

# 多重連結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

## Object-oriented simulation with diffusion equation in multiply-connected domain

発表者: 辛島昌俊

指導教員: 坪井一洋

### 1 はじめに

自然界にある多くの現象は、諸量の変化率を含む微分方程式、特に、未知数が2個以上の独立変数に依存する偏微分方程式で記述される。最も基本的かつ重要な放物型偏微分方程式のひとつとして拡散方程式がある。

拡散方程式は拡散現象を表す。医療分野においては、MRI(核磁気共鳴画像法)で通常見ているものは、ブラウン運動で見えるような微視的な水分子の不規則な運動の拡散現象である[1]。また、抑制性伝達物質である GABA(γ-アミノ酪酸)において、抑制性神経伝達効率の制御に神経細胞膜上の GABA 受容体の側方拡散が関わっていることが明らかになっている[2]。

本研究では、上記に示したような拡散現象を表す拡散方程式を効率的に解く方法として、オブジェクト指向方法論を用いる。領域分割法[3]のオブジェクト指向表現である領域オブジェクトを拡散方程式に適用し、多重連結領域でのシミュレーションを行うことを目的とする。

### 2 拡散方程式

2次元の拡散方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right), \quad (1)$$

ここで  $C$  は濃度、 $D$  は拡散係数である。

離散化の手法として、時間  $t$  には前進差分を用い、空間点  $x, y$  で2次精度中央差分を用いる。新しい時間ステップの濃度場は古い時間ステップの値から陽的に計算できる。式(1)を差分化した結果が式(2)である。

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^n + \Delta t D \left( \frac{C_{i+1,j}^n + C_{i-1,j}^n - 2C_{i,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{C_{i,j+1}^n + C_{i,j-1}^n - 2C_{i,j}^n}{(\Delta y)^2} \right), \quad (2)$$

ここで  $x, y$  方向は  $\Delta x, \Delta y$  間隔、時間  $t$  は  $\Delta t$  間隔とし、時刻  $n \Delta t$  での位置  $(i \Delta x, j \Delta y)$  の  $C$  の値を  $C_{i,j}^n$  とする。

### 3 領域オブジェクト

#### 3.1 オブジェクト指向方法論

オブジェクト指向方法論はオブジェクトをソフトウェアの基本要素とし、個々のオブジェクトを定義することでシステム全体を記述する考え方である[4]。また、属性(データ)と操作(メソッド)をオブジェクト内部に一体化している。

今回、拡散方程式を解くために用いる領域分割法は、複雑な形状を部分領域に分割する。分割された各部分領域は物理量を持ち、物理量に適した境界条件の設定や基礎方程式に基づく計算を行うといったすべての部分領域に共通した処理を持つ[3]。これらの共通した性質を持つ部分領域をオブジェクトとして定義し、これを領域オブジェクトと呼ぶ。

#### 3.2 クラスの設計

クラスとして WholeDiffuse クラスと Diffuse クラスを設計した。WholeDiffuse クラスは Diffuse クラスのインスタンスを生成し、各領域オブジェクトが計算した結果を表示する。Diffuse クラスは境界条件を設定し、拡散方程式の計算を行う。

境界条件として、ディリクレ境界条件、ノイマン境界条件、接合境界条件、周期境界条件を設定した。周期境界条件を用いることにより、有限な領域を擬似的に無限領域として扱うことができる。

これらのクラス図を図1に、オブジェクト図の例を図2に示す。

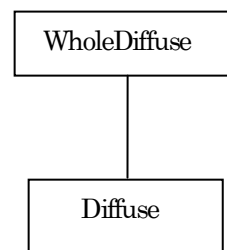


図1. クラス図

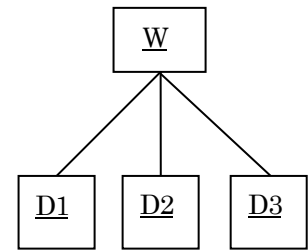


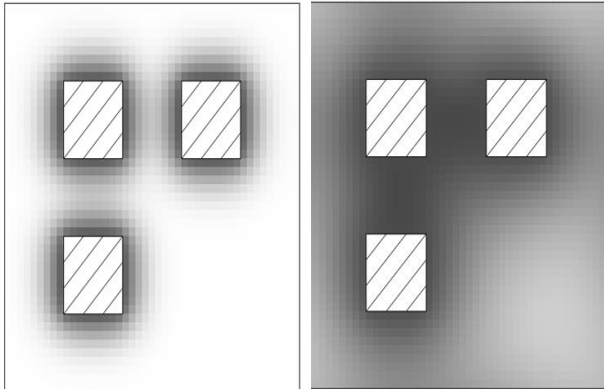
図2. オブジェクト図

### 4 計算結果

#### 4.1 多重連結領域

多重連結領域として22個の領域オブジェクトに対し、拡

散物質を3個配置した領域を設定した。拡散係数を1とする。拡散物質は常に一定値であり、周辺領域は周期境界条件となっている。計算結果を図4に示す。斜線部分の領域は拡散物質を表し、色が濃いほど濃度が高くなっている。図より、ステップ数が進むにつれて拡散が広がっていく様子が分かる。



(a) ステップ数 100 (b) ステップ数 1200

図3. 多重連結領域での濃度拡散

#### 4.2 経路形状の異なる領域での拡散

同じ条件下における直線型領域とコの字型領域の拡散速度について比較し検証した。それぞれの領域を図4と図5に示す。拡散係数を1とし、領域オブジェクトの初期濃度を0、拡散物質の濃度を100とする。終端領域の境界条件は濃度0であり、周辺領域はノイマン境界条件となっている。また、斜線部分の領域は拡散物質を表し、矢印は拡散が進む方向を表している。図中の丸印の地点はともに拡散源からの平均距離は等しい。この地点における濃度の経時変化を図6に示す。

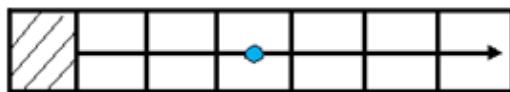


図4. 直線型領域

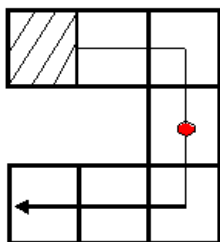


図5. コの字型領域

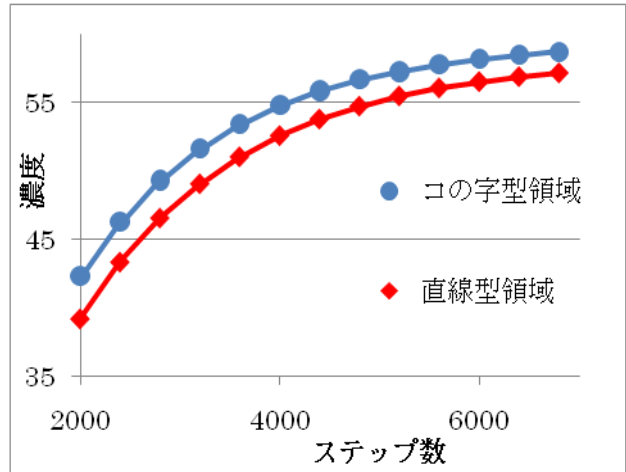


図6. 濃度の経時変化

図の結果は計算を始めてから2000ステップから7000ステップまでの濃度を表したものである。直線型領域に比べて、コの字型領域の方が早く拡散が進んでいることが分かる。このことは拡散経路の形状の違いが拡散の速さに影響することを示している。3000ステップ時刻で2.66程度、7000ステップ時刻で1.545程度の濃度差が表れた。7000ステップを超えると濃度差はほぼ一定となる。つまり、拡散経路が複雑になるほど拡散速度が速くなることが分かった。今回のシミュレーション結果は湖のような複雑な構造をもつ領域内での拡散現象の重要性を示唆している。

#### 5 まとめと今後の課題

多重連結領域内での拡散現象の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拡散方程式に対する領域オブジェクトを設計した。

領域オブジェクトの数や配置を変えることでいくつかのシミュレーション結果が得られ、領域オブジェクトの有用性が確認できた。特に1次元的な拡散において拡散経路の形状が拡散速度に影響することが分かった。

今後の課題として、拡散経路の異なる領域によるシミュレーション結果を基にした新たなシミュレーションの考案、また、より抽象化されたクラス的设计やインタフェースの充実が挙げられる。

#### 参考文献

- [1] 小林昌幸: 『MRI 拡散強調像の有用性』  
<http://www.city.hiroshima.med.or.jp>
- [2] 独立行政法人科学技術振興機構(JST)  
<http://www.jst.go.jp/press.html>
- [3] 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年度卒業論文(1999)
- [4] 磯田定宏: 『オブジェクト指向モデリング』(コロナ社, 1998)