (圧力の項は消える). さらに, ソレノイダル条件より

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \left(v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \omega = \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \omega$$

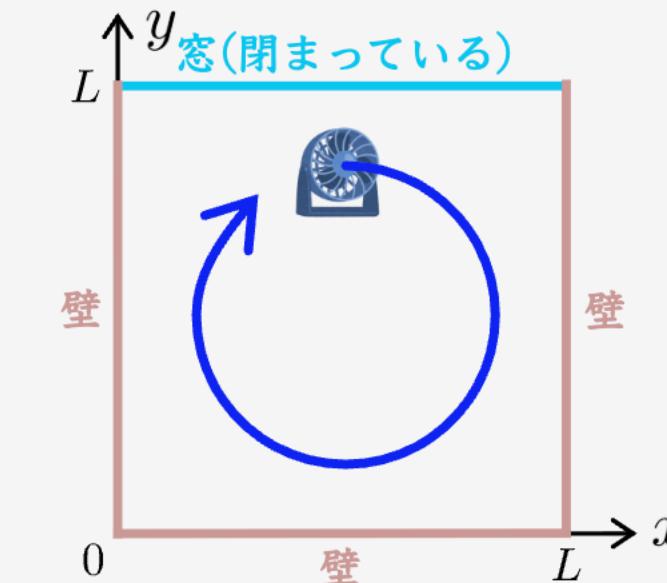
この式は, 第2回で扱った移流拡散方程式

► ベクトルで書くと, $\nabla \times (-\nabla p) = 0$, および

$$\nabla \times [(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}] = \nabla \times [\nabla(u^2/2) - \mathbf{v} \times \boldsymbol{\omega}] = -\nabla \times [\mathbf{v} \times \boldsymbol{\omega}] = (\mathbf{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{\omega} - (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla) \mathbf{v} = (\mathbf{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{\omega}$$

渦度の境界条件

- ✓ 渦度 ω の境界条件は、流線関数 ψ に依存
- ✓ 例えば、再度 $x = 0, 0 \leq y \leq L$ にある壁を考える
 - ▶ ψ の境界条件



$$\psi = \text{定数} (= 0), \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0 \quad (x = 0, 0 \leq y \leq L)$$

- ▶ Neumann 境界条件の方を、格子点 (x_0, y_j) ($j = 0, 1, \dots, N - 1$) 上での差分式 (1階中心差分) で近似すると

$$\frac{\psi_{1,j} - \psi_{-1,j}}{2\Delta x} = 0 \quad \rightarrow \quad \psi_{1,j} = \psi_{-1,j}$$

- ▶ この壁上では $\psi = \text{定数}$ より $\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0$ である。 ω と ψ の関係式 $\omega = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi$ より、格子点 (x_0, y_j) ($j = 0, 1, \dots, N - 1$) 上での差分式 (2階中心差分) は

$$\omega_{0,j} = -\frac{\psi_{1,j} - 2\psi_{0,j} + \psi_{-1,j}}{\Delta x^2} = -2\frac{\psi_{1,j} - \psi_{0,j}}{\Delta x^2}$$

渦度－流線関数法の計算手順

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \left(v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \omega = \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \omega, \quad v_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi = -\omega$$

✓ 現状, $t = t_m$ での値 $\omega^{(m)}, \psi^{(m)}, v_x^{(m)}, v_y^{(m)}$ が求まっているとする

1. $\omega^{(m)}, v_x^{(m)}, v_y^{(m)}$ を使い, 渦度の移流拡散方程式から (境界上の格子点以外の) $\omega^{(m+1)}$ を計算する

```
omg.value += (-omg.advection(psi) + NU * omg.laplacian()) * DT
```

2. $\omega^{(m+1)}$ と ψ の Dirichlet 境界条件から, 流線関数の Poisson 方程式を使い, $\psi^{(m+1)}$ を計算する

```
1 self.value[0, :] = 0 # 左端
2 self.value[-1, :] = 0 # 右端
3 self.value[:, 0] = 0 # 下端
4 self.value[:, -1] = 0 # 上端
```

```
psi.poisson_solver(-omg.value, OMEGA_SOR, TOL, MAX_ITER)
```

渦度－流線関数法の計算手順

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \left(v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \omega = \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \omega, \quad v_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi = -\omega$$

3. $\psi^{(m+1)}$ と ω の境界条件から, 境界上の $\omega^{(m+1)}$ を計算する

```
1 self.value[0, :] = -2 * (psi.value[1, :]-psi.value[0, :]) / (dx**2)      # 左端
2 self.value[-1, :] = -2 * (psi.value[-2, :]-psi.value[-1, :]) / (dx**2)    # 右端
3 self.value[:, 0] = -2 * (psi.value[:, 1]-psi.value[:, 0]) / (dy**2)      # 下端
4 self.value[:, -1] = -2 * (psi.value[:, -2]-psi.value[:, -1]) / (dy**2)    # 上端
```

4. $\psi^{(m+1)}$ から $v_x^{(m)}, v_y^{(m)}$ を計算する

```
1 vx = (psi.value[ix, iy+1] - psi.value[ix, iy-1]) / (2 * dy)
2 vy = - (psi.value[ix+1, iy] - psi.value[ix-1, iy]) / (2 * dx)
```

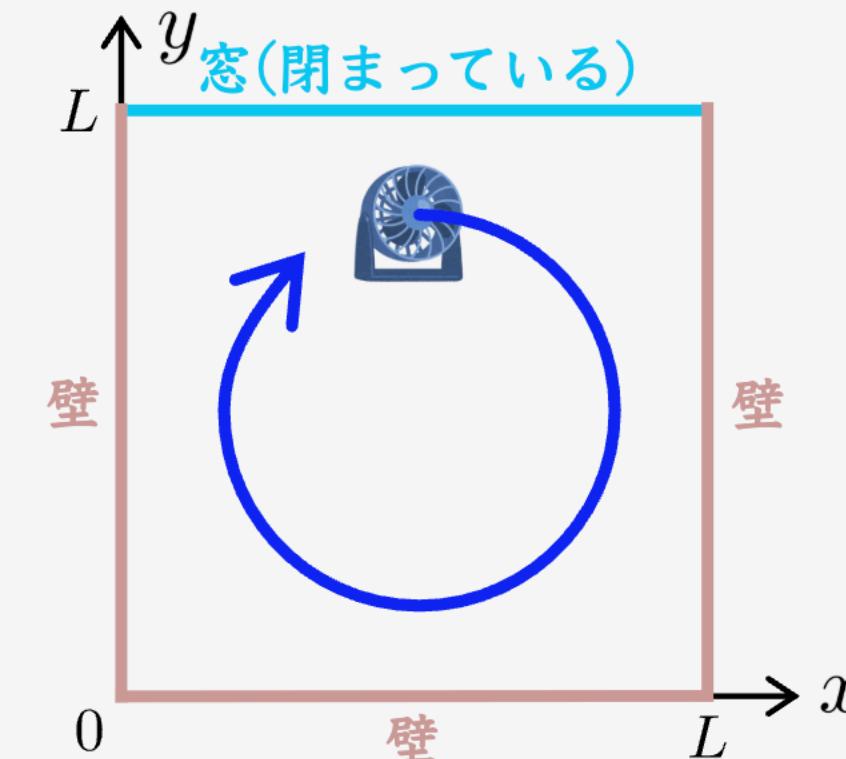
5. 必要があれば, スライドp.11の $\frac{\partial(1)}{\partial x} + \frac{\partial(2)}{\partial y}$ で得られる圧力の Poisson 方程式を使って, $\psi^{(m+1)}$ から $p^{(m+1)}$ を計算する

[例題1] 涡の減衰

$t = 0$ にサーフィンターナーの電源オフ

$$v_x = \frac{\partial \psi}{\partial y} = -v_0 \sin^2 \left(\frac{\pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{2\pi y}{L} \right)$$

$$v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = v_0 \sin \left(\frac{2\pi x}{L} \right) \sin^2 \left(\frac{\pi y}{L} \right)$$

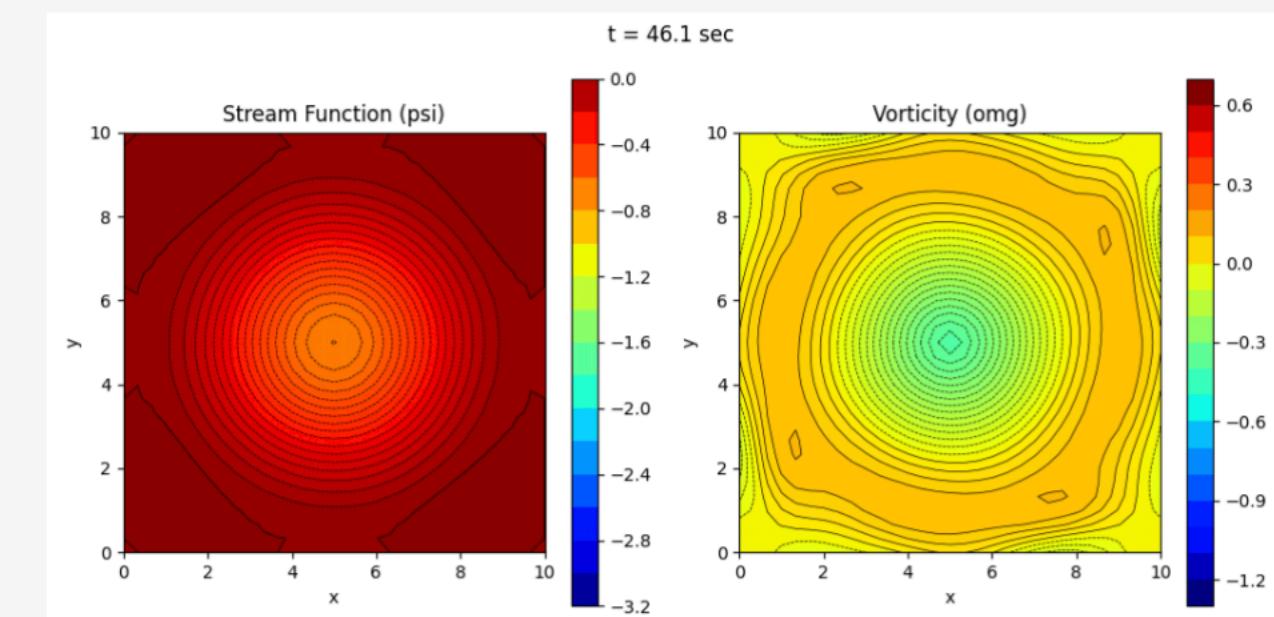


✓ $t = 0$ の流れ場 (v_x, v_y) を流線関数 ψ と渦度 ω に変換すると

$$\psi = -\frac{v_0 L}{\pi} \sin^2 \left(\frac{\pi x}{L} \right) \sin^2 \left(\frac{\pi y}{L} \right)$$

$$\omega = \frac{2\pi v_0}{L} \left[\cos \left(\frac{2\pi x}{L} \right) \sin^2 \left(\frac{\pi y}{L} \right) + \sin^2 \left(\frac{\pi x}{L} \right) \cos \left(\frac{2\pi y}{L} \right) \right]$$

✓ [macro_3rd_decay.ipynb](#)
では、 ψ と ω の初期条件が
上記に設定されています
▶ 実行してみてください



演習 [例題2] キャビティ流れ

- ✓ 実は, `macro_3rd_decay.ipynb` の ω の境界条件

```

1 self.value[0, :] = -2 * (psi.value[1, :]-psi.value[0, :]) / (dx**2)    # 左端
2 self.value[-1, :] = -2 * (psi.value[-2, :]-psi.value[-1, :]) / (dx**2)  # 右端
3 self.value[:, 0] = -2 * (psi.value[:, 1]-psi.value[:, 0]) / (dy**2)    # 下端
4 self.value[:, -1] = -2 * (psi.value[:, -2]-psi.value[:, -1]) / (dy**2)  # 上端

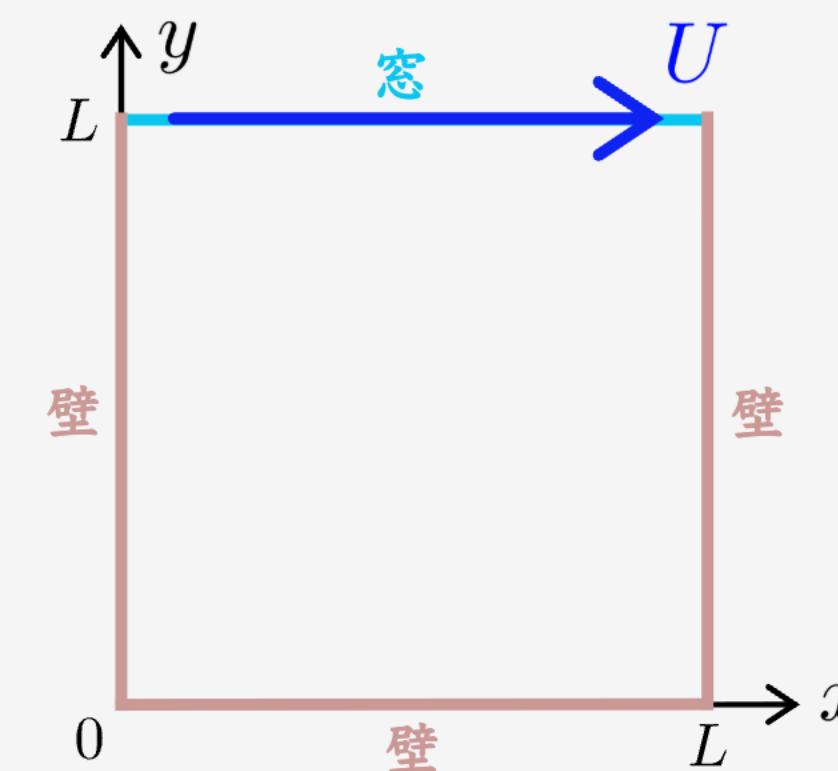
```

をほんの少し変更すると, 第0回で扱った2次元非圧縮キャビティ流れのプログラムコードへと書き換えることができます

- ✓ どのように変更すれば良いか考えて, 実装してみてください

► $0 \leq x \leq L, y = L$ での 境界条件

$$v_x = \frac{\partial \psi}{\partial y} = U, \quad v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = 0$$



無次元化・無次元数

- ✓ シミュレーションでは、よく**無次元化**というものを行う
 - ▶ v_x は（もちろん）速度の次元 $[LT^{-1}]$ をもつ（単位: m/s）
 - ▶ パラメータの中で速度の次元をもつもの（キャビティ流れなら U ）で v_x を割ると無次元になる: $v_{x*} = v_x/U$
- ✓ 2次元非圧縮キャビティ流れの場合、Navier-Stokes 方程式を無次元化すると

$$\nabla_* \cdot \mathbf{v}_* = 0, \quad \frac{D\mathbf{v}_*}{Dt_*} = -\nabla_* p_* + \frac{1}{Re} \nabla_*^2 \mathbf{v}_*$$

ここで、 $\nabla_* = L\nabla$, $t_* = t/(L/U)$, $\mathbf{v}_* = \mathbf{v}/U$, $p_* = p/\rho U^2$

- ▶ **Reynolds 数** $Re = UL/\nu$ が唯一のパラメータ（無次元数）
- ▶ ν が一定のとき、 $U = 1 \text{ m/s}$, $L = 1 \text{ m}$ のシミュレーションや実験を行えば、 $U = 0.1 \text{ m/s}$, $L = 10 \text{ m}$ の結果もわかる
(相似則という)

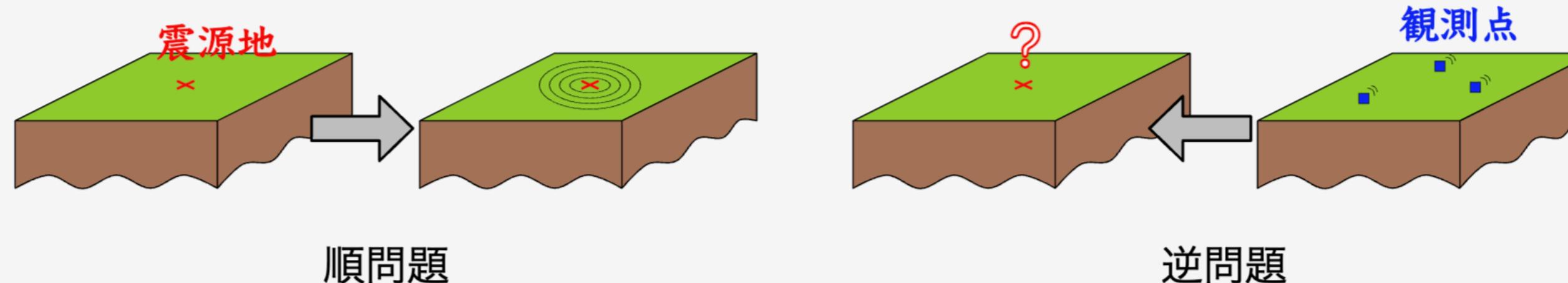
シミュレーションを高速化するために

- ✓ 問題によっては計算コストが大きくなっている、シミュレーションの実行時間がかかりすぎることがある
- ✓ **ボトルネックを特定して、対処することが重要**
 - ▶ 計算手法、アルゴリズムの変更
 - ▶ Cなどのコンパイラ言語に書き換える（または、Cython の使用）
 - ▶ シミュレーション結果の可視化部分を見直す
 - ▶ 実は配布したプログラムコードでは、アニメーション生成に実行時間の大半が費やされています
 - ▶ NumPy を使って for 文をベクトル化する
 - ▶ NumPy の内部は C で書かれている
 - ▶ 行列演算ライブラリで最適化されている & 自動でスレッド並列
 - ▶ プロセス並列 (multiprocessing, mpi4py など)
 - ▶ (今のところ?) GIL (Global Interpreter Lock) により Python では OpenMP のようなスレッド並列はできない。並行処理
 - ▶ Numba の使用 (JIT (just-in-time) コンパイラ)
 - ▶ などなど



順問題と逆問題

- ✓ これまでのシミュレーションでは、初期条件が与えられていて、そこからの時間発展をシミュレートしていた（順問題という）
- ✓ しかし、実社会の問題では、全ての位置での初期値（初期分布）がわかっていない場合も多い
 - ▶ 特に、少数の測定（観測）データから、初期条件やパラメータなどを推定したいことがある（逆問題という）
 - ▶ 測定にはノイズが含まれるので、そのノイズの2乗ノルムが最小になるものを探す（最小二乗法）



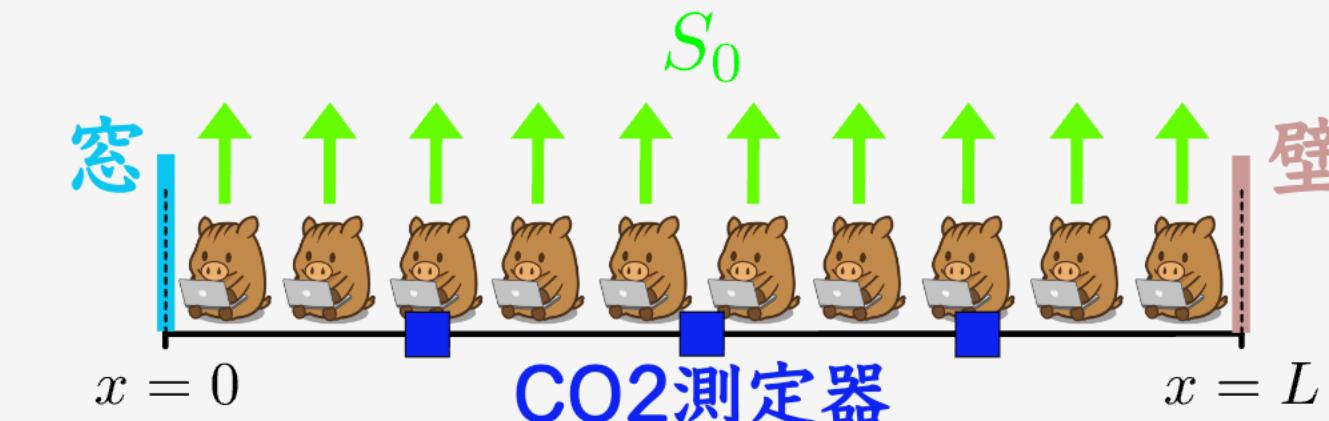
データ同化



- ✓ 逆問題と同様の技術として, **データ同化**がある
- ✓ 天気予報のように, 物理法則をシミュレーションして, 未来の状態を予測したいとする
 - ▶ しかし, 全ての位置での初期値(初期分布)はわからない
 - ▶ そこで, **測定(観測)データと現象を支配している物理法則を使って, もっともらしい初期分布を推定**する
 - ▶ 例えば, アジoint法の場合
$$J = (\text{測定によるノイズの二乗ノルム}) + \lambda(\text{物理法則})$$
みたいな感じの目的関数を最小化する (λ : Lagrange の未定乗数)
 - ▶ **推定された初期分布を初期条件としてシミュレーションを実行し, 未来の状態を予測**する

1次元非定常拡散方程式を例に

$t = 0$ に窓を開けたときの
 CO_2 濃度の時間変化を調べたいが
初期分布がわからない.
 $t = 0$ から t_K まで測定を行い,
 $t > t_K$ の CO_2 濃度を予測する



- ✓ $t = t_k$ での N 次元未知ベクトル: $\mathbf{x}^{(k)} = [c_0^{(k)}, c_1^{(k)}, \dots, c_{N-1}^{(k)}]^T$
- ✓ $t = t_k$ での測定データを $\mathbf{d}^{(k)}$ とする ($k = 0, 1, \dots, K$). $\mathbf{x}^{(k)}$ から $\mathbf{d}^{(k)}$ に対応するものを選び出す行列を H と書くと

$$\mathbf{d}^{(k)} = \mathsf{H}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{e}^{(k)}$$

ここで, $\mathbf{e}^{(k)}$ は $t = t_k$ での測定ノイズ

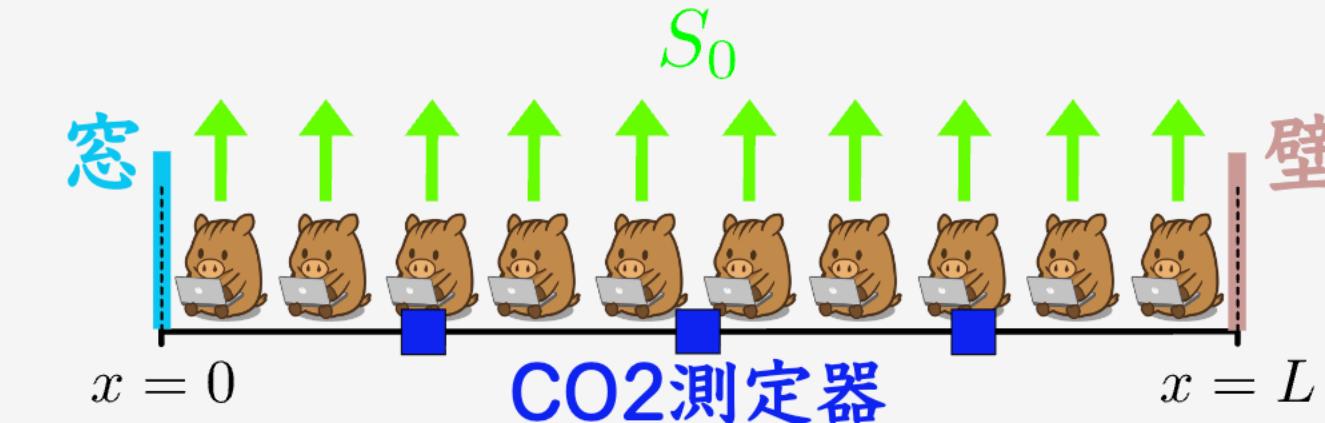
► 例えば, 格子点数 $N = 5$ で, CO_2 測定器が $x = x_1, x_2, x_3$ にあるとすると

$$\begin{pmatrix} d_1^{(k)} \\ d_2^{(k)} \\ d_3^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0^{(k)} \\ c_1^{(k)} \\ c_2^{(k)} \\ c_3^{(k)} \\ c_4^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1^{(k)} \\ e_2^{(k)} \\ e_3^{(k)} \end{pmatrix}$$

1次元非定常拡散方程式を例に

$t = 0$ に窓を開けたときの
CO₂ 濃度の時間変化を調べたいが
初期分布がわからない。

$t = 0$ から t_K まで測定を行い,
 $t > t_K$ の CO₂ 濃度を予測する



- ✓ よって, 目的関数は

$$J(\mathbf{x}^{(0)}) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^K \|\mathbf{d}^{(k)} - \mathbf{Hx}^{(k)}\|_2 + \int_0^{t_K} dt \int_0^L dx \lambda(x, t) \left(\frac{\partial c}{\partial t} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - S_0 \right)$$

- ▶ 実際に使われるアジョイント法では, どの測定データを重視するかの重み (分散共分散行列) を考慮するのに加え, Tikhonov の正則化 (リッジ回帰) に近い項を目的関数に足すことが多いが, ここでは省略
- ✓ この目的関数を最小化する $\mathbf{x}^{(0)}$ を求めれば, 観測データをよく説明する初期分布が得られることになる
- ▶ 最小化する $\mathbf{x}^{(0)}$ を求めるために最急降下法などを用いるとすると, $\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}^{(0)}}$ の計算が必要

1次元非定常拡散方程式を例に

- ✓ アジョイント法では $\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}^{(0)}}$ を求めるために、以下の手続きをする

1. $\mathbf{x}^{(0)}$ の推定値を使って $t = 0$ から t_K まで非定常拡散方程式

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + S_0 \text{ のシミュレーションを行い, } \mathbf{x}^{(k)} \ (k = 0, 1, \dots, K) \text{ を求めておく}$$

2. $\lambda(x, t_K) = 0$ を初期条件として $t = t_K$ から 0 まで（時間を逆向きに）非定常拡散方程式の随伴方程式

$$-\frac{\partial \lambda(x_i, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2} \Big|_{x=x_i, t} + \sum_{k=0}^K [{}^t \mathbf{H}(\mathbf{d}^{(k)} - \mathbf{H}\mathbf{x}^{(k)})]_i \delta(t - t_k)$$

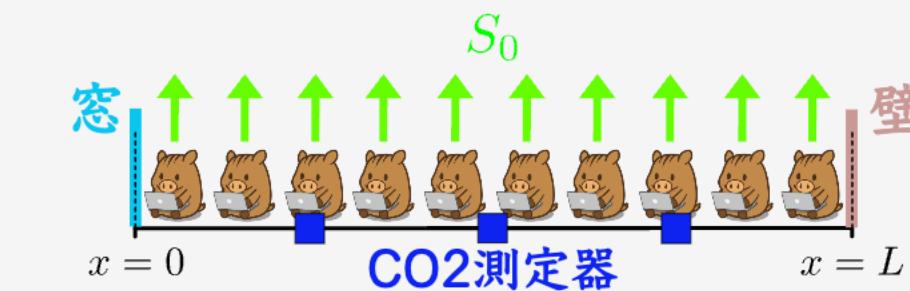
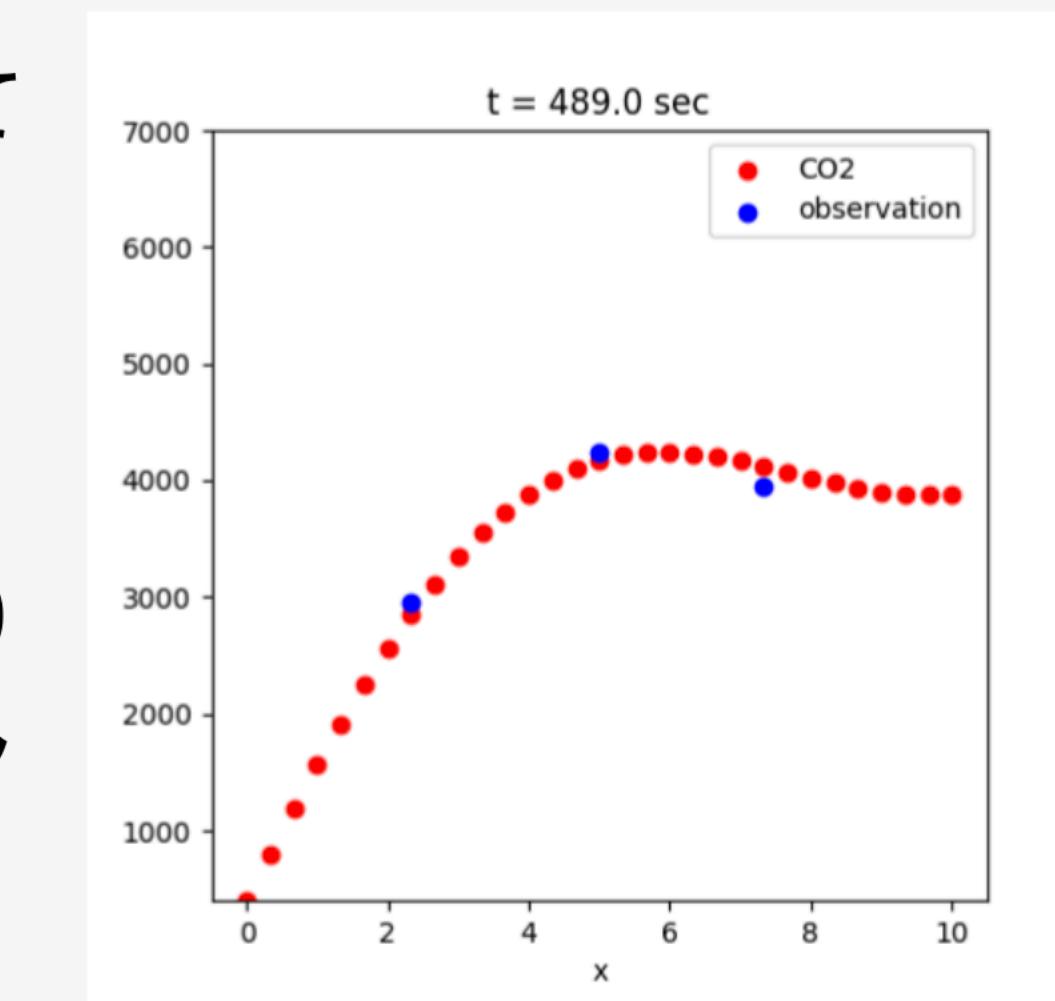
のシミュレーションを行う（測定データとの差を生成項として、
 $t = 0$ まで伝播させるイメージ；ニューラルネットワークの誤差逆
 伝播法と似ている）

3. 変分 $\delta J = J(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) - J(\mathbf{x})$ を計算すると確認できるが、上記の操作により $\frac{\partial J}{\partial c} \Big|_{x=x_i, t=0} = -\lambda(x_i, 0)$ となっている

[例題3] 1次元拡散方程式のデータ同化

- ✓ まず, データ同化の準備
- ✓ macro_3rd_adjoint.ipynb の最初の「セル」(Step 0) を実行してください
 - ▶ 正しい初期 CO_2 濃度分布:
 $c(x, 0) = 5000 \sin(\pi x / L) + 400$
(これをデータ同化で求めたい)
 - ▶ 正しい初期分布を初期条件として拡散方程式のシミュレーションを実行し, 測定ノイズの代わりに乱数を加えて, **擬似的に測定データ (青点) を生成**しています

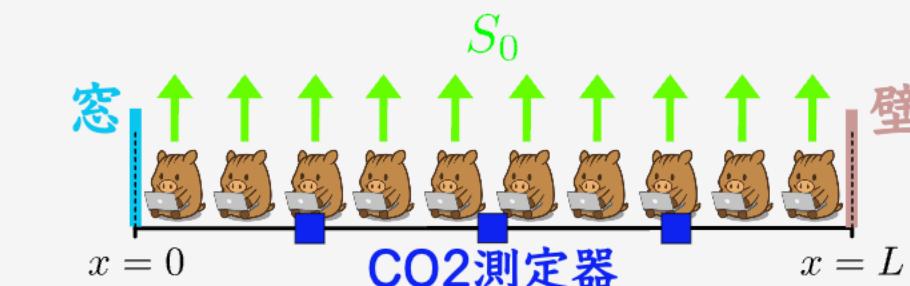
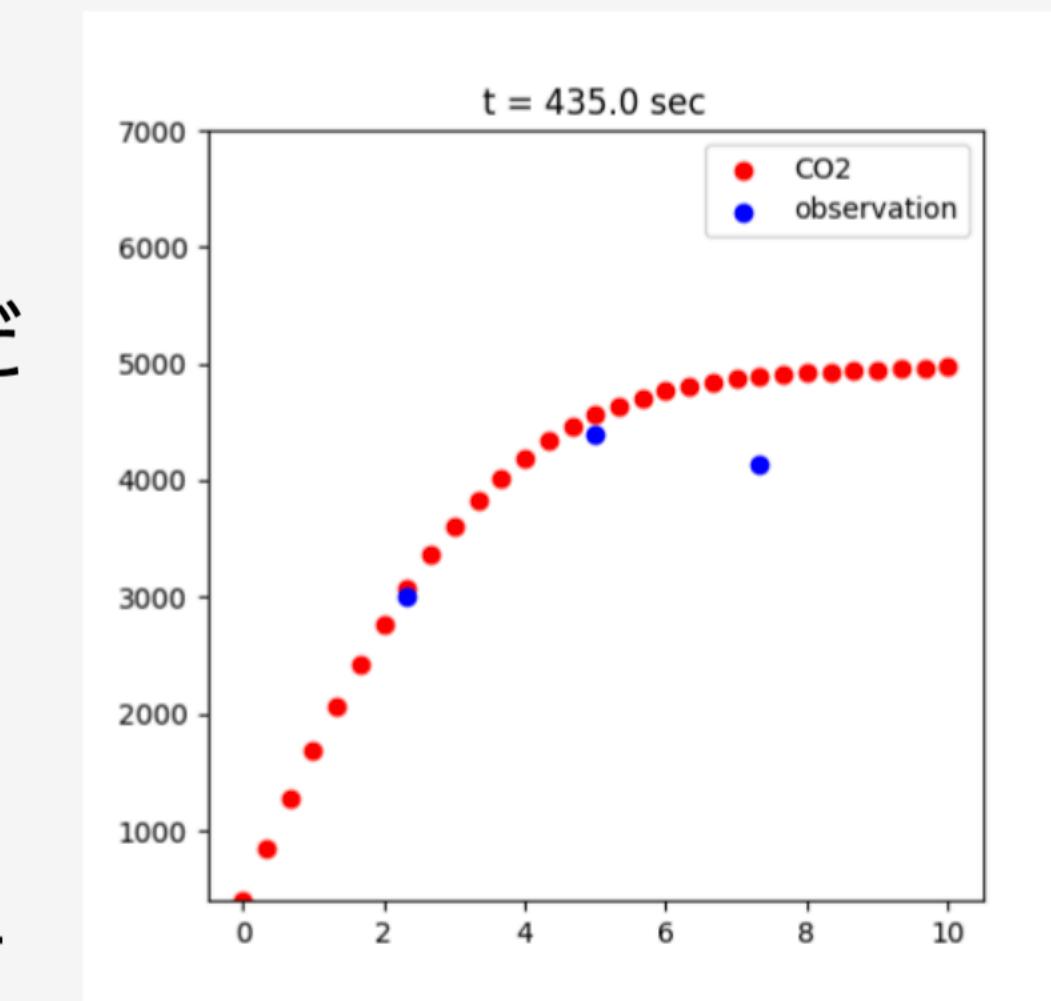
Step 0



[例題3] 1次元拡散方程式のデータ同化

- ✓ ここからがデータ同化
 - ▶ いま手元にあるのは, Step 0で生成した測定データ (青点) だけ
 - ✓ Step 1 の「セル」を実行してください
 - ▶ てきとうな初期分布 $c(x, 0) = 4500$ を仮定して, 拡散方程式のシミュレーションを実行しています
 - ▶ この段階で, シミュレーション結果と測定データの差を計算しておきます

Step 1



[例題3] 1次元拡散方程式のデータ同化

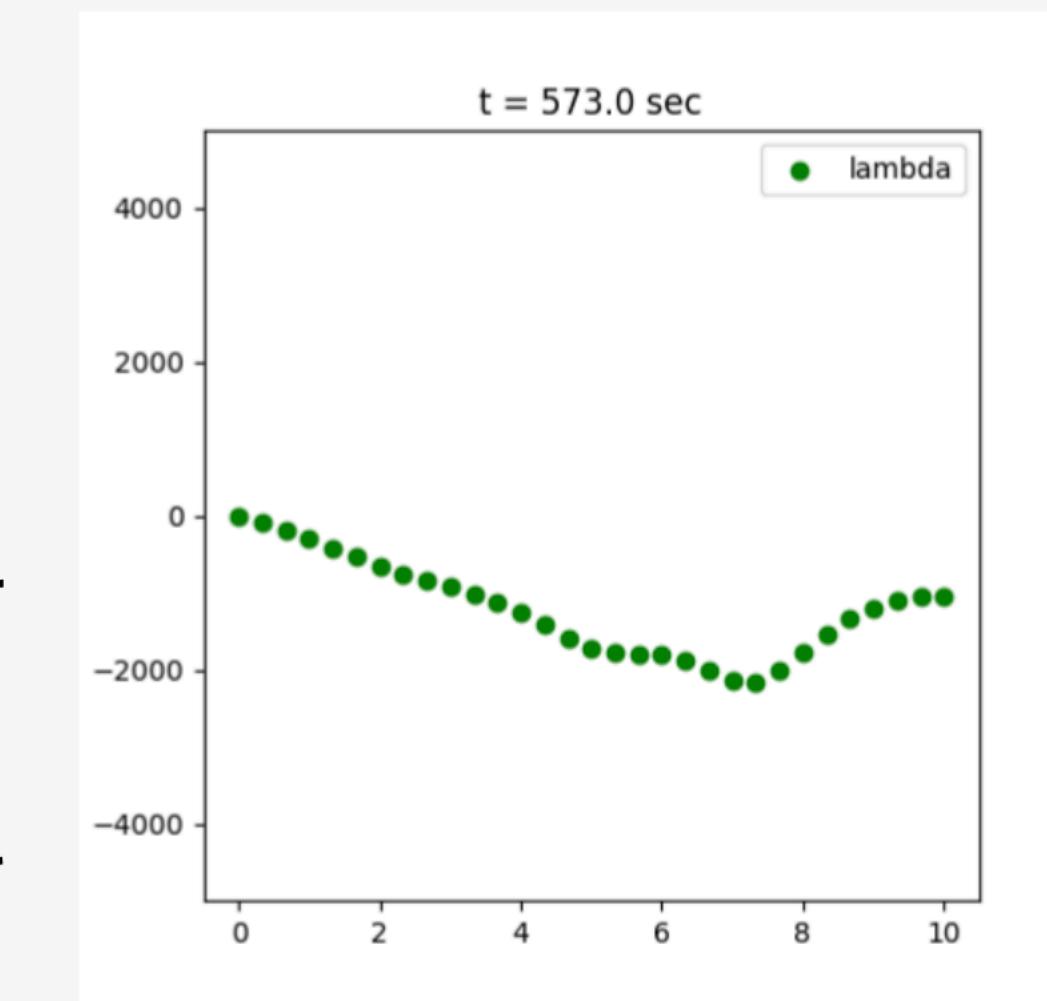
Step 2 の「セル」を実行してください

Step 2

- ▶ 初期条件を $\lambda(x, t_K) = 0$, 境界条件を $\lambda(0, t) = \frac{\partial \lambda}{\partial x} \Big|_{x=L, t} = 0$

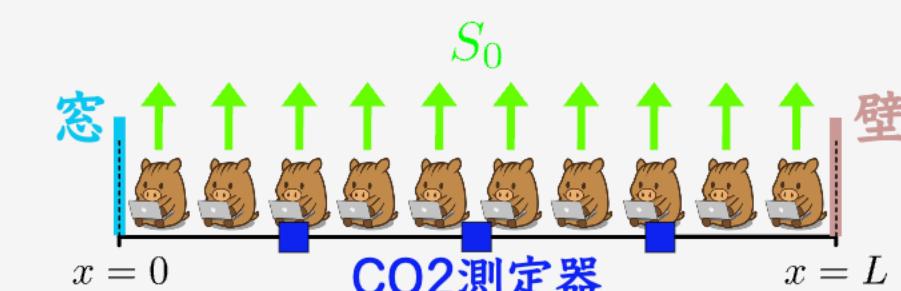
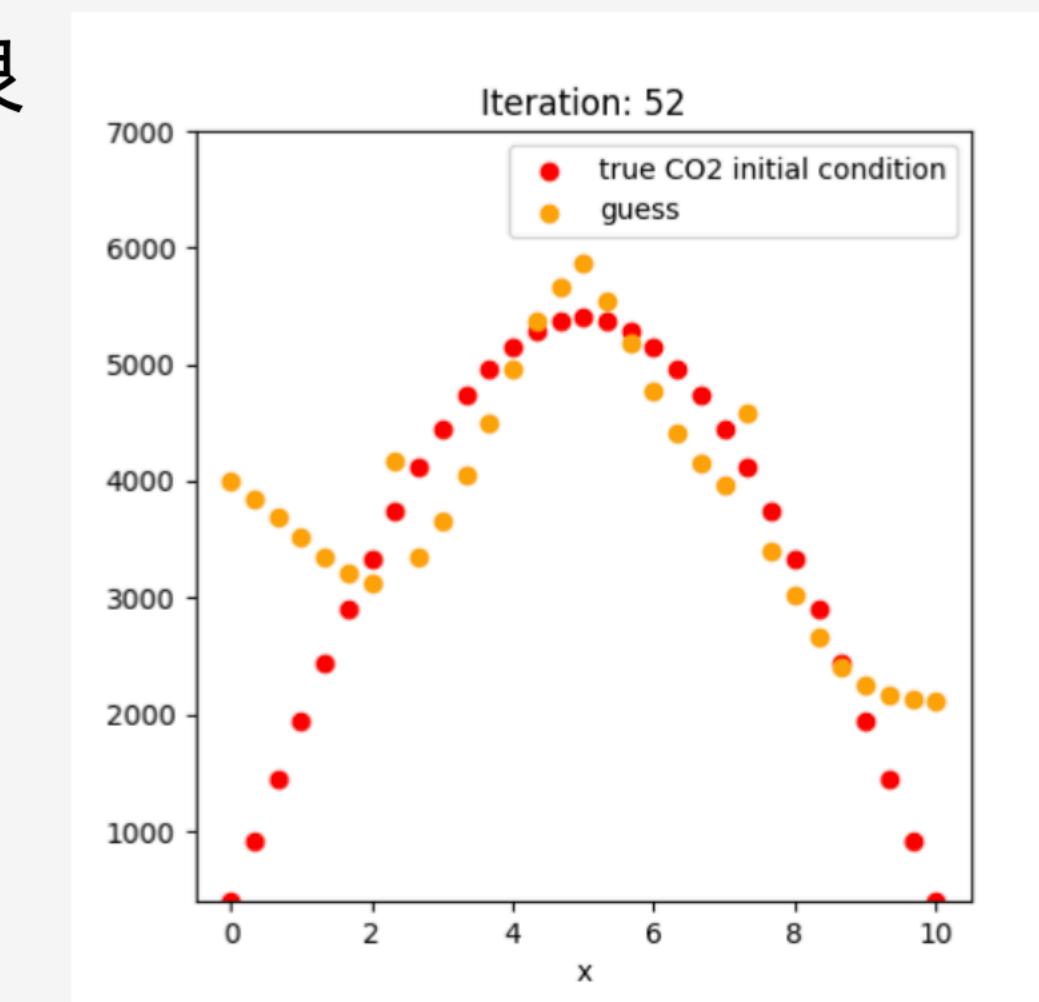
として, 時間を逆向きに拡散方程式の随伴方程式をシミュレーションしています

- ▶ 測定器のある位置と測定されたタイミングに, Step 1 で計算された測定データとの差が生成項として注入され, それを周囲と過去に伝播させます



[例題3] 1次元拡散方程式のデータ同化

- ✓ Step 2 が完了すると $\frac{\partial J}{\partial \mathbf{x}^{(0)}}$ が計算できるので、最急降下法でより良い初期分布の推定値を計算します
- ✓ 最後の「セル」を実行してください
 - ▶ Step 1 と 2 を何度も反復すると、どんどん良い推定値に近づいていきます
 - ▶ 測定器が設置されていない端の方を除いて、おおむね正しい初期分布が推定できました
- ✓ 正しい初期濃度分布や測定点の位置、ノイズの大きさなどを変えて、いろいろ試してみてください



課題について

- ✓ マクロ系シミュレーション(総合演習2の33/100点)の課題は**加点方式**で採点します(上限33点)
- ✓ マクロ系シミュレーションの各回ごとに**小課題**(1問あたり配点5-10点前後)とマクロ系シミュレーションの最終回に**最終課題**(1問あたり配点5-30点前後)を出します
 - ▶ 自分ができそうな課題を選択し,他の授業の忙しさを考慮して戦略的に提出してもらって構いません
 - ▶ 小課題を提出しておくと,最終課題の提出が楽になります
 - ▶ 小課題を提出せずに,最終課題だけ提出するのもアリです
 - ▶ 好成績を狙っている人はたくさん課題を出してもらって構いません(ただし33点が上限)
- ✓ マクロ系シミュレーションの課題提出に,生成AIを活用しても構いませんが,内容を吟味してから提出してください
 - ▶ どの生成AIモデルをどのように使ったか明記すること

第3回小課題

- ✓ [問3-1] 例題2のキャビティ流れにおける ω の境界条件を完成させ, そのような条件になる理由を説明してください. また, 第0回小課題[問0-1]を未提出の人は, これまでの演習で学んだことを踏まえ, [問0-1]に取り組んでください. 第0回小課題[問0-1]を提出済みの人は, これまでの演習で学んだことを踏まえ, 以前提出したレポートでの議論に不十分・不適切だった点があれば, それについて述べた短めのレポートを作成してください (配点5点)
- ✓ [問3-2] 例題3で正しい初期濃度分布や測定点の位置, ノイズの大きさなどを変更した結果を提出してください (配点3点)
- ✓ *LATEX* や Microsoft Word などで作成し, pdf 形式で BEEF+から提出すること
 - ▶ どの課題か分かるように問題番号をつけてください
- ✓ 第3回小課題の提出〆切: 2025/11/11 23:59

連絡事項

- ✓ 工学部情報知能工学科進路ガイダンス
 - ▶ 11/21 (金) 必ず出席
 - ▶ 詳細は BEEF+ にアップロードしたお知らせ pdf を参照してください
- ✓ 来週 (11/5) の総合演習2は、主にマクロ系シミュレーションの最終課題を取り組む時間にあてます
 - ▶ 最終課題の内容は、11/5 までに BEEF+ に「マクロ系シミュレーション第4回資料」としてアップロードします
 - ▶ 11/5 の授業開始直後に最終課題の説明を行います
 - ▶ この日は出席をとりません
 - ▶ わからないところがあれば、ぜひ質問してください
- ✓ 再来週 (11/12) からは社会系シミュレーション（担当：バレ先生）が始まります

Helmholtz 分解

- ✓ 任意の3次元ベクトル場 \mathbf{V} は, 保存場 $-\nabla\phi$ とソレノイダル場 $\nabla\times\mathbf{A}$ に分解できる

$$\mathbf{V} = -\nabla\phi + \nabla\times\mathbf{A}$$

- ▶ 非圧縮流体の速度場 \mathbf{v} は, 保存場の成分が常に $\mathbf{0}$ になっているベクトル場
- ▶ 流れが2次元的なら, $\mathbf{v} = (v_x, v_y, 0) = \nabla\times(\psi\hat{\mathbf{e}}_z)$
- ✓ (非圧縮) Navier-Stokes 方程式もベクトルの方程式なので, もちろん Helmholtz 分解できる

$$\cancel{\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \right)}_{\text{保存場成分}} + \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \right)_{\text{ソレノイダル場成分}} = \left(-(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v} - \frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{v} + \mathbf{F} \right)_{\text{保存場成分}} + \left(-(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v} - \frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{v} + \mathbf{F} \right)_{\text{ソレノイダル場成分}}$$

- ▶ 両辺の発散をとると $\nabla\cdot[\nabla\times(\cdots)] = 0$ より, 保存場成分からの寄与だけが残る
- ▶ 両辺の回転をとると $\nabla\times[\nabla(\cdots)] = 0$ より, ソレノイダル場成分からの寄与だけが残る

トロイダル-ポロイダル分解

- ✓ 任意のソレノイダル場 \mathbf{v} は、トロイダル場 \mathbf{v}_T とポロイダル場 \mathbf{v}_P に分解できる

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_T + \mathbf{v}_P$$

ここで、 $\mathbf{v}_T = \nabla \times (Tr)$, $\mathbf{v}_P = \nabla \times [\nabla \times (Pr)]$,
 $\mathbf{r} = (x, y, z) = r\hat{\mathbf{e}}_r$

► 2次元の問題の場合、 \mathbf{v} のゼロでない2つの成分 (v_x, v_y) が
1つのスカラー場 ψ (流線関数) を用いて表せたのと同様
に、3次元の問題の場合は (v_x, v_y, v_z) を2つのスカラー場
 T, P を用いて表せる

- ✓ 計算領域が球形など単純な形状でなければ扱いづらい

MAC 法

- ✓ 以下, $\mathbf{v}^{(m)} \equiv \mathbf{v}(x, y, t_m)$ など
- ✓ 現状, $\mathbf{v}^{(m)}$ と $\mathbf{F}^{(m)}$ が求まっているとする. Euler 法より

$$\frac{\mathbf{v}^{(m+1)} - \mathbf{v}^{(m)}}{\Delta t} + (\mathbf{v}^{(m)} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{(m)} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^{(m)} + \nu \nabla^2 \mathbf{v}^{(m)} + \mathbf{F}^{(m)}$$

- ✓ この式の発散をとって, $\nabla \cdot \mathbf{v}^{(m+1)} = 0$ より

$$\nabla^2 p^{(m)} = \rho \nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{v}^{(m)}}{\Delta t} - (\mathbf{v}^{(m)} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{(m)} + \nu \nabla^2 \mathbf{v}^{(m)} + \mathbf{F}^{(m)} \right]$$

- ▶ まず, この Poisson 方程式を解いて, $p^{(m)}$ を求める. その後, 元の式から $\mathbf{v}^{(m+1)}$ を計算する
- ▶ 誤差が生じている可能性を考慮し, $\nabla \cdot \mathbf{v}^{(m)} = 0$ は仮定しないまま計算する
- ✓ 変数ごとに格子点の位置をずらすスタッガード格子がよく用いられる

フラクショナルステップ法 (射影法)

- ✓ 現状, $\mathbf{v}^{(m)}$ と $\mathbf{F}^{(m)}$ が求まっているとする. Euler 法より

$$\frac{\mathbf{v}^{(m+1)} - \mathbf{v}^{(m)}}{\Delta t} + (\mathbf{v}^{(m)} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{(m)} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^{(m)} + \nu \nabla^2 \mathbf{v}^{(m)} + \mathbf{F}^{(m)}$$

- ✓ この式を2つに分ける ($\nabla \cdot \mathbf{v}^{(m+1)} = 0$, $\nabla \cdot \mathbf{v}^{(*)} \neq 0$)

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{v}^{(*)} - \mathbf{v}^{(m)}}{\Delta t} + (\mathbf{v}^{(m)} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{(m)} = \nu \nabla^2 \mathbf{v}^{(m)} + \mathbf{F}^{(m)} \\ \frac{\mathbf{v}^{(m+1)} - \mathbf{v}^{(*)}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^{(m)} \quad \xrightarrow{\text{発散}} \quad \nabla^2 p^{(m)} = \rho \nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{v}^{(*)}}{\Delta t} \right] \end{cases}$$

► まず, 上の式から予測子 $\mathbf{v}^{(*)}$ を求める. 次に, Poisson 方程式を解いて, $p^{(m)}$ を求める. 最後に, 下の式から $\mathbf{v}^{(m+1)}$ を計算する

- ✓ $\mathbf{v}^{(*)} = \mathbf{v}^{(m+1)} + (\Delta t / \rho) \nabla p^{(m)}$ という関係式は, $\mathbf{v}^{(*)}$ の Helmholtz 分解に対応 (圧力の項で $\mathbf{v}^{(*)}$ の発散を除去)

SMAC 法

- ✓ 現状, $\mathbf{v}^{(m)}$ と $\mathbf{F}^{(m)}$ が求まっているとする. Euler 法より

$$\frac{\mathbf{v}^{(m+1)} - \mathbf{v}^{(m)}}{\Delta t} + (\mathbf{v}^{(m)} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{(m)} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^{(m)} + \nu \nabla^2 \mathbf{v}^{(m)} + \mathbf{F}^{(m)}$$

- ✓ この式を2つに分ける ($\nabla \cdot \mathbf{v}^{(m+1)} = 0$, $\nabla \cdot \mathbf{v}^{(*)} \neq 0$)

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{v}^{(*)} - \mathbf{v}^{(m)}}{\Delta t} + (\mathbf{v}^{(m)} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{(m)} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^{(m-1)} + \nu \nabla^2 \mathbf{v}^{(m)} + \mathbf{F}^{(m)} \\ \frac{\mathbf{v}^{(m+1)} - \mathbf{v}^{(*)}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla \delta p^{(m)} \quad \xrightarrow{\text{発散}} \quad \nabla^2 \delta p^{(m)} = \rho \nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{v}^{(*)}}{\Delta t} \right] \end{cases}$$

ここで, $\delta p^{(m)} \equiv p^{(m)} - p^{(m-1)}$

► まず, 上の式から予測子 $\mathbf{v}^{(*)}$ を求める. 次に, Poisson 方程式を解いて, $\delta p^{(m)}$ を求める. 最後に, 下の式から $\mathbf{v}^{(m+1)}$ を計算する

HSMAC 法 (SOLA 法)

- ✓ 現状, $\mathbf{v}^{(m)}$ と $\mathbf{F}^{(m)}$ が求まっているとする. Euler 法より

$$\frac{\mathbf{v}^{(m+1)} - \mathbf{v}^{(m)}}{\Delta t} + (\mathbf{v}^{(m)} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{(m)} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^{(m)} + \nu \nabla^2 \mathbf{v}^{(m)} + \mathbf{F}^{(m)}$$

- ✓ この式を以下のように分割する ($p^{(m)[0]} = p^{(m-1)}$)

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{v}^{(m+1)[0]} - \mathbf{v}^{(m)}}{\Delta t} + (\mathbf{v}^{(m)} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{(m)} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^{(m-1)} + \nu \nabla^2 \mathbf{v}^{(m)} + \mathbf{F}^{(m)} \\ \frac{\mathbf{v}^{(m+1)[k+1]} - \mathbf{v}^{(m+1)[k]}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla (p^{(m)[k+1]} - p^{(m)[k]}) \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \end{cases}$$

- $k = 0, 1, 2, \dots$ に対し, $\nabla \cdot \mathbf{v}^{(m+1)[k+1]} = 0$ を満たすような $p^{(m)[k+1]}$ を求める操作を反復する (Newton 法)

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{v}^{(m+1)[k+1]} = \nabla \cdot \mathbf{v}^{(m+1)[k]} + \frac{\partial \nabla \cdot \mathbf{v}^{(m+1)[k]}}{\partial p^{(m)[k]}} (p^{(m)[k+1]} - p^{(m)[k]})$$

$k \geq 1$ の場合, 最右辺第1項の $\nabla \cdot \mathbf{v}^{(m+1)[k]}$ の計算には, 以下の Taylor 展開を用いる

$$\mathbf{v}^{(m+1)[k]} = \mathbf{v}^{(m+1)[k-1]} + \frac{\partial \mathbf{v}^{(m+1)[k-1]}}{\partial p^{(m)[k-1]}} (p^{(m)[k]} - p^{(m)[k-1]})$$

$(\partial \nabla \cdot \mathbf{v} / \partial p)$ と $(\partial \mathbf{v} / \partial p)$ は空間方向にも差分をとった式から求まる (定数)

擬似圧縮性, divergence cleaning

- ✓ 擬似圧縮性法 (音速抑制法): (非圧縮) Navier-Stokes 方程式

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}$$

の代わりに, 以下のような方程式を解く

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}$$

- ▶ 第1式は質量保存則と似た式になっており, $\tilde{\rho} \equiv p/\tilde{c}_s^2$ は密度もどき, \tilde{c}_s は擬似的な音速である. \tilde{c}_s の大きさは CFL 条件を考慮して設定する
- ▶ 定常状態に達すると, 元の方程式の解と一致する
- ✓ divergence cleaning: 電磁気学や磁気流体力学において

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}$$

の代わりに, 補助変数 ψ_{div} を導入して, 以下のような方程式を解く

$$\frac{\partial \psi_{\text{div}}}{\partial t} + c_h^2 \nabla \cdot \mathbf{B} = -\frac{c_h^2}{c_p^2} \psi_{\text{div}}, \quad \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} - \nabla \psi_{\text{div}}$$

アジョイント法の目的関数の変分について

- ✓ スライド p.22 の目的関数を少し書き換えると

$$J(\mathbf{x}) = \int_0^{t_K} \frac{1}{2} \sum_{k=0}^K \|\mathbf{d} - \mathbf{Hx}\|_2 \delta(t - t_k) dt + \int_0^{t_K} dt \int_0^L dx \lambda(x, t) \left(\frac{\partial c}{\partial t} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - S_0 \right)$$

- ✓ Gâteaux 微分 $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{J(\mathbf{x} + \varepsilon \delta \mathbf{x}) - J(\mathbf{x})}{\varepsilon}$ により1次の変分を計算すると

$$\delta J = \int_0^{t_K} \frac{1}{2} \sum_{k=0}^K {}^t \delta \mathbf{x} \frac{\partial \|\mathbf{d} - \mathbf{Hx}\|_2}{\partial \mathbf{x}} \delta(t - t_k) dt + \int_0^{t_K} dt \int_0^L dx \lambda(x, t) \left(\frac{\partial \delta c}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \delta c}{\partial x^2} \right)$$

- ✓ $\frac{\partial \|\mathbf{d} - \mathbf{Hx}\|_2}{\partial \mathbf{x}} = -2^t \mathbf{H}(\mathbf{d} - \mathbf{Hx})$ と部分積分を用いると

$$\begin{aligned} \delta J = & - \int_0^{t_K} \sum_{k=0}^K {}^t \delta \mathbf{x} {}^t \mathbf{H} (\mathbf{d} - \mathbf{Hx}) \delta(t - t_k) dt + \int_0^{t_K} dt \int_0^L dx \delta c \left(-\frac{\partial \lambda}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2} \right) \\ & + \left[\int_0^L \lambda \delta c dx \right]_0^{t_k} + \left[\int_0^{t_k} D \left(\frac{\partial \lambda}{\partial x} \delta c - \lambda \frac{\partial \delta c}{\partial x} \right) dt \right]_0^L \end{aligned}$$

- ✓ ここで, $\lambda(x, t_k) = 0$, $\delta c(0, t) = \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=L, t} = 0$, $\lambda(0, t) = \frac{\partial \lambda}{\partial x} \Big|_{x=L, t} = 0$ とすると

$$\delta J = - \int_0^{t_K} \sum_{k=0}^K {}^t \delta \mathbf{x} {}^t \mathbf{H} (\mathbf{d} - \mathbf{Hx}) \delta(t - t_k) dt + \int_0^{t_K} dt \int_0^L dx \delta c \left(-\frac{\partial \lambda}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2} \right) - \int_0^L \lambda(x, 0) \delta c(x, 0) dx$$

- ▶ 空間積分を矩形公式で近似し, 隅伴方程式が成り立つとすると, $\frac{\partial J}{\partial c} \Big|_{x=x_i, t=0} = -\lambda(x_i, 0)$