Ver. 8.3a

コンピュータシミュレーション入門

実験は不要か？

IoT時代にふさわしいアプローチとは？

Internet of Things

Ubiquitous computing

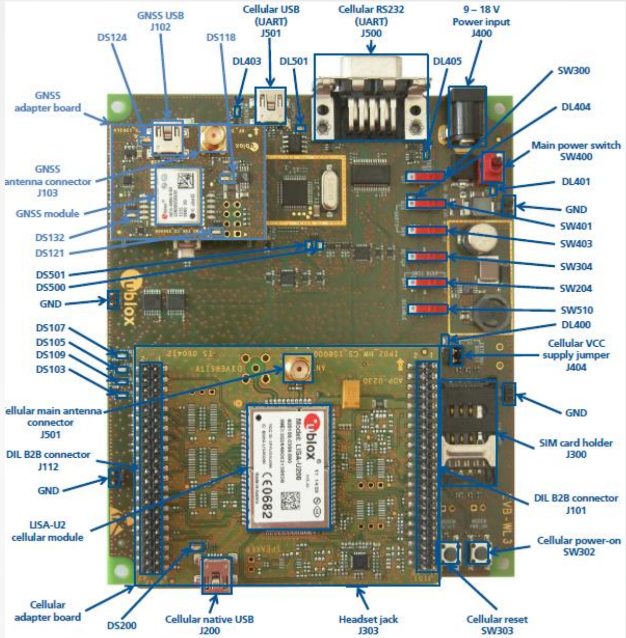
電気通信大学名誉教授

林　茂雄

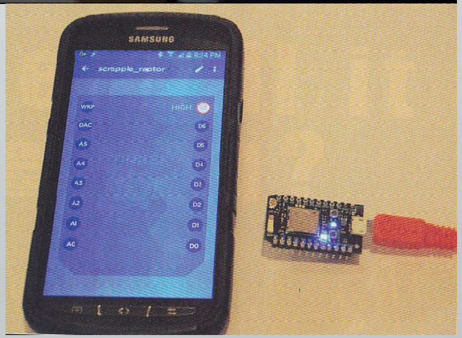
要点

- 「シミュレーション＝計算すること」はアカデミックな発想
  - 計算結果をどう生かすのか？
- 「シミュレーションすれば実験しなくてすむ」は手抜きの発想
  - 計算結果を鵜呑みするな！
- 「シミュレーションとIoTのコラボ」は意思決定の問題
  - メリットとコストの損得勘定は？

IoT がもたらすもの



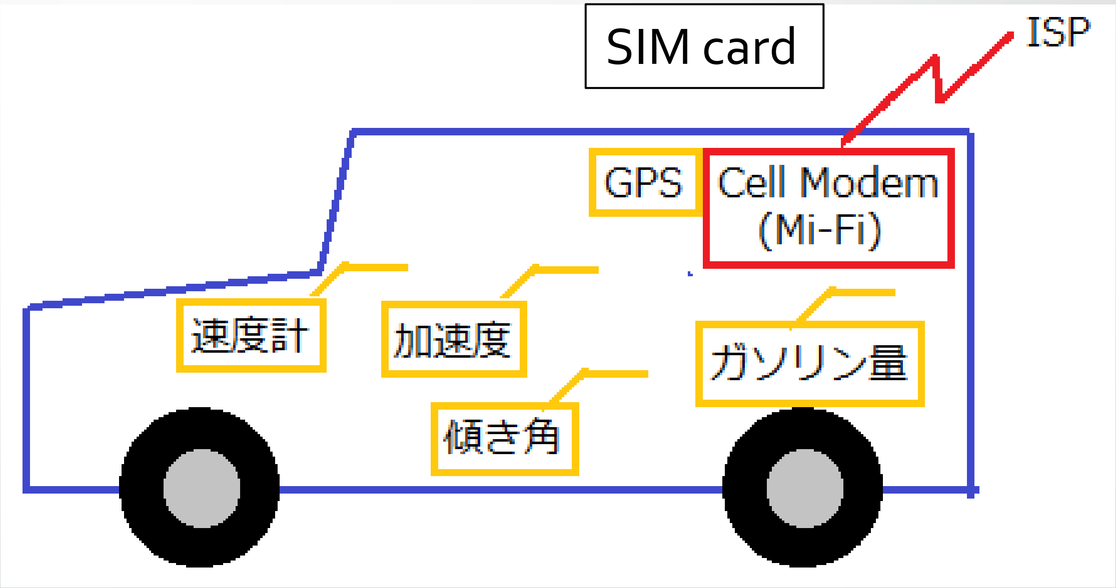
- IoT で
  - 温度・湿度・加速度・光・近接・GPSの情報
    - クラウドに保存/ビッグデータ
    - 異常のリアルタイム検知
  - 制御パラメータのリモート更新
  - しかし、導入とメンテナンスのコスト
    - セキュリティ対策



u-blox
Relayr
Photon from Particle
[1]

例１：IoT を組み込んだ自動車

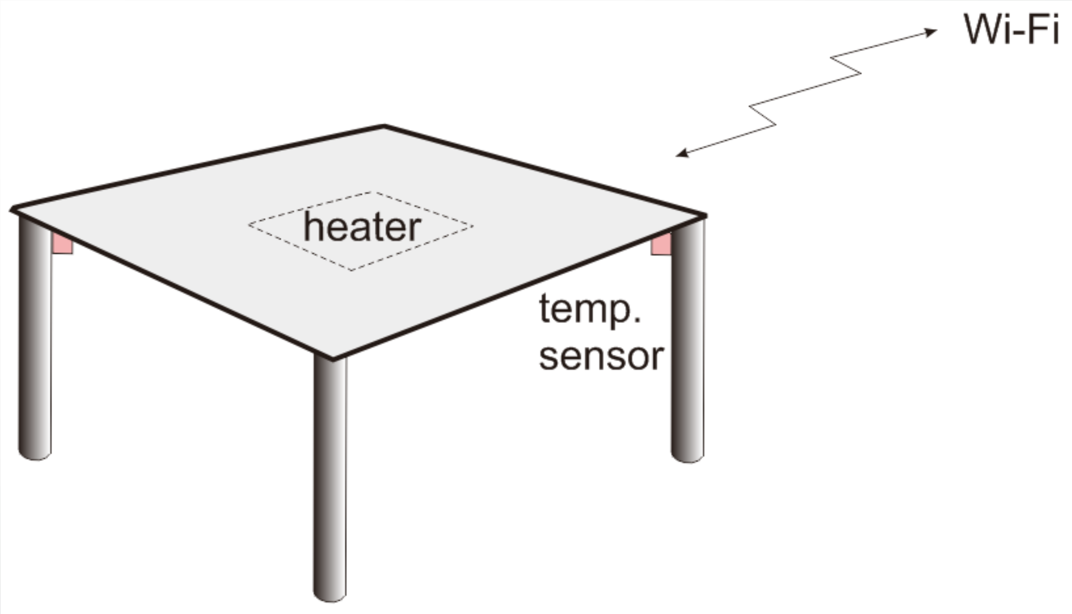
燃料消費量Γの精密予測　「公称リッター〇〇km」は目安



- 各種パラメータの設定
  - 地図とリンク（Navi）
  - 道路状況（障害・渋滞）を反映
- モデル方程式を解く
- 実際と比較
- 給油地点の提案

例２： IoTを組み込んだこたつ

・快適（温度変動、温度むら）
・安心（低温やけど、脱水症状）

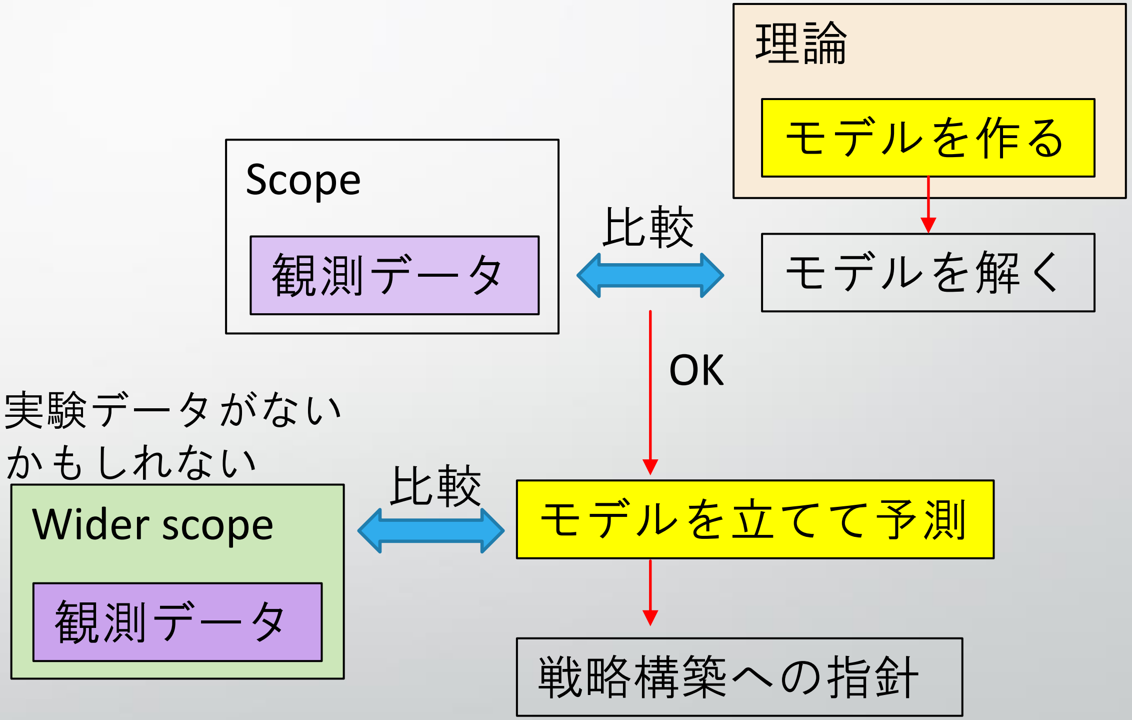


- 複数の温度センサー・ヒーター
  - 動作状況のモニター、異常の検知
- 状況に応じて変わる境界条件
  - 人数・姿勢・隙間
- 制御方式の割り当て
  - ローカル vs リモート

Comsol Multiphysics は中間点

コンピュータシミュレーションとは何か

- コンピュータ上で現実または実験結果を再現すること
- モデルを記述する方程式を解いて「理論データ」を出す
  - 数値計算が暗黙の了解
  - 観測データと整合すればＯＫ
- 最初は小さなスコープ（解析解でもよい）
- 次第に大きなスコープで扱う
- 「説明」から「指針」への発展があるべき



コンピュータシミュレーションと実験とのコラボ

理論

単純モデルを作る

原理を検証する小規模実験

理論＋広義の境界条件

現実的モデルを作る

コストまで検証する大規模実験

実用化

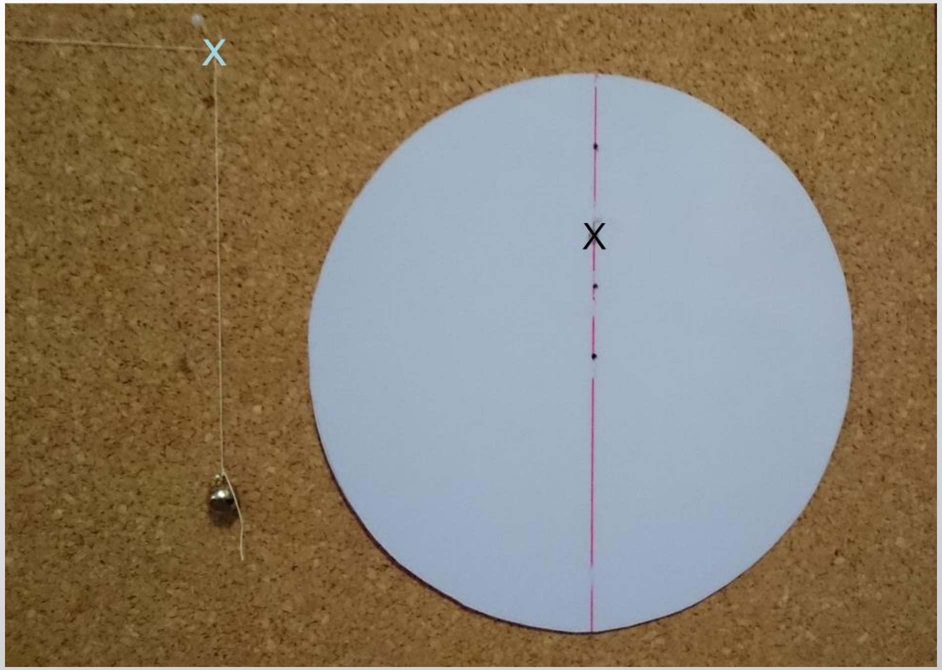
失敗の事例もあり

$$\ddot{\theta} + \frac{2\kappa}{2\kappa^2 + 1}\frac{g}{R}\sin\theta = 0$$

$$T = \frac{2}{w}\int_0^{\theta_0} \frac{d\theta}{\sqrt{\sin^2\frac{\theta_0}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}}}$$

簡単なシミュレーション：円板の振動

- モデル１：剛体の「理想的」振動
  - 古典力学で解析解が得られる（微小振動）
  - $\omega^2 \approx \frac{g}{2R}\frac{1}{\frac{1}{2}\left(\kappa+\frac{1}{2\kappa}\right)}$ $(0 < \kappa < 1)$
- モデル２：軸の摩擦を考慮
- モデル３：媒質の粘性を考慮
  - 薄板にして粘度計？
- モデル４：非幾何学形状のディスク

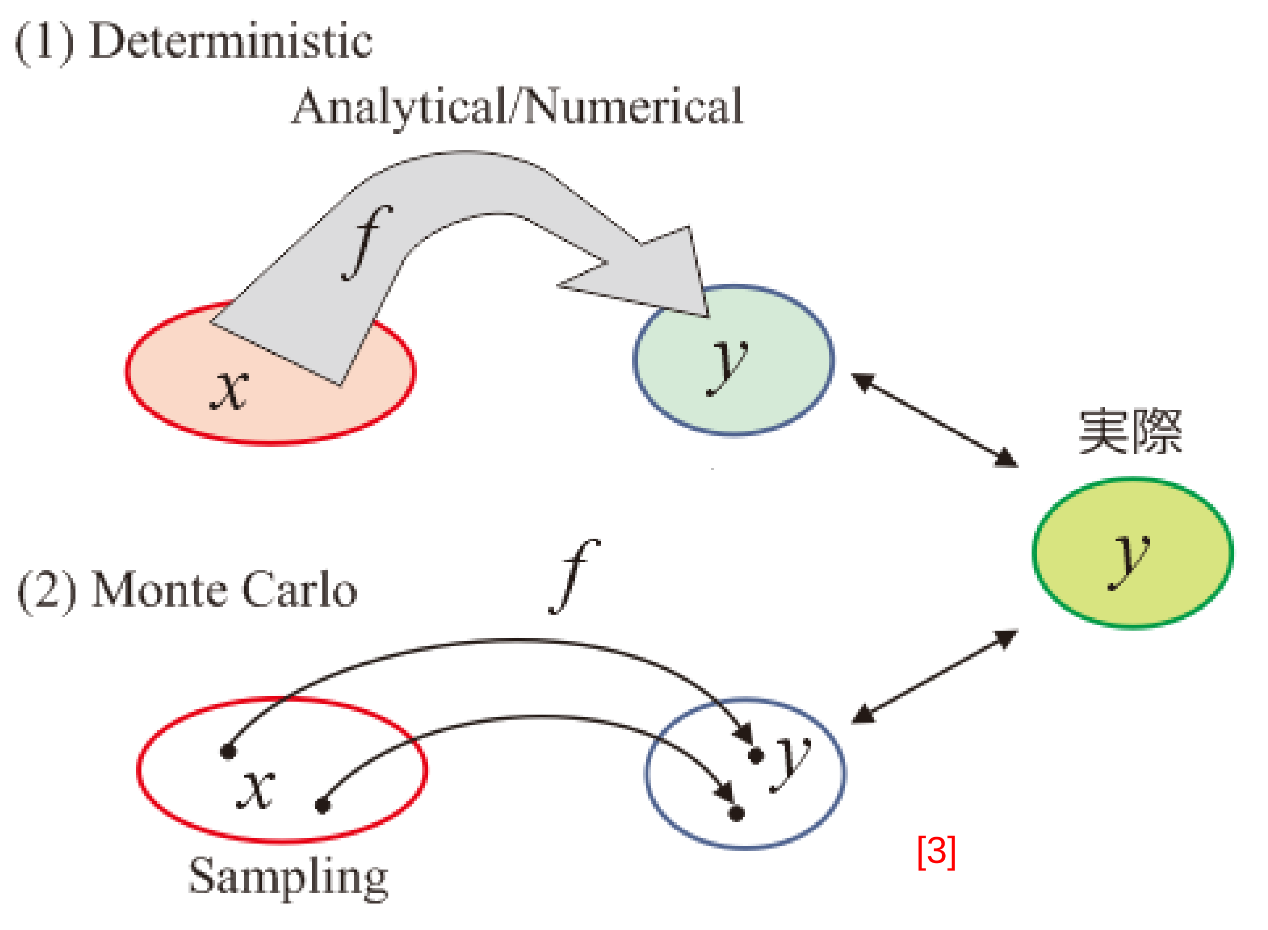


モデル＝模型≒理論≒説≒近似

[2]

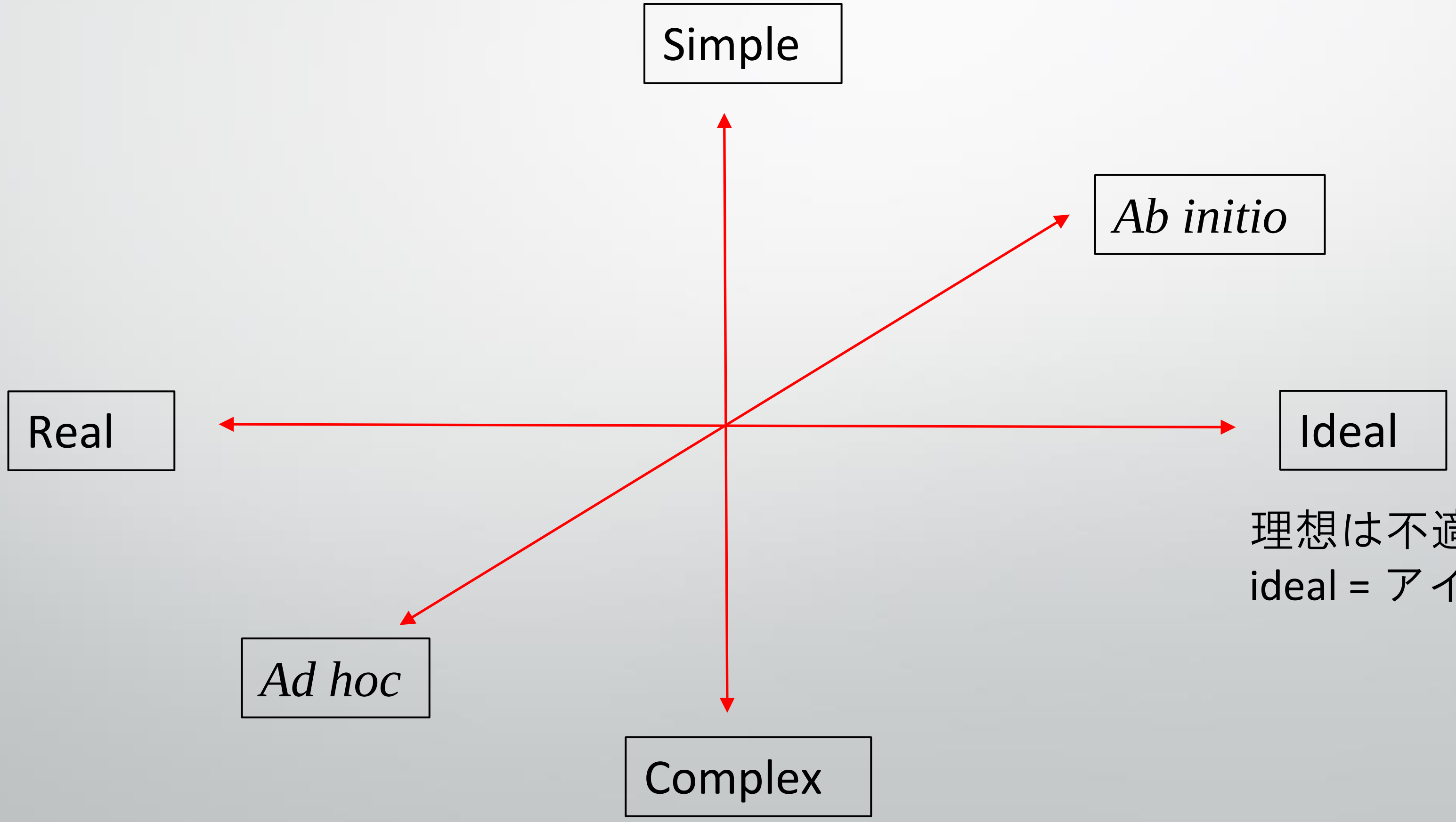
シミュレーションの発想：決定論と確率論

- 入力xに対して出力yを計算
- 実際と一致すればモデルfが正しい
  - すべての点で一致すれば理想的



[3]

モデル分類の視点



理想は不適切な訳語
ideal = アイデアだけの話

モデルの分類軸：分子やイオンを見る目

モデルの分類軸：分子の衝突で起きること

Simple

壁との衝突 ⇒ 圧力　　Van der Waals

壁との衝突 ⇒ 吸着　　Langmuir

分子同士の衝突 ⇒ 反応、相変化

分子と溶媒の衝突 ⇒ 反応、拡散　　Kramers

Complex

衝突 ≈ 相互作用

[4]

モデルの分類軸：電気化学

Simple

電気量 ∝ 物質の生成量

イオン雰囲気

電極表面における分子とイオンのダイナミックス

Complex

[5]

Ideal と Real

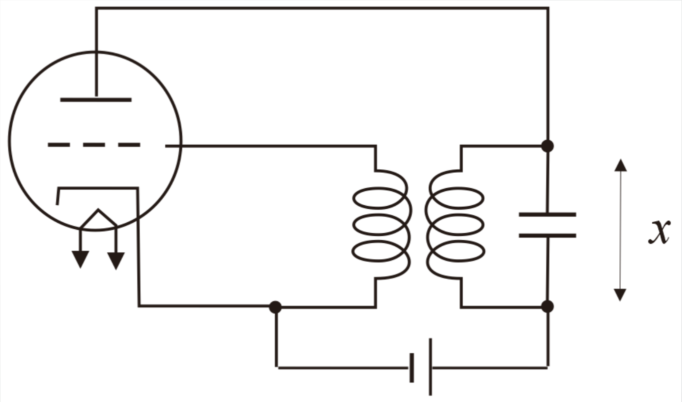
- Ideal に近い「（科学的な）実験」
  - シミュレーションしやすい・教科書的
  - 他の研究者が検証・再現できることが「原則」
- Real を対象とするエンジニアリング
  - モデル構築が第一歩
    - えてして可変パラメータで「合わせ込む」ことになりかねないので要注意
  - ノウハウとして価値がある

シミュレーションソフトの代表：SPICE

[6]

- 電気・電子回路設計では必需品（1973～）
  - 回路図＝すでに一種のモデル
- 低周波領域では完璧
- パラメータのばらつきの影響を調べるのに便利
- 周波数が上がると「隠れた変数」が見えてくる
  - 部品の配置や配線の仕方に由来する浮遊容量、浮遊インダクタンス
  - アース線の引き方でパフォーマンスが異なる
  - 「コンピュータ画面しか見ようとしない学生は、回路設計の技術者に向かない！」

簡単なシミュレーション
非線形常微分方程式を解く



- （例）Van der Pol 発振回路の出力波形
- $\frac{d^2x}{dt^2} - \frac{d}{dt}(\alpha x - \beta x^3) + \omega^2 x = 0$
- Runge-Kutta 法では $\frac{dx}{dt} = y\,, \frac{dy}{dt} = (\alpha y - 3\beta x^2 y) - \omega^2 x$
  - 連立1階微分方程式に変形して計算
- COMSOLではもっと直接的に

[7]

多様なコンピュータシミュレーション(1)

構成要素	原子	電子	砂
分野・対象	相転移	金属・超伝導	粉体

- 多粒子系モデル
  - 質点からモノまで多種多様
  - 量子力学から古典力学まで多彩
  - 「説明」「解き明かす」が主目的
    - 第一原理でどこまでいけるか？

      ab initio vs *ad hoc*

多様なコンピュータシミュレーション(2)

- モデルを作ることが難しいことも
  - 有限時間内に解けねばならない
  - （例）地球上の気候はどこまでわかるか？、地球温暖化は本当に起きているか？
    - 現在の気候変動は「ゆらぎ」なのか「傾向」なのか？
  - パラメータが曖昧だと結果も曖昧
    - 測定データとよく合うモデルが優れている
      - 「パラメータをどんどん取り入れよ」、「こうすれば辻褄が合う」と悪魔がささやく

パラメータの独立性

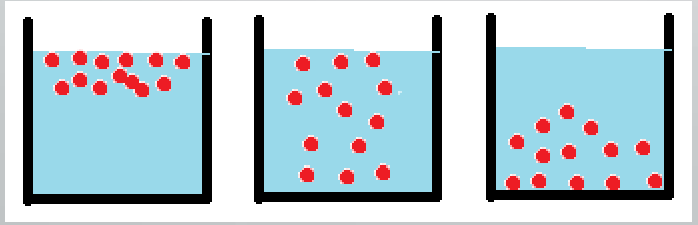
多様なコンピュータシミュレーション(3)

- 工学的応用
  - 外界からの「励起・刺激」に対する「応答」と外界への「散逸」で抽象化できる
  - 偏微分方程式＋境界条件が標準的スタイル ← 対称性があれば変数は少なくてすむ
    - 複雑、少数の任意パラメータ
  - 境界面の扱いと理解はクセモノ
    - 経験式でお茶を濁すことが多い
- 線形の輸送現象（移動現象）モデル
  - 物理量Xの変化速度は物理量Yの空間勾配に比例する（X=熱量：物質両、Y=温度・濃度） [8]
- 非線形現象（レオロジー）
  - 食品やある種のポリマーで見られる（粘弾性、thixotropy、dilatancy） [8]

境界条件

無限に広がった系は理想系

- 無限に広がった結晶の一部 ⇒ 周期境界条件
  - 空間の対称性が重要なキーワード
- マクロに広がった材料の端 ⇒ 物理量 $\phi|_B$ を指定
- マクロに広がった材料表面から流出・流入 ⇒物理量のフラックス $\frac{\partial \phi}{\partial n}|_B$ を指定
  - （例）コロイド粒子の沈降 $\frac{\partial \phi}{\partial n}|_B = 0$



[9]

境界面の問題 (1)

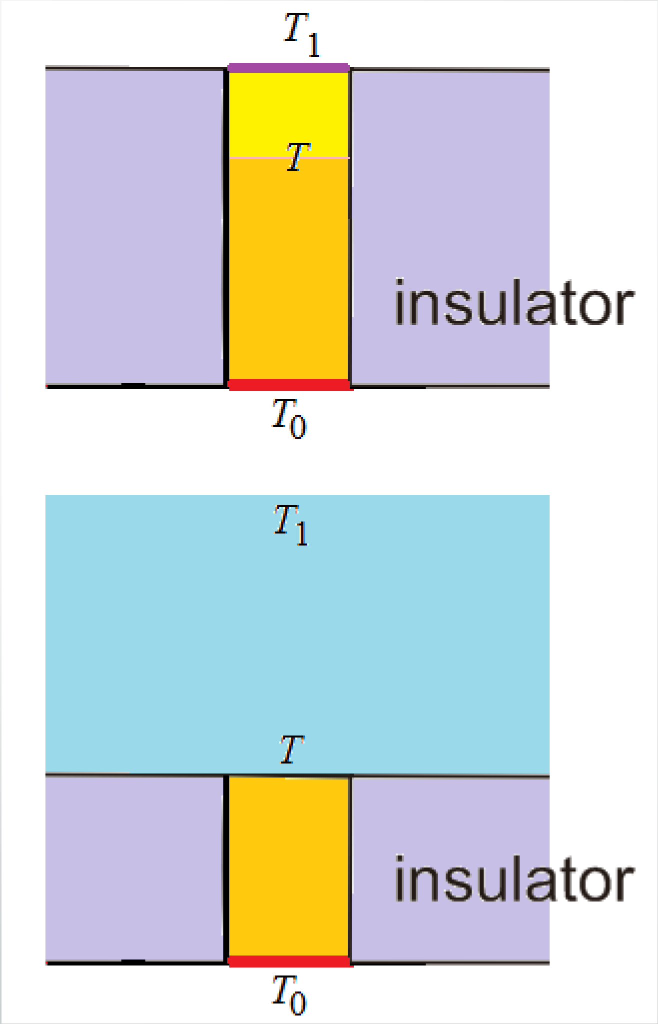
- 異種金属の界面と伝導電子
  - 導体どうしがつながっていれば一つの導体ではないか？
    - めっきが傷つくと錆びるのはなぜ？
    - 金属間に電解質溶液は実在するのか、方便なのか？
  - 金属を内部構造の視点で理解する必要あり [10]
    - 結晶構造・結晶配置の異なる異種金属の界面は原子配置・格子配置が不連続
      - 伝導電子にとって障壁となる
        - 接触電位の生成
    - 連続性の高い界面
      - 結晶格子が近くないとだめ
      - 半導体の pn 接合面で整流作用

境界面の問題(2)

- 異種材料の界面と信号の伝播
  - 電磁波・光
    - 誘電率・屈折率の空間依存性で理解できる [11]
  - 音波
    - 音響インピーダンス（音速/密度）で理解できる

境界面の問題 (3)

- 熱の移動
  - 何を設定するのか？
    - 複数の材料・物質からなる系として扱わなくてよいか？
  - 一次元の層構造・温度一定の境界条件であれば熱フラックスの保存則で
    - T_0, T_1 は一定、T は時間に依存
    - 熱抵抗（熱アドミッタンス）が経験的パラメータ　[12]
  - 端面に気体があれば対流が寄与する
  - 輻射もきく多孔性材料（Loeb, 1954）



IoTとコンピュータシミュレーション

異質な二つ

- IoT がもたらすもの
  - デバイス（製品）の動作状況を把握
    - 膨大な情報 ⇒ ビッグデータ
- 何のために？
  - ユーザーが納得できるだけのメリットが必要
- 負の側面
  - 通信コスト（スマホと同様SIMごとに課金）
  - メンテナンスコスト（ウィルス対策、ハッキング対策）

COMSOL Multiphysics® の出番

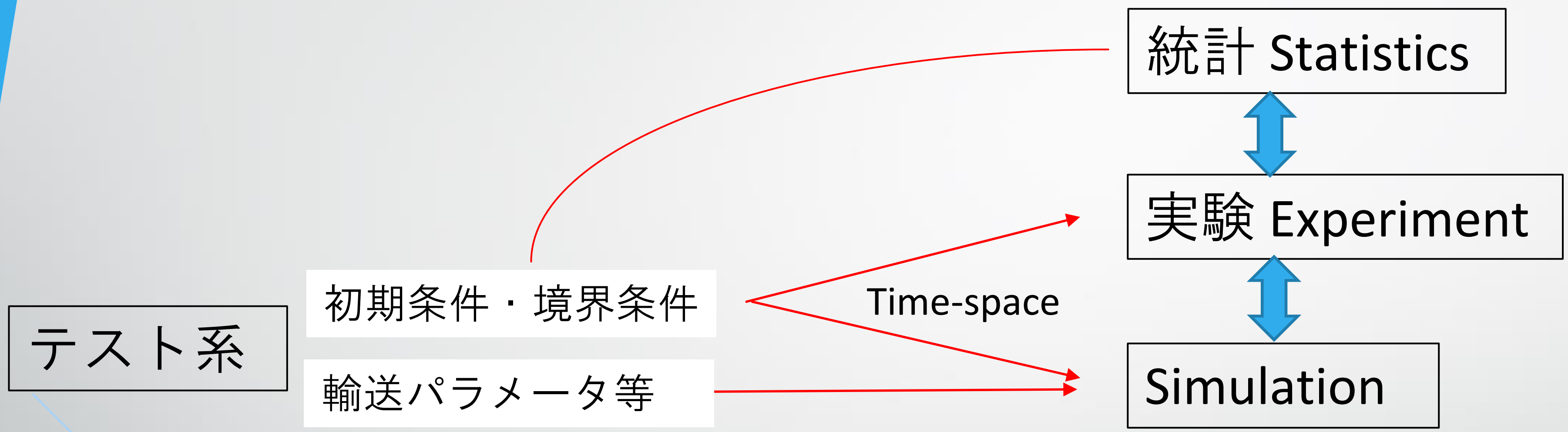
- 連続体モデル＋変化モデル＋複雑な境界条件（形状と変化）
- 少数の任意パラメータ
- 問題を解く
- 実験データとの不一致は生ずる

最適化

現実の正しい理解

[13]
実際は最大・最小問題

最適化とは



- 実測データを**最もよく再現**する数理モデルをみつけること
  - テスト系が仮想的であればモデルは自明（平衡・断熱・可逆・定常・均一, etc）
- 実測データの条件依存性を**最もよく記述**する統計モデルをみつけること
  - 関係性、相関性、依存性、変化速度

最適化のメリット
確かなモデルが構築できれば

- やみくもな実験から効果的・効率的な実験へ
  - コストと時間の節約
- 開発への指針が示される
  - 非現実的なパラメータ値をも使って結果が予測できる
  - IoT導入のビジョンが描ける
- 顧客サービス向上
  - 「実験データがないので･･･」⇒「早速シミュレーションして回答します」

数理モデルの決定

実験データはどのようなシミュレーション計算で説明できるか？
（スカラー量を説明したい場合）

- 数理モデルを選ぶ（陽な関数関係があるとは限らない）
  - 可変パラメータの組$C_1, C_2, \cdots, C_N$ がシミュレーションに含まれる
- シミュレーション結果の組Pを算出する
- Pと実測値Qとの食い違い度Δを計算する
  - 時刻t, 測定点 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_M$における測定量が$Q_1, Q_2, \cdots, Q_M$であれば誤差$\Delta$は
  - $\Delta(C_1, C_2, \cdots, C_N) = \sum_{k=1}^{L} \sum_{i=1}^{M} \frac{[Q_i - P_i(C_1, C_2, \cdots, C_N, t_k)]^2}{\sigma_i^2}$
- Δを最小にするパラメータの組が、そのモデルの枠内でベスト（不採用もある）

統計モデルにおけるパラメータの決定

スカラー量の場合

- x（温度等の実験条件）とy（観測値）の間に数理モデル $y = f(x)$ が成り立つ
  - 関数 fはパラメータの組$C_1, C_2, \cdots, C_N$ を含む
- 観測値は正規分布から有限回のサンプリングで得られたと考える
  - $y_i - f\ (x_i)$ はガウス曲線上の点　確率 $P \propto e^{-(y-f)^2\ /2\sigma^2}$
  - σ^2は分散 variance、σは標準偏差 standard deviation
- 最もリーズナブルな解は、すべての点の確率分布の積を最大にする
  - 誤差 $\Delta(C_1, C_2, \cdots, C_N) = \sum_i \frac{[y_i - f\ (x_i; C_1, C_2, \cdots, C_N)]^2}{\sigma_i^2}$ を最小にする ⇒ 最小二乗法

[14]

統計モデルの最適化

最も広く行われる方法

- 線形モデルで説明できる場合が多い
  - $f = e^{-ax+b}$ は対数を取れば線形になる
    - Excel では「指数関数近似」
  - $\frac{\partial f}{\partial a} = 0, \frac{\partial f}{\partial b} = 0$ によりa, bについての連立一次方程式 ⇒ 原理的には簡単に解ける
- 非線形モデルの場合
  - 何故その関数形を採用するか説明がほしい
  - 様々な逐次近似解法が提案されている

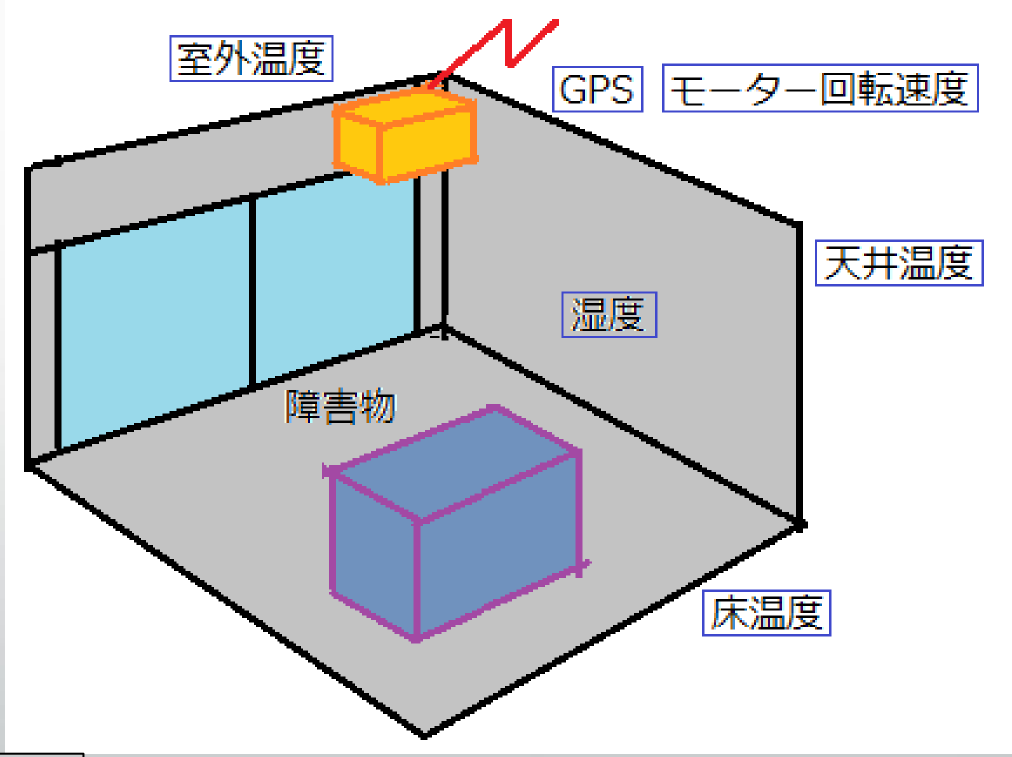
[13, 14]

モデルの構築

- Scopeに入るのは
  - 部分・部品　←　→　全体・（使用中の）最終製品
  - 幾何学的形状、解析的記述　複雑な形状・使用状況
  - 教科書的　経験的

例３ ：部屋の空調

- 障害物がある中で空気と熱が移動
- 壁からの熱伝導を考慮
- 流体モデルを作る
- モデルを解く
- 温度分布を計測して検証
- ユーザーにもっとよい動作条件を提案



Comsol Multiphysics は中間点

例４：結露しない窓サッシ

- ペアガラスのサッシと二重窓のサッシの比較　（寒冷地では愚問）
  - 外気温・室温・室内湿度が地域と建物構造に依存
  - ガラス裏面・サッシ裏面の温度と外気温との関係をあらかじめ計測
  - それを再現するモデルを構築
  - 結露条件も含めてパラメータ依存性を知識データベースに
    - 不一致が現れたらモデルを修正
    - 半導体センサーで結露の IoT化も可能 ⇒ 顧客サービス向上による差別化

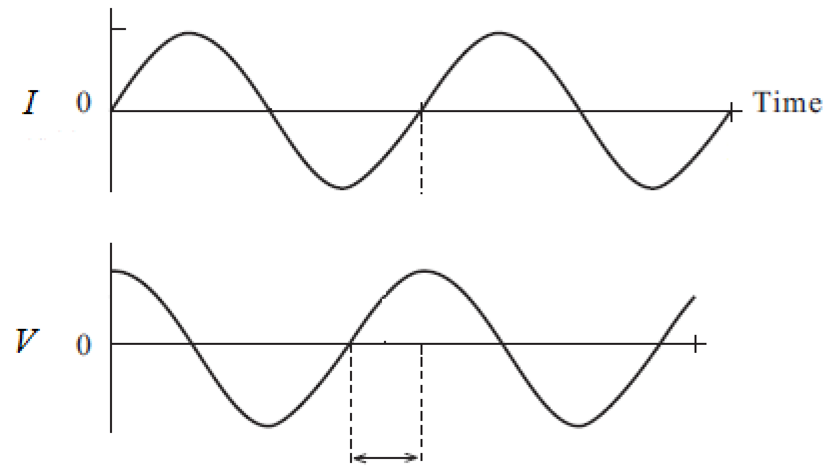
Comsol Multiphysics は中間点

線形であることの意味

- 線形関係・線形演算子 L の一般的定義
  - $L(x_1 + x_2) = L(x_1) + L(x_2),\ L(\lambda x) = \lambda L(x)$
- 実用的には入力 x (t)に対して応答 y(t) が比例する
  - Ohm の法則 ⇒ 抵抗 R があれば $R = \frac{y(t)}{x(t)}$・・・瞬時に応答
  - コンデンサーやソレノイドがあれば応答は遅れる・・・それでも線形という
- 線形応答理論
  - 周波数成分$\tilde{x}(\omega), \tilde{y}(\omega)$ の間に比例関係 $\tilde{y}(\omega)$=$\tilde{h}(\omega)$ $\tilde{x}(\omega)$ が成り立つ
  - tの定義域に応じて$\tilde{x}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} x(t)e^{-i\omega t}dt\,, \tilde{x}(s) = \int_{0}^{\infty} x(t)e^{-st}dt$ [15]

コンデンサーでは電流位相が90度進む

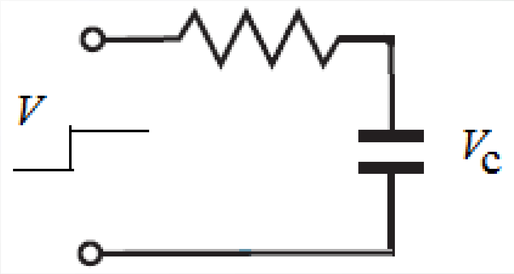
- 基本方程式は $Q = CV \Rightarrow I = C\dfrac{dV}{dt}$
- $V(t) = a\, e^{i\omega_0 t} \Rightarrow I(t) = aC\omega_0 e^{i\omega_0 t + i\frac{\pi}{2}}$



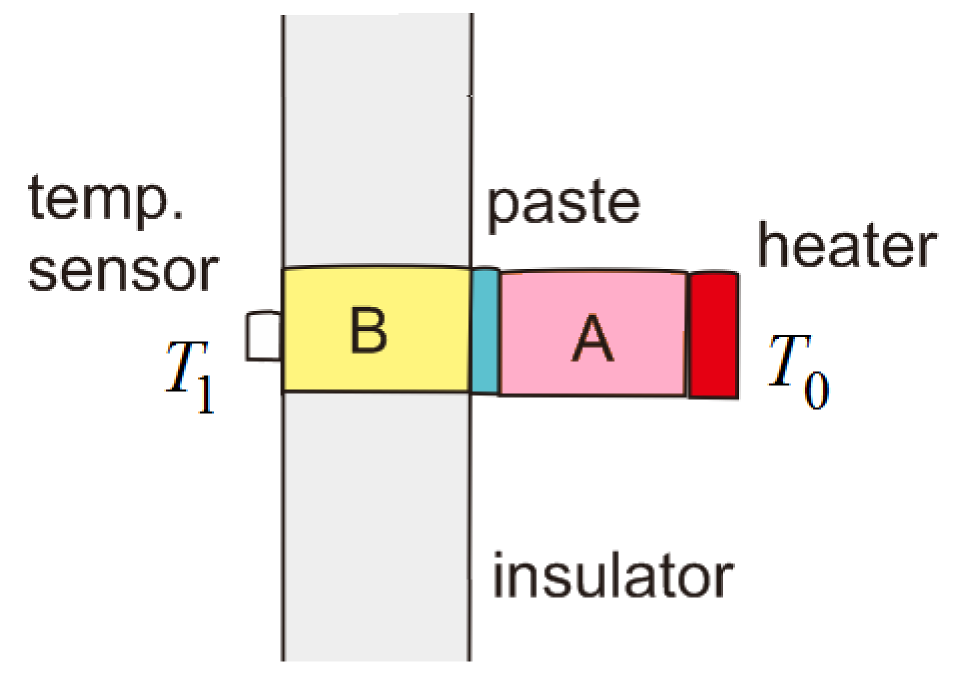
- $\tilde{V}(\omega) = 2\pi a\, \delta(\omega - \omega_0), \tilde{I}(\omega) = 2\pi a C\omega_0 i\, \delta(\omega - \omega_0)$
- 周波数成分の比は $Z(\omega_0) = \dfrac{1}{iC\omega_0}$ ⇒ 定数だから比例関係が成り立つ

コンデンサーの充電には時間がかかる

- 基本方程式は　$RI + V_C = V,\ I = C\frac{dV_C}{dt}$
- $\tilde{V}(s) = \frac{a}{s}, \tilde{I}(\omega) = sC\widetilde{V_C}(s)$
- 解は $\widetilde{V_C}(s) = a\left(\frac{1}{s} - \frac{1}{s+\frac{1}{\tau}}\right),\ \ V_C(t) = a\left(1 - e^{-t/\tau}\right)$
  - $\tau = RC$ は時定数、導線でもRはゼロにならない



例５：時間遅れのある伝熱



- ヒーター温度xとセンサー温度yの関係
  - ペーストの効果は？
- 線形応答 $\tilde{y}(s)$=$\tilde{h}(s)$ $\tilde{x}(s)$を時間領域で
  - $y(t) = \int_0^\infty h(t')x(t-t')dt'$
- 遅れがなければ： $h(t') = A\delta(t') \Leftrightarrow y(t) = Ax(t)$
  - 熱源 $x(t)$の波形は実験者が制御できる
  - 伝熱体から十分離れた遠方では室温

熱源の時間波形

- 定常状態$\tilde{x}(\omega) = A\delta(\omega) = A \Rightarrow \tilde{y}(\omega) = A\tilde{h}(0)\delta(\omega)$
- 階段関数 $x(t) = A\theta(t) \Rightarrow y(t) = A\int_0^t h(t')dt'$
  - $h(t) = \frac{1}{A}\frac{dy(t)}{dt}$
    - コンデンサーの充電形であれば $h(t) = \frac{a}{\tau}e^{-t/\tau} \quad (t > T)$
- 擬似雑音を励起源 [16]
  - $\tilde{h}(\omega)$が短時間で得られる

まとめ

- 実験できないことをコンピュータ上でやってみせるのがシミュレーションの真骨頂
- 嘘っぽいといわれないために理論武装は必要

参考文献

[1] Circuit Cellar (2015.6) p.56 <u-blox]; Circuit Cellar (2016.4) p.40 <relayr>; Circuit Cellar (2016.12) p.32 <Photon>
[2] S. Hayashi, memo.(2017)
[3] 津田孝夫, モンテカルロ法とシミュレーション (1977); 宮武・脇本, 乱数とモンテカルロ法 (1978)
[4] Steinfeld, Francisco & Hase, Chemical Kinetics and Dynamics (Prentice-Hall, 1989)
[5] 林 茂雄,エンジニアのための電気化学(コロナ社, 2012) 3章; 移動現象論入門 (東洋書店, 2007) 12章
[6] Paul, Analysis of Linear Circuits (McGraw-Hill, 1989)
[7] Sargent III, Scully & Lamb, Jr, Laser Physics (Addison-Wesley, 1974) p.46;
Fröberg, Introduction to Numerical Analysis (Addison-Weslry, 1970) Chap.14.
[8]林 茂雄, 移動現象論入門 (東洋書店, 2007) 13章
[9]林 茂雄, 移動現象論入門 (東洋書店, 2007) p.286.
[10]林 茂雄,エンジニアのための電気化学(コロナ社, 2012) 4章.
[11]林 茂雄,エンジニアのための分子分光学入門(コロナ社, 2015) 1, 3章.
[12]林 茂雄, 移動現象論入門 (東洋書店, 2007) p.245
[13] Kowalik & Osborne, 非線形最適化問題 (培風館, 1970)
[14]林 茂雄, Excelによる理工系のための統計学 (東京化学同人, 2016) 11章;
Taylor (林訳), 計測における誤差解析入門(東京化学同人, 2000) 8章
[15] スベシニコフ&ティホノフ, 複素関数論 (綜合図書, 1969)
[16] Lancaster, TTL Cookbook (Sams, 1974) p.277