より速く、より正確に

―― 持丸研究室 開発システム工学科 ――

持丸 義弘 教授

今日の多くの研究・開発活動で、コンピュータの果たす役割はますます大きくなってきている。その理由の一つとして、様々な「現象」のシミュレーションがコンピュータを使ってできるようになったことがあげられる。しかし、コンピュータの計算速度などハードの限界が、シミュレーションの限界をも生み出している。

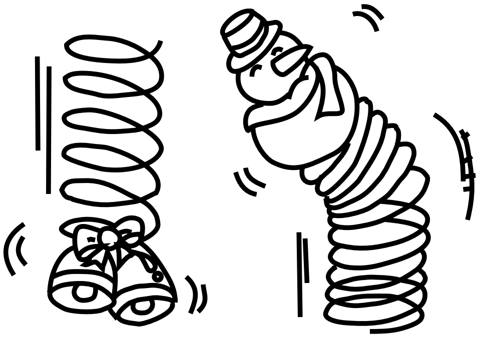
ここ持丸研究室では、速度の限界をハードではなくソフトの面から乗り越えようとしている。計算手法を工夫することで、速く、正確で、より信頼できるシミュレーションソフトの開発を行っているのである。それではまず、シミュレーションの対象となる「現象」について考えてみよう。

複雑かつ難解な現象「流れ」

「現象」と一口に言っても、世の中には非常に多種多様な現象をみてとることができる。例えば単純なものの例としては、物体の放物運動や、バネの振動が挙げられる。これなら、紙とエンピツさえあればちょっとした手計算で簡単に運動の予測をすることができるだろう。しかし、世の中の現象はこのように簡単に予測できてしまうものばかりではない。持丸研究室では、非線形性を持つため難解である現象の一つ「流れ」についての研究を行なっている。ではここで、線形性を持つ現象と非線形性を持つ現象の違いについて簡単に説明しよう。

現象の例として、単純なバネの運動を考えてみよう。力を加えることでバネを伸ばしたり縮めたりしたとき、バネが伸び縮みする長さは力に比例する。このような現象では、原因（物体への刺激）と結果（刺激からの応答）が比例関係にあるということができる。このように単純に比例関係が成り立つ現象はいろいろあるが、そのような現象のことを線形性を持つ現象というのである。高校で学んでいるような力学・電磁気学で扱ったさまざまな現象は、多くの場合線形性を持っているものであるということができる。

しかし、力を増加させつづけるとそのうちにバネがほとんど伸び切ってしまい、バネの伸びが力に比例しなくなることが観察できるだろう。このように一般に線形性を持つと考えられている現象でも、単純な比例関係がどこまでも変わらないで続くわけではなく、いつかは線形関係が破れるこ



とが多い。そのような簡単な線形の数式で記述できない現象を非線形性を持つ状態という。数学的には、線形なものは多くの場合唯一の解を持つということがわかっているが、非線形なものは唯一の解を持つかどうか、または存在しないかどうか判別ができない場合が多い、ということができる。昨今、よく耳にするカオスとよばれる現象も、元をたどれば非線形を持つ現象に行き着くのだ。

「流れ」を解く

さて、持丸研究室で行っている研究の内容に戻ろう。前の文で述べたように、持丸研究室では非線形性を持つ現象である「流れ」についての数値シミュレーションの研究を行なっている。

「流れ」というものは、物理学的には「変形を伴うこともある液体・気体などの運動」と定義されている。この現象はほとんどの場合、強く非線形傾向が現われるものの一つである。例えば、ある特定の「流れ」の中に、三角関数で表すことのできる波のような小さな変動が加わるとしよう。この変動によって、次の瞬間には必ず新しい形の変動——主に元の三角関数で表された正弦波の振動数に対し２倍の振動数の変動——が引き起こされることが知られている。当然この変動は、一度で終わるわけでなく、連鎖反応をおこして次の瞬間もその次の瞬間も……と際限無く繰り返されることになる。そしてあっという間にとても高い振動数の正弦波が大量にでてきてしまうこととなるのだ。

さて、ここでは一つの三角関数で表される変動だけを考えたのだが、実際の変動ではどうなのだろうか。これは、ある周期を持った関数を、その周期とそれより短い周期の三角関数の和に分解するという、フーリエ級数と言われるものを使うことによって考えることができる。実際の変動というのはどんなに複雑でも長い時間で考えれば周期を持つと考えられるので、フーリエ級数を使って三角関数の和として考えることができるようになるからである（図1)。

これらのことから、分解された一つ一つの三角関数の変動に対し、次の瞬間にはまた新しい正弦波が現れる、ということが繰り返されることが分かる。実際に観察される現象は、これらの正弦波すべての集まりなのだから、非常に複雑きわまりない現象だということになる。以上のことから、「流れ」は非線形性を持つ現象と考えられるのである。

「流れ」の状態を決定付ける方程式として、例えば水や空気を対象としたナビエ・ストークス方程式と呼ばれるものが存在する。今までに述べているように「流れ」はたいてい非線形を持つ現象であるのだから、その現象を決めると考えられているナビエ・ストークス方程式も当然非線型となっている。そのため、これは非常に限られた条件の下でしか式を満たす完全な解を求めることができない。もちろん一般に想定している「流れ」の様相は限りなく多様なので、ごく単純な形状の境

２πの周期を持つ関数 $f(x)$ が次の形で与えられているとする。

$$f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n \cos nx + b_n \sin nx\right) \cdots (*)$$

ここで、a_0 , a_n, b_n をそれぞれ定める。

両辺を−πからπまで積分すると

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) = \int_{-\pi}^{\pi}\left\{a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n \cos nx + b_n \sin nx\right)\right\}dx$$
$$= \int_{-\pi}^{\pi} a_0 dx$$

よって、
$$a_0 = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)dx$$

次に、(*) の両辺に $\cos mx$ ($m = 1,2 \cdots$)をかけてから、同様に−πからπまで積分すると

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\cos mx dx$$
$$= \int_{-\pi}^{\pi}\left\{a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n \cos nx + b_n \sin nx\right)\right\}\cos mx dx$$
$$= a_m \pi$$

よって、
$$a_m = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\cos mx dx$$

また、同様に $\sin mx$ (m=1,2 $\cdots$)をかけて計算すると

$$b_m = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\sin mx dx$$

このように、a_0 , a_n, b_n がそれぞれ定まる。

（ただし、これは厳密な証明ではありません。）

図１・フーリエ級数展開

界を持った物体の中を流れる「流れ」を考える場合を除けば、厳密な解が求められる可能性はほとんどないといっていい。そこで、実際には方程式を近似的に計算で解いていく方法、つまり数値シミュレーションが重要な役割を果たすことになる。

「複雑」から「単純」に

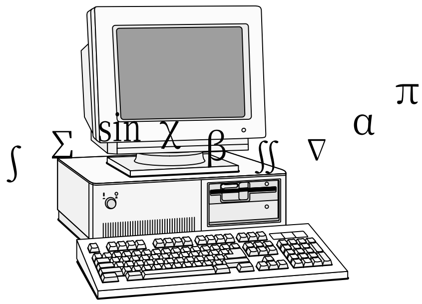
「流れ」の数値シミュレーションを行う際に使われる計算の手法には、どのような方法が考えられているのだろうか。持丸研究室では、スペクトル差分法という新しい計算手法を使用したシミュレーションを行っている。それではその計算手法の良さを理解していただくために、まず現在まですでに使われてきた計算手法について簡単に説明しよう。現在、数値解析の手法は大きく分けると差分法、有限要素法、スペクトル法という３つの方法が使われている。

まず、差分法についてである。差分法は、２次元の平面であれば長方形、３次元の空間であれば直方体の格子に分け、それらの格子点における速度などの情報の相互関係から「流れ」の現象を見ていこうという方法のことをいう。この方法は、それぞれの格子の近くの格子点における情報の関係を使い、ナビエ・ストークス方程式などにより近似的な計算で次の瞬間の現象を決定するというものである。しかし、より精密なシミュレーションを行いたい場合、格子点の数を増加させる（つまり、一つの格子間隔をより小さくとる）しか方法がないために、格子を増やすにつれて計算量が膨大になってしまう。

次に、有限要素法についてである。有限要素法とは、たいていの差分法のように規則正しく格子を空間にとって計算するのではなく、空間をもっと自由で多種多様な形に分割して解くという方法のことをいう。この場合には、シミュレーションの対象となる現象は特別に規則的な構造を持つという必要がないので、さまざまな現象に応用がきき汎用性がある。しかしその反面、決まった形を取らずに分けた空間の形が災いしてしまい、相互関係を表すための計算量が非常に多くなってしまうのだ。

最後に、スペクトル法についてである。これは先ほど述べたフーリエ級数などを使うことで、未知数の要素を三角関数に分けて計算する方法のことをいう。数学的には、微分方程式で表される流体の関係式を、微分を使わない代数の式に近似する。そして新しくできた方程式を解くことで次の状態を見ていこうというのである。しかしこれも精度を上げようとすると、近似することによりできた代数の式の項が増えてしまい、それにつれて関係式の本数も増えていく。そうして計算量も増えていくのだ。

このように、今までの計算方法ではさまざまな問題により計算量が膨大になってしまうという問題が存在する。では、持丸研究室のスペクトル差分法は、その問題をどのような方法で回避しているのだろうか。



新しい計算法・スペクトル差分法

スペクトル差分法を使った計算方法は、まず、シミュレーションを行おうと考えている現象の未知量１座標ないし２座標を取り出す。そしてそれをスペクトル法と同様、フーリエ級数等の級数を使用することにより、完全に三角関数のような形に分解する。

その後、境界条件や初期条件などの現象に関係する様々な条件を、未知量を分解したのと同様に級数の形にして、それらの関係から級数の成分ごとに方程式を作り出す。そして、作りだされたこ

れらの方程式を順番に解いていくことによって、現象を時間を追ってシミュレーションしていくのだ。

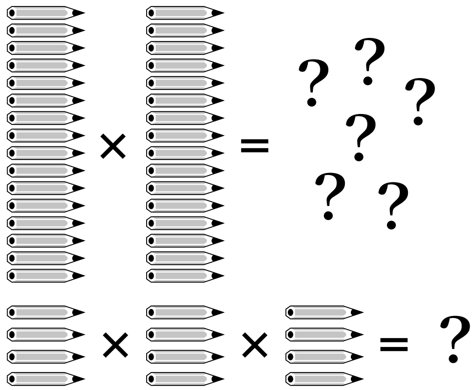
なぜこの方法を使うことによって、今まで必要だった膨大な量の計算が、非常に少なくて済むようになるのだろうか。それには、次の２つの理由が挙げられる。

第１に、シミュレーションを行なう前に、求めたい現象をいくつかの三角関数のような形に分解することが挙げられる。そうすることにより、その分解した成分の座標系において少なくとも分解した一次元分、次元を低下させて解を求めることが可能なためなのである。

しかし、現象を１次元低下させても、級数に分解したために式が増え計算量が増加してしまう。そのため計算速度はそんなに変わらないのでは、とも考えられる。しかしこの問題は分解の対象とする座標軸の成分を、物理的な量があまり変動しないものを選んで使用すれば解決できる。なぜならば、そうすることにより、分解したために増えた計算量をそれほど増やすことなく次元の低下を行なうことができるからだ。

第２に、各成分ごとに分けて計算していることが挙げられる。従来、多くのスペクトル法は、すべての成分をまとめて一度に計算してしまおうという強引な方法だった。これでは変数も関係式の本数も膨大なものになってしまう。スペクトル差分法ではこれを成分ごとの式として考えることにより、回数は増えるが、簡単な式の計算に直してしまうのである。例えてみれば、100個の変数の関係式100本の方程式を、10個の変数の関係式10本の方程式10個に変えてしまうようなものである。このようにして、計算量を大幅に減少することができるのだ。また、この方法では１回１回扱う未知数の数が少ないので、コンピュータのメモリをかなり節約できるという利点をも生み出すことができるのである。

さて、実際に開発されたスペクトル差分法を使用したソフトでは、今までのものに比べてどの程度速くシミュレーションすることができるのだろうか。持丸先生によると、同等の精度でシミュレーションを行うならば、大体100倍程度速くなるそうである。これは驚異的な数字ではないだろうか。このことから、より高い精度を求める場合にも、様々な条件でのシミュレーションを必要とする場合にも、非常に効率の良いものだということがわかる。この効率の良さから、より多方面での利用が期待される。



Kerman大学での数学会にて

持丸先生は開発システム工学科に所属されているのだが、その研究の性質上、数学会との関わりがとても深いそうである。左の写真を見ていただきたい。これは、1995年のイスラムの正月（3月下旬）にイラン数学会の招待で、Kerman大学で公演発表した際の写真である。このように、先生は多方面でのご活躍をされている。

最後に、お忙しい合間を縫って取材に協力して下さったことに感謝すると共に、持丸先生の今後のより一層のご活躍を期待しております。

（三宅　隆悟）