減衰作用を含む拡散現象のオブジェクト指向シミュレーション

Object-oriented Simulation for Diffusion phenomenon with Damping

発表者:夏 イ　　指導教員:坪井 一洋

1 はじめに

拡散（diffusion）とは，粒子，熱，運動量などが散らばり，広がる物理現象である．フィックの拡散法則から導かれた拡散方程式は様々な拡散現象を表すことができる．例えば，生物学では， 動物の肺胞においてガスを交換するため，肺胞膜の両側での分圧差により酸素が内側の血液中に拡散し，二酸化炭素が外側に拡散する[1]．このような拡散現象は拡散方程式と関わっていることが明らかになっている．

本研究では，減衰項と入力を含む拡散方程式をオブジェクト指向方法論で分析し，全領域の拡散を複数の部分領域から形成できる領域オブジェクトを設計し，実装することで，減衰作用と入力を含んだ拡散現象を効率的にシミュレーションすることを目的とする．

2 減衰項を含む拡散方程式

拡散方程式は重要な放物型偏微分方程式のひとつである．1次元の拡散方程式に減衰項と入力を付加した方程式を式（1）に示す．

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \beta U + I \qquad (1)$$

ここで， U は濃度，t は時間，αは拡散係数，β は減衰係数，Iは外界からの入力である．

式（1）を差分化した結果を式（2）に示す．x 方向の間隔をΔxとし，時間間隔をΔt とする．時刻 $n\Delta t$ に，位置 $i\Delta x$ での U の値をU_i^nとする．

$$U_i^{n+1} = (1-\beta\cdot\Delta t)U_i^n + I\cdot\Delta t + \alpha\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}\left(U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n\right) \qquad (2)$$

式（2）より，新しい時間ステップのU_i^{n+1}の値は前の時間ステップのU_i^nの値から計算できる．

3 安定性

減衰項を含む拡散方程式を差分化，特に陽解法を用いて計算する場合，拡散係数αと減衰係数βの値により計算過程で数値的な不安定化が生じる可能性がある．そのため，フォン・ノイマンの安定性解析を用いる必要がある．解析を安定に進めるため，式(3)に示したフォン・ノイマンの安定性条件に満たさなければならない．

$$0.0 < \beta\cdot\Delta t + 4\alpha\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}\sin^2\theta < 2.0 \qquad (3)$$

式（3）は式（4）と式（5）に分けることができる．

$$\beta + \frac{4\alpha\sin^2\theta}{(\Delta x)^2} > 0 \qquad (4)$$

$$0.0 < \Delta t < \frac{2.0}{\beta + 4\alpha\sin^2\theta/(\Delta x)^2} \qquad (5)$$

式（4）はフォン・ノイマンの安定性条件に合う時間刻みΔt が存在するための十分条件であり，$\sin^2\theta$ の最小値が 0 なので，式（4）が成り立つために，β は正でなければならない．また，式（4）が成り立つ場合，式（5）より，フォン・ノイマンの安定性条件を満たす時間刻みΔt の範囲が決まる．それはαの符号より以下の二つの場合に分けられる．

①β>0 かつα>0 の場合：フォン・ノイマンの安定性条件を満たす時間刻みΔt は式（6）の示した範囲で存在する．

$$0.0 < \Delta t < 2.0/[\beta + 4\alpha/(\Delta x)^2] \qquad (6)$$

②β>0 かつα<0 の場合：$\beta > -4\alpha/(\Delta x)^2$ の時，フォン・ノイマンの安定性条件を満たす時間刻みΔt は式（7）の示した範囲で存在する．

$$0.0 < \Delta t < 2.0/\beta \qquad (7)$$

4 オブジェクト指向方法論と領域オブジェクト

オブジェクト指向方法論とは，オブジェクト間の相互作用として，システムの振る舞いをとらえる考え方である．オブジェクトとは，属性（データ）と操作（メソッド）を内部に一体化したものである[2]．

減衰作用と入力を含んだ 1 次元領域での拡散をシミュレーションするために，領域分割法を用いる．領域分割法とは，全領域を幾つの部分領域に分割するという考え方である[3]．一つの部分領域を一つのオブジェクトとみると，個々の領域オブジェクトは拡散係数などの属性及び拡散や減衰などの操作を持つ．それぞれの部分領域オブジェクトがほかの部分領域オブジェクトと相互作用しながら，自律して拡散，減衰するという視点から，全領域の振る舞いをとらえることができる[4]．

本研究で，領域オブジェクトのテンプレートとして Domain クラスを設計した．Domain クラスは拡散係数αや減衰係数βなどの属性と基礎方程式を計算する操作を持つ．また，複数の領域オブジェクトを制御するため，WholeDomain クラスを設計した．WholeDomain クラスは複数の Domain のインスタンスを生成し，各領域オブジェクトの安定性を判断し，相互作用させ，計算結果を表示するなどの操作を持つ．

5 数値シミュレーション

設計した領域オブジェクトを java 言語で実装して，異なる全体形状を複数の領域オブジェクトから形成することで数値シミュレーションを行った．

5. 1 直線型全領域におけるシミュレーション

図 1 は直線型の全領域を3つの領域オブジェクトから形成した様子を示している．

部分領域1	部分領域2	部分領域3

図 1. 直線型全領域の形成

図 2-4 は図 1 のような全領域の各部分領域における濃度の時間変化を示した．横軸は位置 xで，縦軸は濃度 Uである．部分領域1の最左と部分領域3の最右の境界点はディリクレ境界条件になっている．また，接合境界点には接合境界条件を用いる．

図2から，部分領域1での各点の Uの値は拡散，減衰および接合している隣の部分領域との相互作用より，時間とともに変化する．図3から，t=0.0 の時の各点の

Uの値が 0.0 で，接合している領域オブジェクトの拡散の影響で，時間とともに濃度が徐々に大きくなり，次に入力がなく，自身の拡散より，U の値が下がる傾向が現れた．図4では，部分領域3の配置と初期条件が部分領域1と異なり，特に減衰係数 β は領域オブジェク1の減衰係数より小さいので，U の値の下がる速度は部分領域1より遅いことが明らかである．

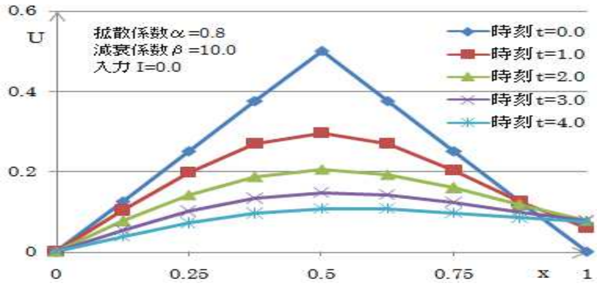

図 2. 直線型全領域の部分領域1の U 値の変化

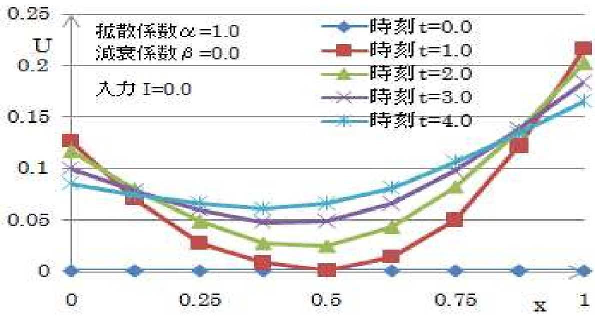

図 3. 直線型全領域の部分領域 2 の U 値の変化

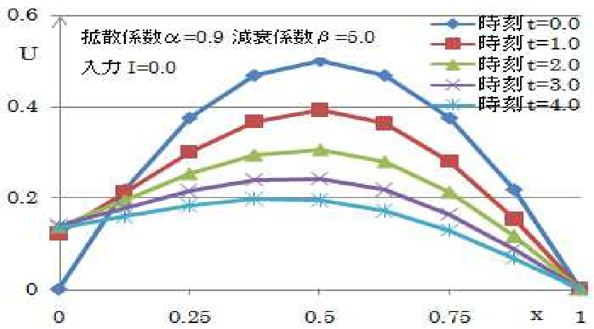

図 4. 直線型全領域の部分領域 3 の U 値の変化

5．2　三角形の全領域におけるシミュレーション

図 5 は三角形の全領域を3つの領域オブジェクトから形成した例である．

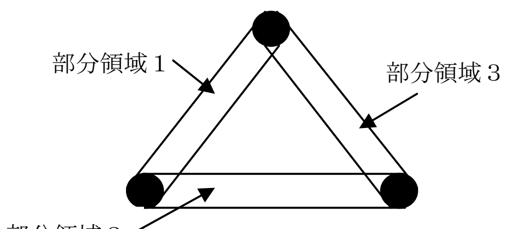

図 5. 三角形の全領域

図 6-8 は図 5 のような全領域の各部分領域における濃度の時間変化を示した．それぞれの領域オブジェクトの配置と初期条件は 5．1 のシミュレーションの各領域オブジェクトと同様である．また，図6と図8から，三角形の結合形状なので，5．1 の直線型接合と異なり，それぞれの部分領域がほかの2つの部分領域と接合し，部分領域1と部分領域3の各点の拡散，減衰の過程と 5.1 との区別は明らかである．この区別は主に部分領域の両端の Uの値の設定方法で表現できる．そして，図7で示した部分領域2の各点の Uの変化の過程は図3が示した過程と似て，隣の部分領域の拡散による影響は明らかである．

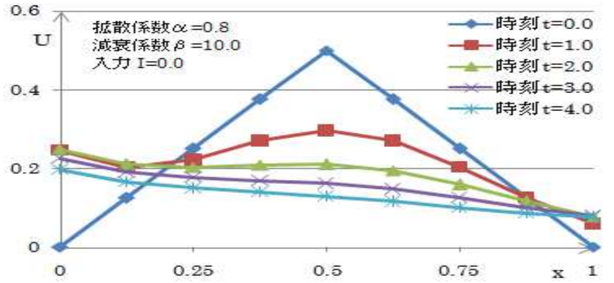

図 6. 三角形全領域の部分領域1の U 値の変化

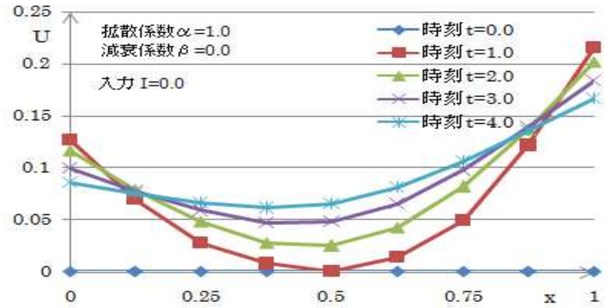

図 7. 三角形全領域の部分領域 2 の U 値の変化

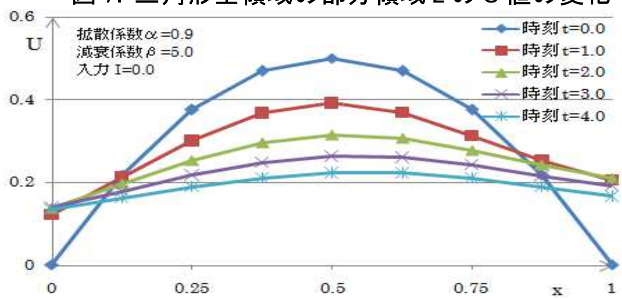

図 8. 三角形全領域の部分領域 3 の U 値の変化

6　まとめと今後の課題

減衰作用と入力を含む拡散現象の数値シミュレーションを効率的に行うために，オブジェクト指向方法論に基づいて，領域オブジェクトを設計した．領域オブジェクトの重要な特徴として安定性を保証するため，基礎方程式の差分近似式に対するフォン・ノイマンの安定性解析を行った．これより，減衰係数は常に正ということおよび拡散係数の符号によって，時間刻みの上限値が異なることを示した．設計した領域オブジェクトをjava言語で実装し，複数の異なる属性値を持つ領域オブジェクトの連結形状を変えて数値シミュレーションを行い，幾つかの結果を得た．

今後の課題として，今回設計した 1 次元の領域オブジェクトを基にして，2次元，3次元に拡張する．

参考文献

[1]玄番宗一:「機能生態学」，　（化学同人，2008）
[2]磯田定宏:「オブジェクト指向モデリング」，(コロナ社，1998)
[3]辛島昌俊:多重連接領域における拡散方程式のオブジェクト指向シミュレーション，茨城大学工学部知能システム工学科平成22年度卒業研究論文（2010）
[4]籠島高:計算流体力学における領域分割法のオブジェクト化に関する研究，　茨城大学工学部システム工学科平成 11 年度卒業研究論文（1999）