



計算力学について

北川 浩*

1. はじめに

最近、計算力学 (computational mechanics) という言葉が喧伝されている。研究者集団の組織化が進み、そうした場での交流を通じて方法論の体系化の試みがなされてきており、一つの新しい学問分野の形成が予感される。こうした動きは、計算力学のための高性能コンピュータを国家プロジェクトとして開発すべきであるといった議論まで誘っており、世の常として純粋に学問的動機のみによるものではないことは確かである。とは言うものの、計算力学を自らの専門分野であると自認している研究者は急激に増大しており、そうした人達が生み出す研究成果が、我々の生活に想像以上に大きなインパクトを与えるようになってきている事実がある。第5世代コンピュータの世界が描かれる今日、現状を見るだけでも、近い将来を考慮に入れればなおさらのこと、利用しうるコンピュータ (とそれを中心とする装置) は、我々の理解を越えた、もっと大きな能力を持っているのではないかという思い入れがあり、それがまた、駆動力となっていることも間違いない。

単純に考えてみるに、モデルという自然観に立って自然現象を見る一字義通り、ビジュアルにコンピュータが描き出す画像によって見るということが、自然科学探究の真に有効な方法であると考えられる段階まできているのではなかろうか。ビジュアル・コミュニケーションは我々同志、我々とコンピュータ、我々と自然との間で理解し合うための素晴らしい手段であることを思うとき、ただそれのみでも計算力学は豊かな成果をもたらすに違いないと確信できるのだが。

*北川 浩 (Hiroshi KITAGAWA), 大阪大学工学部, 機械工学科, 助教授, 工学博士, 塑性力学

さてそこで、塑性力学というごく狭い分野での研究体験を通してではあるが、ふくらむ一方の計算力学への期待が良き実を結ぶものなのかどうかについて、一考察を試みてみる。

2. 計算力学という分野

コンピュータを中心としたシミュレータを構築して、物理現象を数値処理過程上でシミュレートすることにより理解しようとする工学、理学の分野を計算力学ということができよう¹⁾。その対象は、固体、流体を問わず、原子、分子の系から大気、海流、地殻、そして宇宙規模の現象に及ぶ。法則性のあるところには数学があると考え、数値的処理において法則性を確認するというこの計算力学のねらいは、Leibnizが考えた普遍学の現代的意味での達成にあると言えようか。微分方程式の初期値—境界値問題の大規模な数値解析にすぎないとするのは誤った認識である。計算力学は、応用力学、近似のための数学理論、数値解析、コンピュータ関連の諸科学を基盤として成立しているのであるが、こうした、いわゆる学際的分野にありがちな馴れ合い的あいまいさは完全に払拭されており、それ自体で独立した、豊かな知識をもたらす研究分野であると認識されている²⁾。

3. 計算力学成立の背景

計算力学は、(1)物理現象の数学モデル化、(2)コンピュータ内の数値処理過程へ置き換えるためのアルゴリズム構築と実行、という2段階から構成されている。

モデルによって考えるということ、そしてそれが必然的に数学モデルになるということは、自然科学の厳密な方法の基礎として広く認められていることであるが、歴史的時間の座標を持ち込んで、その時々現実に有効なものであ

り得たかを問うとき、常に何らかのずれが存在していたことに気付く。連続体力学を例に取ってみるに、まず力学の問題を解析的に扱うこと—解析力学—の基礎を作ったのは Euler(1736) であり、それを完成の域にまで引き上げたのは Lagrange (1788) であったが、科学には“事実を思考の中に模写し予写することで、経験と置きかわる”という経験を節約する使命があると考えた Mach は、主著「力学—力学の批判的発展史」の中でそのことを紹介し、Newton の力学の幾何学性と対比して解析力学の意義を説き、それを厳密には計算力学と呼ぶべきであると述べていることを記しておこう。

さて、連続体の場に対する数理的記述の理論は、それに続く18世紀から19世紀の初めにかけての時期に Coulomb—Navier—Poisson—Cauchy と受け継がれて完成しており*)、以来現在

*) 中でも、応力原理を導き、応力テンソルを用いて運動方程式を記述した Cauchy の業績 (1823) は大きい。

に至るまでに、より広い現象を包含するための修正、拡張はなされてきているものの、基本的な枠組は変わっていない。しかしながら Bernoulli, Euler 以来の水力学と、はり・棒の理論の精密化、一般化を軸として進んだこの基礎理論成立の流れを見て気付くことは、まぎれもなく当時の社会的要請 (工学的要請) に応えようとする知的土壌の中で作り出されたものでありながら、続く時代においても、閉じた形の解が得られるごく限られたケースを除いては、未知の現象を予見することを通じて有効性を発揮するということは少なかったことである。

この歴史的皮肉とも取れる状況に果敢に挑んだのは Richardson (1910) であった。ダム の強度、気象の予測のために、数値計算の手段としては人力に頼るほかになかったにもかかわらず、一見無謀とも思われる程に大規模な、差分法にもとづく数値解析を試みている。力学理論の予見性に強い信頼が寄せられていたことが推

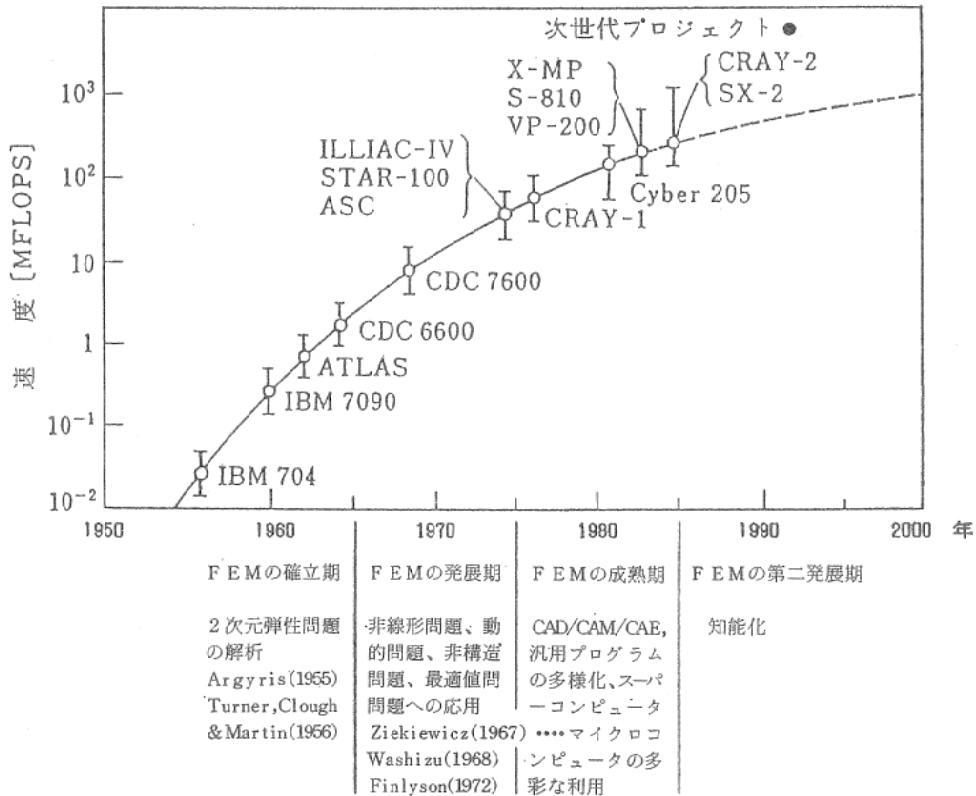


図1 コンピュータの速度と有限要素法 (FEM) の変遷 (図は文献(4)による)

定できる*)。

こうした状況の改善に決定的な影響を与えたのは、コンピュータの出現とその処理能力の急速な向上であった。今日の計算力学の解析手法に重要な役割を果たしている有限要素法 (FEM) の変遷にコンピュータの速度を重ねて見ると、このことがよくわかる (図1)。FEM の歴史 30年を 10年ごとの 3 期に分けると、その間にコンピュータの速度がほぼ 10倍ずつ向上するのに並行して、FEM の利用形態が質的な変化をとげている。今日では特に、複雑な物理系の挙動の総合的な把握が可能なること、実験等で実現することが不可能な条件下の現象が調べられることが評価され、実利あるものとも受け止められている。そして、スーパーコンピュータや超並列計算機の開発など、コンピュータの高性能化を促す駆動力をともなっている。

4. 計算力学に内在する問題点

孤立させた理想状態についての考察にもとづく内・外挿的な検討では、線形、局所的、可逆的 (もしくは定常的) といった枠を越えて、現象を理解することはできない。系を構成する要素間に強い相互作用があり、非線形性、不可逆性を伴うような現象に対する場合、分析的に明晰であり、かつ総合的なアプローチが必要とされる。それに対して、系をブラックボックスと考えて、パラメータを適当に同定するといった、いわば形而上学的方法では駄目で、計算力学こそがその役を担い得るのではなからうか。

ところでしかし、ここまで積極的な支持をえてしまうと、真実を見誤らないためには、今度は、内在する問題点に目を向けておかなければならない。

コンピュータが描き出す世界、それは現実そのものでは決してない。それは、モデルという解析者の主観を通して見た世界像でしかない。では、その普遍性はどのようにして問うのであろうか。科学的方法論であるというとき、その枠組の中で自己の正しさを実証しうる完結性を

備えているべきであると考えるが、計算力学はどうなのか。

やはり連続体力学を例にとろう。数学的には実数の集合として扱われるこのモデルでは、物理的には、十分に多数の物質の集りに対する十分に長い時間の平均値として定義される量が場が記述できる一微細構造を無視できる一として幾何学的条件式、平衡方程式、そして構成式を定式化することでもって、完結した支配方程式系を組み立てる。熱力学の言葉で言えば、局所平衡状態が成立していることを前提とした扱いであり、微細構造が取り得る状態を区別しないという意味からは、いわば局所エントロピ最大モデルと呼ぶべきものであって、ある点でのある瞬間での現象といった扱いをするものの、モデルに付随するあるスケール内は何も見えない、ピントのぼけた像を見ていることになっている。これより平衡状態 (そのような理想状態が存在しうるかどうかとも問題であるが) からわずかに離れた、線形的摂動解で近似できるような場はともかく、非平衡性こそが重要となるような、また、ミクロスケールでの不連続性が重要となるような現象については、方法論的困難にぶつかることは必定となる。そして現実の問題の一つ一つに対処できる、普遍性のある構成式の定式化の方法論も、未だ確立していないこともある。

斯くして、連続体モデルで現実の現象を的確に反映し得るのかという疑問が生じ、加うるに作られた方程式系に対して、解の唯一性が証明されず、存在性が証明できない場合 (大部分の場合がそうであるが)、得られる解は、たとえそれが厳密なものであっても、そのまま受け入れられるであろうかという問題が現われる。

さらに、コンピュータ処理のために必然的に行われる離散化と呼ばれる有限化処理に伴って、本来、無限小の極限状態で正当化される条件を有限で用いるために、新たにモデルに持ち込まれる微視的構造一平衡条件、適合 (連続) 条件、構成式の近似の意味が有限化に伴って分離してくるために生じる一の問題がある。離散化数値誤差のためや、離散化の結果として定まる分解能と連続体モデルに付随する特性寸法、

*) 必ずしも成功しなかった Richardson の試みをめぐって、幾つかの興味深いエピソードが残されている³⁴⁾。

特性時間，および物体の形状寸法とのかかわりから生じるものも含めて考える必要があるが，新たに持ち込まれた微視的構造の故に数値シミュレーション上で種々のイリジショナルな状態が作り出される可能性が大いにある．このように見えてくると，計算力学によって得られる結果に対しては，必ず信頼性の検証が必要であることがわかる．さて，それは可能なことであろうか．

これについては，つぎのようなことが考えられるのみである．(1)解析的厳密解を利用する検証，(2)実験結果と比較することによる検証．後者については，実際に計測しにくい部分の追跡はコンピュータによる解析によるといった，数値シミュレーションと実験とを組み合わせたシミュレータを作り，テストする方法も考えられよう．しかし，いずれも何とも心細い方法である．計算力学が自己完結的な独立した体系として位置付けられていくための方途は，まだ見い出されていないと言ってよい．多分，これまでに蓄積されてきた膨大な経験を生かし，また自己学習をしていくような知能化したシミュレータを作ることが，一つの解決策となるであろう．

指摘すべき問題点は，これ以外にも，なお幾つか残されている．コンピュータの速度が十分でない．非数値データの処理，非定形的処理のための機能が低い，ソフトウェアの体系が利用者フレンドリィでない……．コンピュータの能力の限界がそろそろ見え，また，ソフトウェアを開発し，また開発されたものの機能を維持

していくことの難しさが指摘されていることを考えると，これらも看過できる問題ではない．しかし，こうしたことに対する見通しは筆者の手に余ることであり，許された紙幅も尽きているので，急いで結ぶことにしたい．

5. むすびに

モデルに近い現実を作り出すのが工学であり，現実に近いモデルを作り出すのが理学であると言えば，あまりに2元論的に過ぎようか．自然を理解し，その中で調和的に共存していくための技術を獲得していくには，互いに補完的な両者の融合は重要であり，最近の計算力学の展開は，コンピュータの利用を媒介として，その可能性が開けてきたことを示唆していると受けとめたい．繰返すことになるが，モデルで考えるということは，解析者が主体的に行動することである．その自覚を持ちつつ，それより生じる責任を回避することなく行動すること，そして研ぎ澄まされた自然を見る目と，豊かな想像力を持ち続けることが必要であろう．軽薄な小手先のコンピュータ利用技術を追いかけることは厳に慎みたいものである．

引用文献

- 1) T.J.R. Hughes, IACM Bulletin, 1-1 (1985), p. 6.
- 2) J.T. Oden and K.J. Bathe, Appl. Mech. Rev., 31-8 (1978), p. 1053.
- 3) O.C. Zienkiewicz, IACM Bulletin, 1-1 (1985), p. 3.
- 4) 村田，ほか，“スーパーコンピュータ”，(1985)，丸善．