

流れの方程式のオブジェクトベース一貫モデリング と直接シミュレーションの実現

島山正行

茨城大学工学部情報工学科

流れを表現している偏微分（・重積分）方程式、本論文ではナビエ Stokes 方程式とボルツマン方程式、で表される流れの物理現象を、流れの方程式から出発してシミュレーションを駆動させる方法をオブジェクトベース一貫モデリングの方針に基づいて試みた。その結果として偏微分（・重積分）方程式が表現している流れ現象の直接シミュレーションを実現する方式を考案・開発した。それは、まず、流れの方程式自体を構築したモデリング過程を逆進し（リバーズ・モデリングし）、物理的な流れ現象と数学的な方程式の関係を、方程式の各項やその更に詳細にまで立ち入って解明し・関係づけ・再構成する。次に、その時点で解明されたモデル化単位とその構造、相互作用の力学的関係、等のいわばシミュレーションモデルを一貫再モデリング過程の出発点（対象世界）とすることで、準オブジェクトベース一貫モデリング過程を成立させることが可能なことを確認した。この件の裏付けとしては、一般化された理論的な検証をする代わりに、流れの方程式、ナビエ Stokes 方程式、ボルツマン方程式の二種についてこの方法を適用し、上記の目論見に近い成果を得たことで代替した。本方法を用いたシミュレーションは「流れの方程式が表している物理現象」の直接シミュレーションに当たる。

Object-Based Consistent Modeling for Partial Differential Equations of Fluid Flow, and Realization of Direct Simulation

Masayuki Hatakeyama

Ibaraki University

The aim of the present study is to realize the consistent modeling methodology to realize the direct simulations for the partial differential (and integral) equations in the field of the fluid flow. In the past studies, we have developed the peculiar modeling methodology that fits for analyzing the natural phenomena or the engineering targets. We call this methodology the Object-based consistent modeling architecture. We have extended this modeling methodology that are able to be applied to the partial differential (and integral) equations of the fluid flow problem, and we have succeeded. Then, we have got a new extended method to simulate the the partial differential (and integral) equations in the field of the fluid flow.

1 まえがき

我々の研究グループにおいては、「オブジェクトベース一貫モデリング方法論（OB一貫モデリング方法論）」[1][2]を用いて物と一対一対応したモデル化単位である“ものオブジェクト”を基本の再現モデル単位とした「オブジェクトベース（OB）・シミュレーション」を実現している[1][3]。このモデルは切り出された“もの”をモデリングの直接基本単位にした実世界の直接シミュレーションを実現したものである。しかし、シミュレーションとしては物理的な実世界直接のみならず、偏微分方程式等で表された現象のシミュレーションも数多く研究されており[4][5]、研究量としてはそちらが圧倒的に多いともいえる。そこで、OB一貫モデリング法を多少拡張する（あるいは枠組を緩める）ことで偏微分方程式を用いた場合のオブジェクトベース・シミュレーションが実現可能になるのではないかと考えて、これを試みた。

この方式のシミュレーションは「偏微分方程式が表現している物理現象の直接シミュレーション」というべきものになるはずである。ただし、従来からある偏微分方程式のシミュレーションも何等かの現象のかなり精密なモデルであることが当然多いはずであり、その限りにおいて偏微分方程式を（直接）シミュレーションするという企ては意味を持つ。実世界（本論文では対象世界）の直接シミュレーションと偏微分方程式の直接シミュレーション（実現できたと仮定して）との比較を対象世界の再現モデルの表現精度とその実際のシミュレーション実現の難易という点に焦点を当てた場合の諸特徴の比較は、次のようであろうと考えた。

対象世界直接シミュレーション

長所：対象世界の“もの”に一対一対応のモデル化がその当初から可能で、新現象発見型シミュレーションが可能になる可能性が偏微分方程式シミュレーションの場合に比べて少なくともかなり大きい。限りなく対象世界の表現に近づく超高精度型シミュレーションの可能性もある。

短所：モデル化をミスの可能性が偏微分方程式が予め出来ている場合よりも多いし、ミスに気づきにくい。

偏微分方程式の直接シミュレーション

長所：既に十分に検証されたモデル化が出来ているので失敗が少ない。ある程度の精度のシミュレーションは確実に保証される場合が多い。モデリング（プログラミング）作業手順の道筋は対象世界直接よりも遥かに確実かつ明確に見える。

短所：その方程式の表現精度以上の現象は見つかりようが無い。例えば、線形化された方程式では非線形現象の出現の可能性はない。従ってモデル表現精度の悪いシミュレーションになる可能性がある。

そこで我々は、オブジェクトベースシミュレーションの途中において、まずモデル化を逆進（リバースモデリング）させ、偏微分方程式を分析モデリング過程[1][2]の何処かのモデリング段階、できれば概念モデリング段階、悪くとも論理モデリング段階、にまで戻すことを考えた。次にそのモデリング段階で決めることが出来る筈の準オブジェクトベースモデル（後述）を何等化の方法で構築し、それ以降も準オブジェクトベース的なモデルの変換（モデリング過程）を一貫して続けて行くことで準オブジェクトベース的なモデリング過程に基づく偏微分方程式のシミュレーションが可能になるのではないかとこのアイデアを構想した。これを流れのある分野の問題に適用することでそのアイデアの裏付けを行うことを企てた。

偏微分方程式を起点とするシミュレーションには実際上大きなメリットがついている。それは、オブジェクトベースモデルのメソッドに当たる部分やデータ構造に当たる部分が例えば形式的なオブジェクトの離散化作業等によって自然にモデリングの道筋が得られてしまうという点である。これはもちろん逆に、その方式のモデリングに従ったメソッド（プログラム）実装に限定されてしまうデメリットを持つが。しかし、現実にはむしろ、偏微分方程式を差分方程

式化なり有限要素化なりをして、それ以降のモデル化、特にオブジェクトのメソッドのモデル化から実装までの過程で既存の知識体系を用いれば簡単かつ確実に分かる、というメリットは大きい。なぜならこれらに関しては明確かつ詳細にわたる整備された形式的方法及び情報（意味付けされ評価済みのデータ）が極めて詳細かつ豊富に存在するという事情がある [4][5]。そこで精度の低下の可能性、新現象発見型シミュレーションから外れる可能性があるという欠点をもつことを充分考慮に入れて用いるならば、価値のあるモデル化の方法の一つで有り得ると評価できる。

2 準OBモデリング法に基づくシミュレーション

2.1 リバースモデリングと準OBモデリングの方法

偏微分方程式のオブジェクトベース・シミュレーションは、通常のオブジェクトベースモデリングの方式 [1][2] から敷衍（類推）して次のように定式化される。

対象の偏微分方程式

本論文では流れを表現しているナビエーストークス方程式や、ボルツマン方程式を対象の偏微分方程式に選んだ。

離散化

対象物理空間または速度空間はメッシュまたはセルに離散的に区分され、各々の区分された微小（位相的な）体積を微細釣合の対象（ぶつ、物質等）と考えてモデル化最小単位に設定する。各メッシュまたはセルの属性は位置座標、密度、速度（ベクトル）、圧力等の物理量である。各メッシュまたはセルの持つメソッドは離散化された偏微分方程式の一つの式の変形されたものである [6]。従って、モデル単位の設定対象は通常は物理空間上の固定ボリュームであることが多いが、位相空間（例えば、三次元速度空間）上

の概念上の微小体積をモデル化最小単位と設定してもよいし、（例えば）、微小量の流体そのものに固定したオブジェクトにしてもよい。

リバース・モデリング

次に、この偏微分方程式が表現している対象世界（現象）に対してリバース・モデリングを行う。即ち、その偏微分方程式が生成（構成）された現象に対して、離散化された微小体積毎に例えば微細釣合（力学的、物理的・科学的・生物的变化の微細な関係表現）及び微小体積モデル単位間の相互作用の関係式を再現させるようにモデリングを逆進させる。これをリバースモデリングと称する。具体的なモデル化方法は各偏微分方程式に依存するので第3、4章で述べる。要するに偏微分方程式の導出の逆を行えばよい。偏微分方程式が導出されるモデリング段階は一貫モデリング過程でいえば、通常、論理モデリング段階である。従って、偏微分方程式を一旦、論理モデリング段階においてOB一貫モデリング過程の記述の方式に載せ、次に（出来る限り）概念モデリング段階にまでモデリング過程を逆進させて対象世界の概念モデルを再構築する。

準OB一貫モデリングの方法

次に、その時点からモデリング方向を再反転させ、OB一貫モデリング過程を再度辿る。構成オブジェクトのメソッドの主要部分として、離散化された偏微分方程式を用いるモデリングを行う方向で議論を進める。このモデリングはその出発点が偏微分方程式であるという点を考慮して、準オブジェクトベース一貫モデリング法と称することにした。「準」とは称しているが、実体のモデル表現精度は現象直接の場合と同等のものからかなり精度の落ちるものまで多様であり得る。

概念モデリング過程、論理モデリング段階、再現モデリング段階、再現シミュレーションモデリング段階等のモデリング過程は現象直接シミュレーションの際のモデリング方法と原則的には同じであるのでこれらのモデリング段階は

省略する。少し異なるのは以下で述べる再構成モデリング段階のみである。

2.2 再構成モデリング段階

再構成モデリング段階以降のオブジェクトベース・モデルは以下のように定義されている [1][2]。

OBモデルオブジェクト
 = (属性&データ構造) + (メソッド)
 + (相互関係)

ここで

相互関係

= (相互関連リンク (静的))
 + (相互作用 (動的))
 + (OBインターフェイス)

モデル化単位オブジェクトの設定と、属性&データ構造の定義は各々の対象世界に依存する部分が多く、紙幅もないので省略する。メソッドと相互関係のみは重要であり特異なので以下に記す。

2.2.1 メソッドの設定と設計

オブジェクトベース・モデルのメソッドの再構成段階の定義や設定・記述をする。一般に微小体積 ΔV に対して、以下の(A)(B)(C)の各種類の相互作用力の項を、各オブジェクトに対する、また、各オブジェクトから他のオブジェクトに対する離散化された相互作用力を表現する一個の代数的関係式(差分方程式、有限要素法構成方程式、等)に変換し、自身オブジェクトに対する Δt 進んだ時点での物理諸量を計算するメソッド(オブジェクトの変容結果を計算するプログラム)として設計する。

- (A) 外力項(外界からオブジェクトへ働く力): 圧力、重力、電磁気力、等。通常は式の右辺に出現し、オブジェクトに作用する。
- (B) 相互作用力項(オブジェクト相互間、或は外界と相互の作用により発生する力)例としては運動量の交換結果としての粘性力項

等であり、通常微分方程式の右辺に現れるが、オブジェクトにとっての外界との「相互」作用である。

- (C) 内力項(オブジェクトから外への力): 慣性力項、流動項、移流項とも言う。通常式の左辺に現れ、オブジェクトから外界へ作用する。

勿論、連続の式、運動量保存式、エネルギー保存式、等の制約条件を必要に応じて満たす必要があるれば、それもメソッドの中に離散化された相互関係代数方程式として生成され、連立方程式として位置付けて干渉計算されるように設計する。

2.2.2 相互関係の定義と設定

オブジェクトベース・モデルでは、一旦は周囲から切り離されたモデル化最小単位を用いるため、オブジェクト間の相互関係の定義と設定は他のオブジェクト指向モデルに比べてもより重要である。相互関係は前節に示したように三種類の要素からなる [1][2]。

相互関連リンク:

オブジェクト間の静的な相互関係を表現する。例えば、二つの平面オブジェクトの連続や直交等の関連を表現する。この相互関連リンクは、例えば、次の項である相互作用の発現の際の力学計算をする際に(本来はその時点で動的に)参照され、相互作用の影響が計算されるべきものである。

相互作用:

メソッドの主要因である。本来は、メソッド発動のタイミング・発動条件・発動手順・発現構造(発動各要素間の静的関連)・発現(起動)シーケンス等を記述することでオブジェクトの動作や振舞いが生じるが、実際には上記のオブジェクトの動的なことに関係する構造部分のかかわりは省略され、結果としての動作や振舞いのシーケンスを結果論的に記述し、結果としての変化量を計算する表現になったメソッドが多い。

OBインターフェイス:

他のオブジェクトとのコミュニケーションのプロトコルの設計。オブジェクト間では相互作用計算のためのデータを相手に要求し、その計算結果のうち相手オブジェクトに関するデータを送り返す、というのが基本プロトコルである。「他オブジェクト」がエンドユーザの場合のインターフェイスにおいてはグラフィックスやGUIを用いたもの(例えば流体)らしい反応をするインターフェイスを含む [1][7]

3 離散化ボルツマン方程式への適用

基礎となるボルツマン方程式は本研究では以下に示す離散化ボルツマン方程式である。

$$\frac{\partial F_i}{\partial t} + \mathbf{V}_i \cdot \frac{\partial F_i}{\partial \mathbf{x}} = \frac{1}{K_n} \sum_{j=1}^r \frac{|\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j|}{m_0} \sum_{(k,l)}^{m_0} (F_k F_l - F_i F_j)$$

F_i は特定の物理空間微小セル中の速度空間微小体積 (i 番目のセル) 中の速度分布関数 F の一部分であり、各セルを「速度セルオブジェクト」として設定した集約オブジェクトである。その実体は非平衡の速度分布関数 F の一部であり、速度空間セルの ΔV 内の非平衡分布関数 F がオブジェクトの実体とする。 F_i の属性は各セルの物理空間位置座標、速度空間位置座標と、 F_i の関数値である。

F の内部状態 F_i の変容は速度セルオブジェクト間の相互作用(速度空間内の衝突現象)をモデル化したメソッドによって実現される。離散化してメソッド設計の基礎にすべき式は、上記のボルツマン方程式の演算子分割された右辺の衝突項である。

F の時間的・空間的な変化は内力項でもある左辺の流動項(慣性項)が表現しており、この式を離散化し物理空間セル ΔV オブジェクト間の相互作用としてオブジェクト間の微細釣合をモデル化し、各メッシュオブジェクト間相互関

係表現メソッドとして設計する。

静的な相互関係は、ボルツマン方程式ではその方程式内に既に含まれているのでその情報をデータ構造に反映させればよい。

OBインターフェイスは上記のメソッドが必要とするデータを他のオブジェクトに要求し、また、逆に要求に応じてデータを送受信するプロトコルを設計すればよい。エンドユーザとのインターフェイスはが特には必要無いので無視してよい。

離散化ボルツマン方程式のOB一貫モデリングの例を図1に示す。各モデリング段階の最下段の縦の上下二つのキーワードはそれぞれ、(OB)モデル化単位名、相互作用モデル(メソッド)名を示している。離散化ボルツマン方程式の概念モデルは非連続流体の概念モデルである。論理モデリング段階では、分子速度分布関数 F 、ボルツマン衝突項、流動項それぞれについてボルツマン偏微分重積分方程式の離散化された代数的相互関係式の形への変換後にOBオブジェクトモデル、相互作用モデルとして用いられる。再構成(設計)モデリング段階では論理モデルの各々をOBモデルの形に変換し、それをプログラム言語表現に直すための準備の設計を行えばよい。但し、この段階でオブジェクトベース機構 [1][3] の支援を前提にしてオブジェクトベース設計が行われる。再現モデリング段階以降は前モデリング段階のモデルのプログラミングとシミュレーションを主とするモデリング段階であり、特に偏微分重積分方程式を用いたことによる実装上の特徴はないので省略する。

図1の最右の列は確率論的な分子モデルを用いたDSMC法と呼ばれる現象直接シミュレーションのモデリングである。左の離散化ボルツマン方程式のモデリングと比較して見ると、その落差・相違が対照的で際だっているのがよくわかる。

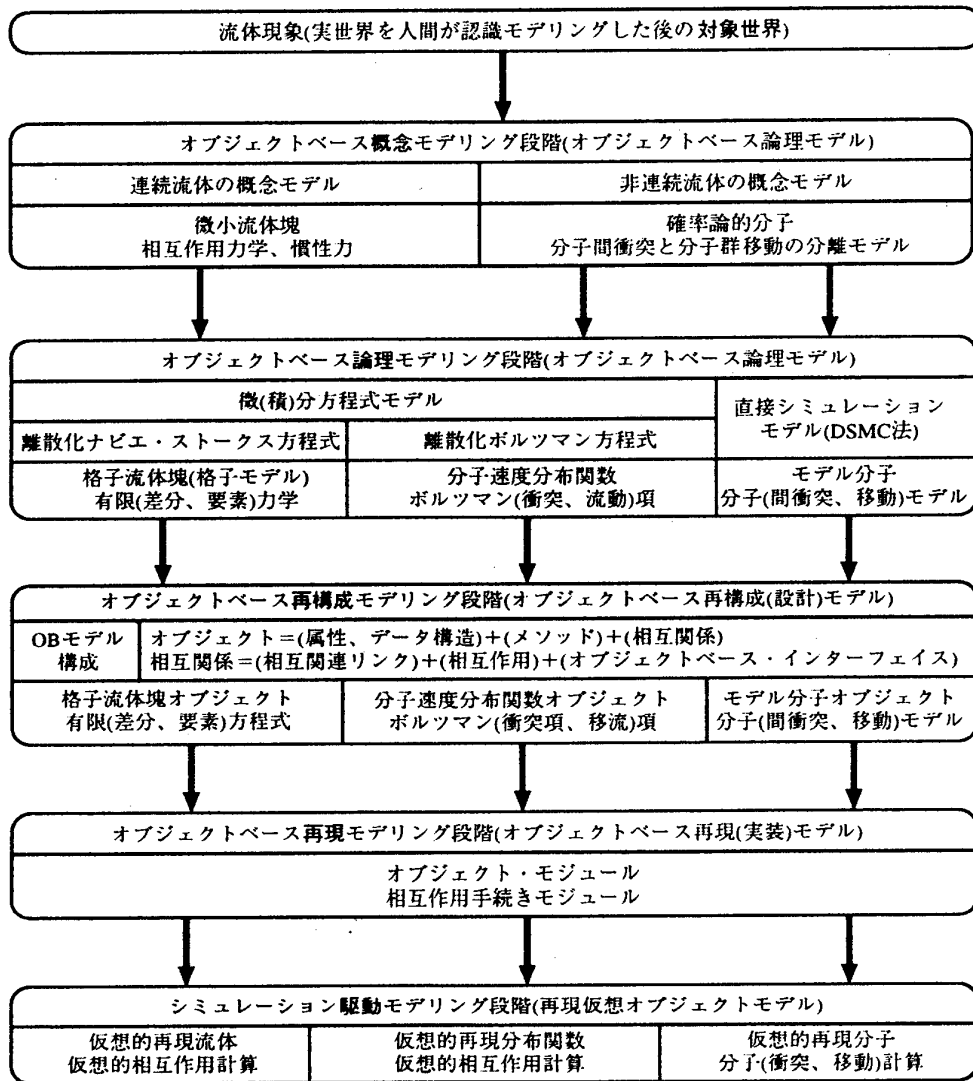


図 1: 流体現象 (連続、非連続) のオブジェクトベース一貫モデリング過程

4 ナビエ Stokes 方程式への適用

ナビエ Stokes 方程式に対してはシミュレーションとして体系的にはなっていない時点での発表が既に存在する [6][8] ので既発表分は極く簡略にし、体系的に述べるべき部分を重点的に述べる。まず、基礎となるナビエ Stokes 方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial vu}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

u, v は各々 x, y 座標軸方向の流体の速度であり、 p は圧力である。対象のモデル化単位としては、空間を離散化して区分し離散化の際の区分線交差点をメッシュ点と名付け、直接にはメッシュ点をオブジェクトと設定する。概念的には「その時点での」メッシュ点近傍での流体の物理量の平均値をメッシュ点が代表して持っているものであり、メッシュ点近傍での微小体積流体 (微小流体塊) ΔV をオブジェクトと設定することと同等である。図 1 の連続流体の概念モデルにそれを示してある。 ΔV をオブジェクトと設定したとき、これに働く相互作用の力は、オブジェクトに働く外力として圧力 p 、相互作用力 (オブジェクトの相互作用によって発生す

る力)として粘性力、内力(オブジェクトから外への力)として慣性力(流動項全体)、を当てればよい。その他に制約条件に連続の方程式がある。従って離散ボルツマン方程式と同様にナビエストークス方程式自体を離散化(差分あるいは有限要素化)し、例えば差分方程式とすると、これの各項を分割して ΔV オブジェクトに対する微細釣合を各々相互作用メソッドとしてモデル化すればよい。これが図1の論理モデリング段階の離散化ナビエストークス方程式の論理モデルである。

再構成モデリング段階においてはモデル化単位は、格子流体塊オブジェクトであり、そのメッシュオブジェクトの属性は位置座標、速度、圧力、密度である。複数の相互作用の各メソッドの設計としては差分法等で離散化ナビエストークス方程式の分割各項を有限差分式に対応させ、各オブジェクト内にメソッドとして設計することになる。

静的な相互関係は、離散化ナビエストークス方程式でも既にその方程式内に既に含まれているのでその情報をデータ構造に反映させればよい。

OBインターフェイスは上記のメソッドの必要とするデータを他の ΔV オブジェクトに要求し、また、逆に要求に応じてデータを送受信するプロトコルを設計すればよい。エンドユーザとのインターフェイスは特に必要無いので無視してよい。再構成(設計)モデリング段階では論理モデルの各々をOBモデルに変換し、それをプログラム言語表現に直すための準備の設計を行う。但し、やはりこの段階でオブジェクトベース機構[1][3]の支援を前提にしてオブジェクトベース設計が行われる。再現モデリング段階以降も前モデリング段階のモデルのプログラミングとシミュレーションを主とするモデリング段階であり、特に偏微分方程式を用いたことによる実装上の特徴はないので省略する。

5 議論と評価・考察

第2章において提案したリバースモデリングは言葉としては新しいけれども、内容は偏微分

方程式の構成作業を逆進させ、現象に沿った再分解作業過程を辿るための逆方向の概念的なモデリング実行のためのフレームワークに過ぎない。従って、ドメインユーザならばそれは当然可能であり、ドメインユーザの頭脳内の作業である限りにおいて可能であると仮定する以外はない。実際、流体の方程式に関する限り簡単に実現できた。従って問題はメソッドのためのモデル式が既に偏微分(及び重積分)方程式として与えられているので、それに矛盾しないような概念及び論理モデリング段階のモデルを構築し、それ以降のモデリングも同じ方針で作業する方法を見つけ出すことにある。モデリングの具体的作業は細かい判断の集積なのでここには記さない。しかし、実際の作業経験の状況からして、上記のような方針さえ立てば、困難なあるいは指針の見えないような作業ではなかったと判定できた。

次に、前章までの作業過程から、リバースモデリングが、(現象直接あるいは方程式のモデル化において個々の工夫施すことも含めて)成功すれば、実は偏微分方程式からのシミュレーションも現象直接シミュレーションも、(第1章に述べた原理的な長所・短所はもちろん残るけれども)、基本的にはオブジェクトベース一貫モデリング過程の中に「(リバースモデリング過程を含む)準オブジェクトベース一貫モデリング過程」という形で位置づけられてよい事が分かった。言い換えるとオブジェクトベース一貫モデリングの一変形としてOB一貫モデリングパラダイムの範疇にはめ込まれ得ることが明確になったと言えよう。

6 結論

本研究においては、従来我々の研究[1][2][3]において"もの"のままのモデル化であるオブジェクトベース・モデリングパラダイムを応用して、物理学的現象の直接シミュレーションのための方法とされていた方法論を拡張し、現象から導かれた「偏微分方程式を出発点にする」OBシミュレーション法を開発した。その結果

として、以上の研究から我々が得た新規な結論は以下の通りである。

1. 偏微分（・重積分）方程式に対する拡張オブジェクトベースモデリングの方式を考案し、実用化した。その方法はリバースモデリング方式を取り入れることである。正当性の証明の代替として典型例による検証として流れの偏微分（・重積分）方程式をもって示した。
2. 物理的な現象を表す偏微分（・重積分）方程式に対しても準オブジェクトベース一貫モデリングパラダイムが準用できることを、また、それは、メソッド形成過程の内部における近似モデリングの部分（偏微分方程式の力学的な近似部分）を除けば、現象直接シミュレーションと同等のモデル構築が可能なることを流れの方程式（ナビエーストックス方程式、ボルツマン方程式）を典型例として示した。
3. オブジェクトベース一貫モデリング過程の各モデリング段階と、流体の流れの方程式の問題に対する各モデリング及びモデルの段階の対応関係を図によりその全体像の一覧を示した。
4. これにより、オブジェクトベース一貫モデリング過程の有用性とその実用性をより広範な範疇において実証できた。

以上の成果を踏まえて、今後は、本理論に基づいて、多くのシミュレーション（現象直接、偏微分方程式）を実際にも実現し、エンドユーザ誰でもが利用できるような汎用化、実用化を図る計画である。

参考文献

- [1] 嶋山正行、金子勇、「オブジェクトベース機構：オブジェクト指向一貫モデリング過程論に基づくシミュレーションの実現」、情報処理学会第17回プログラミング研究会研究報告、Vol. 94, No. 49, P P. 33-44, 1994年6月3日。
- [2] 嶋山正行、「高度なシミュレーションのためのオブジェクトベース一貫モデリング過程論とその駆動支援環境」、第1回情報処理学会数理モデルと問題解決研究会、1995年5月18日。
- [3] 嶋山正行、金子勇、「オブジェクトベース機構に基づく数値シミュレーション」、情報処理学会第51回ハイパフォーマンスコンピューティング研究会報告、Vol. 94, No. 51, p p. 1-8, 1994年6月17日。
- [4] 保原充、大宮司久明、「数値流体力学、基礎と応用」、東京大学出版会、1992年3月。
- [5] 大野豊、磯田和男、「新版 数値計算ハンドブック」、オーム社、1990年9月。
- [6] 嶋山正行、横澤謙二、「オブジェクト指向に基づく偏微分方程式の数値シミュレーション」、情報処理学会第51回ハイパフォーマンスコンピューティング研究会報告、Vol. 94, No. 51, p p. 9-16, 1994年6月17日。
- [7] 上原均、嶋山正行、「Object Reality Interface 機構モデルの概念設計と実装例」、第57回情報処理学会ヒューマンインターフェイス研究会研究報告 Vol.94, No.96, pp. 17-24, 1994年11月10日。
- [8] 嶋山正行、滝本憲弘、「オブジェクト指向モデリングに基づく連続流体の数値シミュレーション」、情報処理学会第50回全国大会講演論文集、pp.5-71~5-72, 1995年3月17日。