

薬学情報処理演習 第4回

1次元拡散方程式のシミュレーション



奥 蘭 透
コロイド・高分子物性学



水中でのインクの広がり方

- 溶質が“流れ出る”速さは濃度の勾配に比例する。

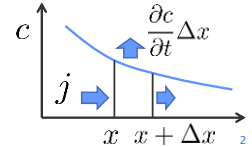
$$j = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (\text{Fick の法則})$$

- 流れ出て行った分だけ濃度は減少する。

$$[c(x, t + \Delta t) - c(x, t)] \Delta x = -[j(x + \Delta x, t) - j(x, t)] \Delta t$$

- 拡散方程式

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$



初期条件と境界条件

- 拡散方程式を解く範囲: $t > 0, x_L < x < x_R$
- 初期条件: 最初の状態(濃度分布)を与える
 - 時刻 $t = 0$ での C の値 (x の関数) を与える。
- 境界条件: “端”での条件を与える
 - ディリクレ条件
 $x = x_L, x_R$ での C の値を与える
 - ノイマン条件
 $x = x_L, x_R$ で $\frac{\partial c}{\partial x} = 0$ とする
 - 周期境界条件
 $c(x + X, t) = c(x, t), X \equiv x_R - x_L$ とする

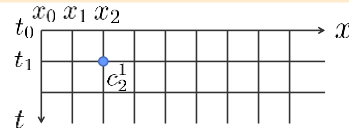


拡散方程式の差分化

- 拡散方程式を差分化する
 - $t_n = n \Delta t, x_i = i \Delta x$ での C の値を C_i^n と書く
 - 差分公式 $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \simeq \frac{c_{i-1}^n - 2c_i^n + c_{i+1}^n}{\Delta x^2}$

を用いると、拡散方程式の差分式は

$$c_i^{n+1} = c_i^n + \frac{D \Delta t}{\Delta x^2} (c_{i-1}^n - 2c_i^n + c_{i+1}^n)$$



拡散方程式をExcelで解く

- 横方向に x , 縦方向に t をとる。
- 初期条件を設定する。
- 境界条件を設定する。
- 差分式を入力する。

t \ x	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.00001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.000001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0000001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.00000001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.000000001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.0000000001	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0



演習課題

- $0 < x < 30$ の範囲で拡散方程式を解く。ただし、 $D = 1, \Delta x = 1$ とする。
 - 初期条件は、 $c_{15}^0 = 1, c_i^0 = 0 (i \neq 15)$
 - 境界条件は、ノイマン条件:
 $c_0^n = c_1^n, c_{30}^n = c_{29}^n$
- いくつかの時刻で c を x に対してプロットする。
- 上記の課題をレポートとしてA4用紙1枚にまとめ、学籍番号、氏名(自筆)を明記してこの時間内に提出。