自然科学のシミュレーション

東京経営短期大学 経営総合学科
神保 雅人
JIMBO Masato

1. はじめに

表題は本来，大変広範囲に亘る内容を含むものであるが，本稿では，自然科学に於ける方法論は社会科学に於ける方法論とは大いに異なるという意味合いで付けたものである。ここで，シミュレーション（simulation）とは，元々，まねとか，見せかけとかいう意味の単語で，計算機関係の用語としては，模擬実験という意味で用いられる。

自然科学はよく, 実証の学問と言われているが，それは対象とする自然現象から抽出した法則性は，必ず実験または観測によって確かめられなければならないからである。ある法則が打ち立てられ，それが確立するためには，その法則から演繹される結果が一定の条件下で再現可能であることが必要である。

したがって，自然科学を志す者は先ず，実験の組み立て方，実験結果の解析方法，実験結果に対する考察の仕方を学ぶことになる。シミュレーションは，こういう段階を経ずに自然現象をコンピュータ上でビジュアルに捉えることにより表面的に理解するために行う訳ではない。

それでは，自然科学ではどのような場合にシミュレーションが必要になるかというと，次のような場合が考えられる。

1) 実験や観測を行うには，莫大な費用が掛かる。
2) 実験や観測を行うには，危険が伴う。
3) 実験や観測を行っても, ごく稀にしか起こらない事象を対象としている。

このような場合でも，最終的には，実験または観測を行って，実証がなされなければならない。その際に，シミュレーションは，実験装置または観測装置を設計したり，実験方法または観測方法を計画したり，事象がどの程度の頻度で生起されるのかを見積もったり，という目的のために不可欠のものとなる。

本稿では，このように大掛かりで本格的なシミュレーションは扱わず，自然科学の基礎として位置付けられる物理学の方法論に基づいて，シミュレーションの基本的な考え方について論じる。

2. シミュレーションの基礎

2. 1 物理学の方法論

シミュレーションを行うにあたって，いきなり現実をそのまま写し取るようなモデルを作るべきであると思い込んでいる人をたまに見かけるが，それでは，実際に起こっている事象を詳細に記述することくらいしかできない。複雑な自然現象を如何にして単純な法則で記述するか，という発想をするのが，物理学の基本的な考え方である。

そこで，物理学では物事を微分方程式及びその初期条件と境界条件で記述していく。その際，すぐに取り扱えるのは線形性のあるものであり，非線形なものに対する解は，特別な場合を除いて，数値的にしか求まらない。

また，物理学では，物事を先ず大づかみにしてから, 段階を追って次第に詳細な記述をしていく。この考え方を，例え話として，地球の構造に関して適用すると，次のようになる。

0) 地球は半径 6,370km の球体である。
1) 地球は赤道半径 6,378km，極半径 6,356km の回転楕円体である。
2) 地球の表面には最大±10km の揺らぎがある。

上述の 0)～2)を物理学でよく用いられる摂動論の用語では第 0 近似，第 1 近似，第 2 近似という呼び方をする。土台となるのが第 0 近似である。ここで，近似の度合いが上がるにつれて，精度が

上がることが重要である。上の例で，第 0 近似と第 1 近似とを比較すると，＋0.13～－0.22%の偏差がある。なお，この例で第 2 近似の偏差は，最大の揺らぎについて見れば，第 1 近似とほぼ同程度であるが，第 1 近似では緯度が指定されれば半径が定まるのに対して，第 2 近似では同一緯度でも揺らぎがあるため, 第 1 近似の微細構造となる。両者は，記述の複雑さでは，大いに異なる。

2. 2　ニュートン力学

シミュレーションの基礎を論じるために，先ずは，ニュートン力学を概観する。ニュートン力学は，最近ではゲーム作りにも取り入れられ，その手法を記述した書籍も複数出版されるようになって来たが，速度が光速度に比べて十分小さい場合には物体の運動を記述し得る，物理学の原点と言える一分野である。

また，本年（2005 年）は国際物理年とされていて，100 年前にアインシュタインが提唱した特殊相対性理論が久し振りにブームとなっているが，この理論に基づく力学を相対論的力学と呼び，それとの区別のためにニュートンが創始した力学をニュートン力学と呼ぶのが習わしである。

なお, 高等学校で物理が嫌いになる人の多くは，沢山の公式を事象ごとに覚えさせられるのが苦痛のようであるが，本来の物理学ではそのような必要性はない。その代わり，上述の微分方程式を解くための計算力は要求される。それが乗り越えられれば，力学はとても美しい体系であることに感動を覚えることができるようになる。

ニュートン力学では，先ず，自然界の物体の動きを観察した結果として，空気抵抗や摩擦などを取り払った理想的な運動を考える。また，物体の大きささえも無視して，質点という位置と運動量とを属性として持つものを対象とし，その質点に働く力によって，どのような運動をするかを解くことが目的となる。

出発点は，ニュートンの運動の法則と呼ばれる三つの法則である。

[第一法則] 外から力の作用を受けない質点の運動が等速直線運動として見える座標系（慣性座標系）が存在する。

[第二法則] 質点に力が作用すると運動量が変化し，その時間変化の割合は作用した力に等しい。

[第三法則] 二つの質点が互いに力を作用しあうとき，両者に働く力は，大きさは等しく互いに反対の方向を向いている。

第一法則にある，力が働いていない状態とは，例えば，空気のない宇宙空間で天体間の重力が釣り合っているような場合である。これは，実際には簡単に作り出すことはできないので，身の回りの物体の運動を考えるとすれば，言わば第 0 近似を考えることになる。理科の時間ではよく，ドライアイスから吹き出す二酸化炭素で浮かせたパックを用いてテーブルとの間の摩擦力を極力減少させて，この法則を確かめさせている。

慣性座標系は，図 1 のような直交座標上に質点を置き，ある時刻の位置ベクトルを $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$, 速度ベクトルを $\boldsymbol{v} = (v_x, v_y, v_z)$ としたとき，

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = v_x \\ \dfrac{dy}{dt} = v_y \\ \dfrac{dz}{dt} = v_z \end{cases} \qquad (1) \qquad\qquad \begin{cases} x = v_x t + x_0 \\ y = v_y t + y_0 \\ z = v_z t + z_0 \end{cases} \qquad (2)$$

となる座標系である。

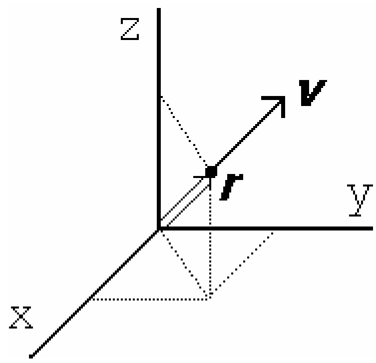

図 1．質点の運動と直交座標

このように等速直線運動の場合には，時刻 0 の位置ベクトルの値を初期値として(1)式の微分方程式を解けば，(2)式のように運動は解けてしまう。物理学では微分方程式の一般解ではなく，初期条件や境界条件を課すので, それらを組み入れれば，物理学は積分方程式で記述されると言ってもよい。

実際の物体には殆どの場合，何らかの力が作用している。第二法則にある，運動量とは，速度に比例するベクトル量で，$\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$ と表される。ここで，比例係数 m を慣性質量と呼ぶ。第二法則は質点に作用する力のベクトルを $\boldsymbol{F}$ とすれば，

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \boldsymbol{F}, \quad m\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = \boldsymbol{F}, \quad m\frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \boldsymbol{F} \tag{3}$$

と表される。(3)式は，同一の方程式をそれぞれ運動量ベクトル，速度ベクトル，位置ベクトルで表したものである。

この 3 番目の式の両辺に微小な位置ベクトルの変位 $d\boldsymbol{r}$ を掛けて内積をとることにより，その変位の際に力 $\boldsymbol{F}$ がする仕事という物理量が，

$$\boldsymbol{F} \cdot d\boldsymbol{r} = \frac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}\right)^2\right]dt \tag{4}$$

というように求まる。この式で右辺の大括弧の中の量は運動エネルギーと呼ばれる。

力 $\boldsymbol{F}$ の各成分が次式で表されるような U が存在するとき，

$$F_x = -\frac{\partial U}{\partial x}, \quad F_y = -\frac{\partial U}{\partial y}, \quad F_z = -\frac{\partial U}{\partial z} \tag{5}$$

U をポテンシャル関数，$\boldsymbol{F}$ をポテンシャル力という。特に，U が位置座標だけの関数の場合，(4)式の左辺は，

$$\boldsymbol{F} \cdot d\boldsymbol{r} = -\frac{\partial U}{\partial x}dx - \frac{\partial U}{\partial y}dy - \frac{\partial U}{\partial z}dz \tag{6}$$

となり，これは全微分 $-dU$ となる。

(4)式の右辺の運動エネルギーを T で表せば，結果として，力学的エネルギー保存則

$$d(T + U) = 0 \tag{7}$$

が成立することが分かり，U はポテンシャルエネルギーとも呼ばれる。

また，複数の質点に対して，第二法則と第三法則とを適用すれば，運動量保存則が成立していることが分かる。このように，物理学では基になる法則を数式化し，そこから得られる結果を実証していく。

2.3　放物運動

簡単なニュートン力学のシミュレーションの例として，高等学校の物理でもよく取り上げられる放物運動を扱う。ここでは，物体をある角度で投げ上げたときの運動を対象とする。

先ず，重力加速度 g について考察する。地表付近の物体に働く重力は，地球の各点とその物体との間に働く万有引力を地球全体に渡って合成した力である。二つの質点間に働く万有引力のポテンシャルエネルギーは，それぞれの質量を M 及び m，距離を r，重力定数を G として，

$$U = -G\frac{Mm}{r} \tag{8}$$

と表される。

ここで，地球が，密度は均一の球体とする第 0 近似を考える。地球の各点の微小な体積から地表付近の物体に働く万有引力のポテンシャルエネルギーを積分すれば，結果が得られる。その際に，図 2 のような球面座標系を用いて計算を行う。

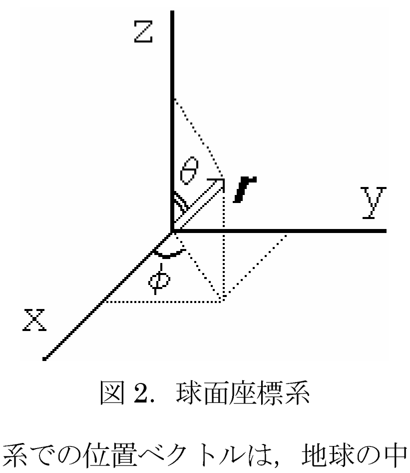

図 2．球面座標系

この座標系での位置ベクトルは，地球の中心を原点として，$\boldsymbol{r} = (r, \theta, \phi)$ で表される。

計算の結果は，地球の中心に全質量を集めた質点から地球の半径 R だけ離れた位置にある質点に働く万有引力のポテンシャルエネルギーと同一

の値となる。この場合，ポテンシャルエネルギーは球対称で，r のみにより，θ や ϕ にはよらないので，重力は地球の中心に向かう方向で，

$$\boldsymbol{F} = -G\frac{Mm}{R^2}\frac{\boldsymbol{r}}{r} \tag{9}$$

となる。ここで，$\boldsymbol{r}/r$ は動径方向の単位ベクトル，すなわち，地球の中心から外に向かう方向で，大きさが 1 のベクトルを表す。

(9)式より，地表付近で暮らしている我々にとっては，重力は下向きに働く，単位質量（1kg）当たり GM/R^2 $(=g)$ の大きさの力として感じられる。力は質量と加速度との積で表されることから，地表から上向きに z 軸を設定すれば，

$$F_z = -mg \tag{10}$$

となり，g を重力加速度と呼ぶ。なお，実際には，我々が上下の方向を感じるのはこの重力による。

観測されている値を G，M，R に代入して求めた g は 9.82 m/s² となる。g の観測値は緯度や地形によって差があるが，標準値は 9.80665 m/s² とされている。実際には地球の密度は均一でないことから考えれば，上述の第 0 近似はなかなかよい精度である。

物体に働く力がこの重力のみの場合には，物体をある角度で投げ上げたときの運動は，微分方程式が簡単に解けて，物体の軌跡は放物線を描くことが分かる。その場合には，シミュレーションを行う必要はない。ここでは，物体に抵抗力が働く場合を考えることにする。

抵抗力が空気によるものである場合，雨粒のような断面積が小さい物体に対しては，速度の大きさに比例する力が大きく，断面積が大きい物体に対しては速度の大きさの自乗に比例する力が大きいことが知られている。ここでは，物体の大きさは特に考えず，質点として扱うが，抵抗力については，速度の大きさの自乗に比例する力として扱うことにする。

図 3 のように，地表面からの角度を Θ，初速度の大きさを v_0 m/s とする。また，抵抗力の速度の大きさの自乗に対する比例係数を A kg/m とする。この場合には，積分はルンゲクッタ法というアルゴリズムで数値的に解く。

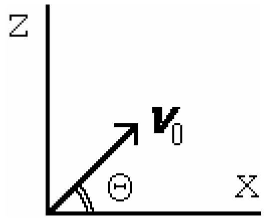

図 3. 放物運動の初期条件

質点の運動を表す微分方程式（運動方程式と呼ぶ）は，この場合，位置座標の時間に関する二階微分が定数－抵抗力による加速度という式で記述できるが，これを数値的に解くためには，次のような工夫を施す。それは，次式のように，位置座標の微分が速度，速度の微分が力を質量で割ったものという式を作り，連立微分方程式の形にして，ルンゲクッタ法を適用する，というものである。

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = v_x \\ \dfrac{dz}{dt} = v_z \\ \dfrac{dv_x}{dt} = -\dfrac{A}{m} v_x \sqrt{v_x^2 + v_z^2} \\ \dfrac{dv_z}{dt} = -\dfrac{A}{m} v_z \sqrt{v_x^2 + v_z^2} - g \end{cases} \tag{11}$$

ここで，(11)式を解く際に用いる初期条件は，時刻 $t = 0$ の位置座標を(x_0, z_0)，速度を(v_{0x}, v_{0z})とすると，

$$\begin{cases} x_0 = 0 \\ z_0 = 0 \\ v_{0x} = v_0 \cos\Theta \\ v_{0z} = v_0 \sin\Theta \end{cases} \tag{12}$$

となる。なお，数値計算に当たっては，m，A，

g，v_0 の値を次のように設定した。

m :	1 kg
A :	0.01 kg/m
g :	9.8 m/s^2
v_0 :	35 m/s

また，プログラミングは C 言語で行い，Θ の値を 15 度〜60 度まで 15 度刻みで変化させて，それぞれの値について結果を求めた。グラフは，プログラムで書き出させたファイルを GNUPLOT というグラフ作成ソフトウェアで描画した。この結果を図 4 に示す。

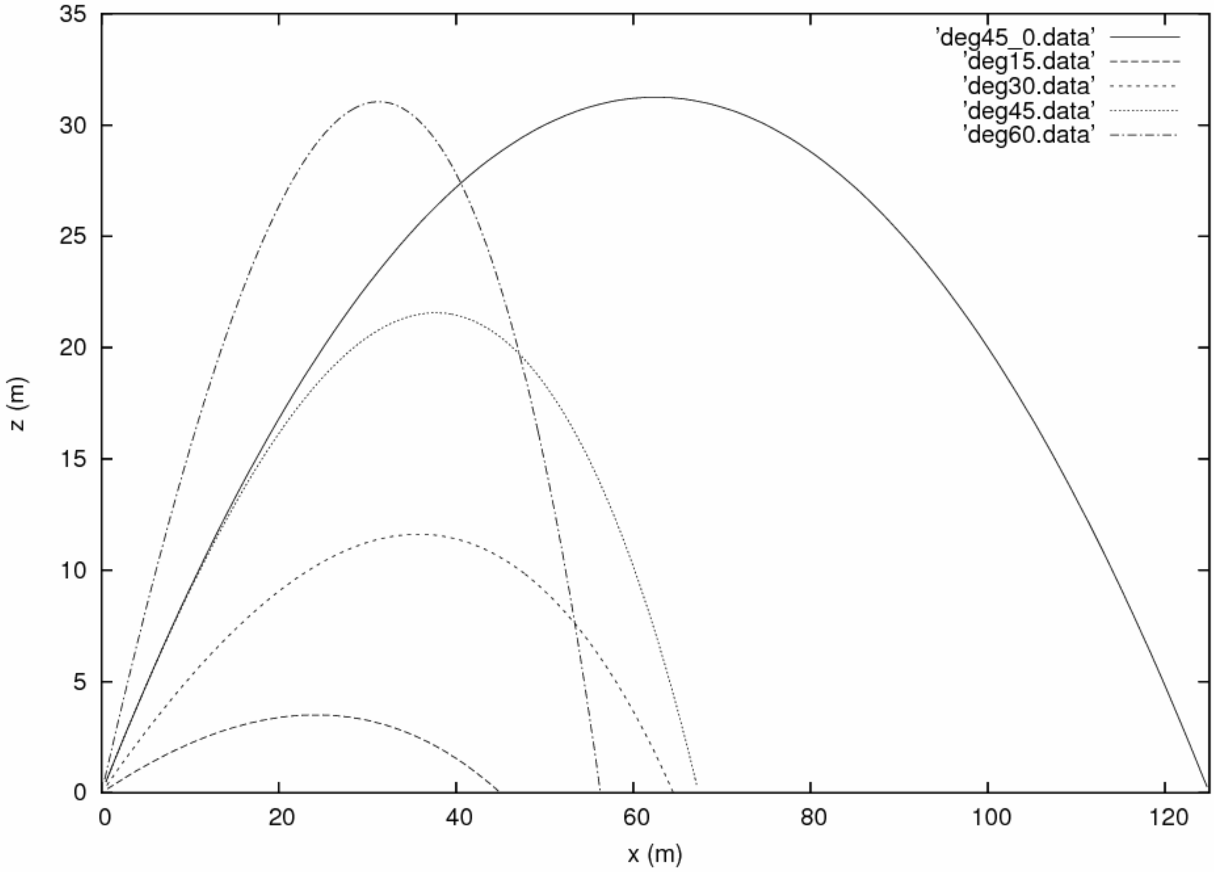

図 4．抵抗力のある場合の放物運動

図 4 の中に実線で描かれている軌跡は抵抗力の働かない場合に 45 度で投げ上げた結果を参考までに付け加えた。この場合には，1kg の物体を初速度 35 m/s（126 km/h）で投げ上げれば，124 m 以上の飛距離が出るということで，野球場ならばホームランである。

しかし，上の結果のように，僅かな抵抗を受けても，飛距離は大幅に減る。これを現実に近づけて，空気抵抗を考えるとすれば，A の値は物体の形状，材質などによるので，実験によって求める必要がある。

3.　シミュレーションと現実

シミュレーションの精度を上げて，より現実に近づけるには最初に考慮していなかった要素を，影響の大きいものから順に加えていけばよい。但し，数値計算をしてみて初めてどちらの要素の影響がより大きいかがわかる場合もあるので，注意が必要である。また，微分方程式の数値解が不安定な場合もあるので，近似を用いた計算との比較などが必要となることもある。

上の放物運動の例で先ず思いつくのは，風の影響を考慮していないことである。追い風か，向か

い風かなど,受ける力の向きや風力を考慮すると,より精密な議論となるが,実際には均一な風が吹いているわけではなく,風力ベクトルは位置と時間の関数となる。もし,風が渦を巻いているような場合まで取り入れるのであれば,流体力学という分野を適用する必要が生じる。

なお,風はある時間帯に無風となることもあるが,ボールのような物体を対象とする際に,避けて通れないのが,回転による影響である。物体が移動していくための運動エネルギーの一部が回転のための運動エネルギーに転化されるということもあるが,空気との相互作用を考慮に入れると,速度ベクトルと垂直な方向に力が働く影響が大きい。野球選手が経験上,「レベルスイングやアッパースイングではなく,ダウンスイングを心掛けよ」と習うのは,ボールの回転運動と関係している。

更に次の段階を考えると,野球のボールは球体ではなく,縫い目があり,その大きさが半径に比べて無視できないものであるために,回転運動に複雑な影響を与える。これは,バットで打った場合よりも,ピッチャーが変化球を投げる際に大きな要素となる。ゴルフボールの場合は表面にディンプル(えくぼ)と呼ばれる小さな窪みを多数付けて,空気抵抗や回転運動を制御し,飛距離を延ばしたり,バックスピンという技を使い易くしたりしている程である。

このような回転運動を取り扱うには,物理学では剛体の力学という分野が用意されている。これは,物体の大きさは考えるが,変形は考えないという近似に基づく。並進運動の際にお目に掛かる質量や運動量に相当するものとして,回転運動には慣性モーメントや角運動量という物理量が登場する。質量が加速のし難さであるのに対して,慣性モーメントは回転のし難さを示す量である。近年のテニスラケットが昔に比べて大きくなったのは,この慣性モーメントを大きくして,ボールが当たった瞬間に回転を防ぐための工夫である。

それでは,物体の変形を扱うにはどうするかというと,変形体の力学という分野も存在している。その成果を踏まえて,反発係数の高いバットやクラブヘッド,内部構造を工夫して変形して戻る際に真っ直ぐ飛ぶボールなどが開発されている。

シミュレーションではなかなか用が足りず,模型を作って風洞実験を繰り返しているのが,飛行機や自動車の開発である。これは,速度の大きなものが空気のような流体中を移動すると,非線形な力を受けるからである。スーパーコンピュータが発達してきて,飛行機の翼の後ろに生ずる乱流と呼ばれる渦の様子がシミュレーションで得られるようになったのはまだ最近のことである。

4. おわりに

本稿では,ごく基礎的な例を通じて,物理学の方法論に基づく,シミュレーションの基本的な考え方について論じた。物理学科の学生は,入学すると同時に,「物理学とは近似である」と教わって育つわけであるが,物理学的なシミュレーションの考え方とは,結局のところ,粗い近似からより精密な近似へと段階的に移っていくことにより,精度を上げていくということに他ならない。

なお,本稿では取り上げなかったが,極微の世界を記述する物理学の分野では,事象は確率的に生起されるため,モンテカルロ法のような,乱数に基づくシミュレーションが多用される。一口にシミュレーションといっても対象によって様々な手法が用いられる。したがって,対象の特性を見定める感覚がシミュレーションを行う際には重要である。

著者略歴

昭和 63 年 3 月　立教大学大学院理学研究科原子物理学専攻 博士課程後期課程 修了(理学博士)

主な職歴

立教大学理学部 副手,
藤田学園保健衛生大学 衛生学部 診療放射線技術学科 専任講師,
東京経営短期大学 経営情報学科 助教授,
東京経営短期大学 経営情報学科 教授,
東京経営短期大学 教育研究情報センター長
を経て,
東京経営短期大学 経営総合学科 教授(現職)