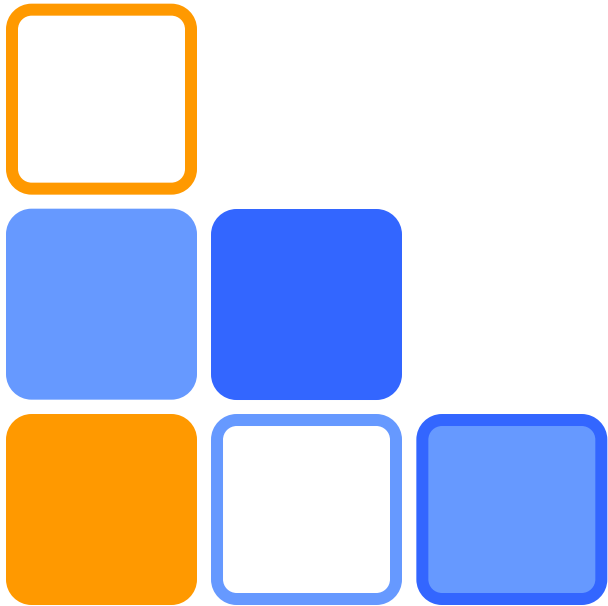


薬学情報処理演習 第5回

2次元拡散方程式の シミュレーション



奥菌 透

コロイド・高分子物性学



2次元の拡散方程式

- 拡散する物質の濃度 C が場所 (x, y) 、時刻 t の関数であるときの拡散方程式:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right)$$

- 一般に、拡散方程式は

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

と書かれることが多い。ここで

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (\text{2次元の場合})$$

はラプラシアンとよばれる微分演算子である。

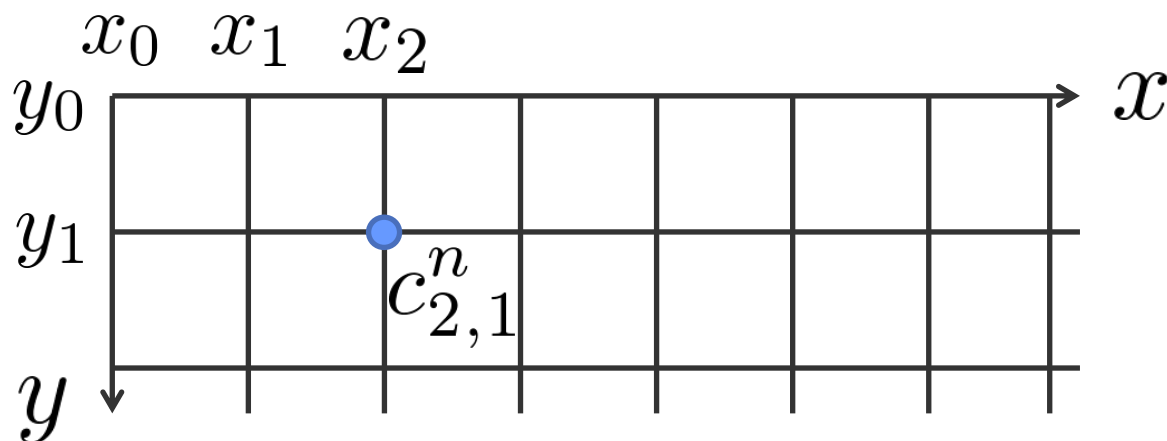


拡散方程式の差分化

□ 拡散方程式を差分化する

- $t_n = n\Delta t$, $x_i = i\Delta x$, $y_j = j\Delta y$ での C の値を $c_{i,j}^n$ と書くと $\Delta x = \Delta y$ のとき、差分式は

$$c_{i,j}^{n+1} = c_{i,j}^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (c_{i-1,j}^n + c_{i+1,j}^n + c_{i,j-1}^n + c_{i,j+1}^n - 4c_{i,j}^n)$$





拡散方程式をExcelで解く手順

- ある時刻での $c_{i,j}^n$ の値を入れるセルを決める。
- Sheet1に初期条件 $c_{i,j}^0$ を入力し、カラースケールで表現する。
- Sheet2に差分式(Sheet1の値を参照)を入力する。
- Sheet2の結果 ($c_{i,j}^1$ の値)をSheet1にコピー(上書き)する。
- 上記のコピーを行った時にSheet1の値は更新され時刻が1ステップ進む。
- これを繰り返せば、濃度の時間発展がアニメーションとして表現できる。

数式の設定

□ Sheet1でパラメータと初期条件を設定

	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	パラメータ	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	D=	1
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	dt=	0.1
2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	dx=	1
3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Max n =	100
4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	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	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	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	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	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	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
15	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		
16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		

□ Sheet2で拡散方程式の差分式を入力

– シートを参照するときは、=Sheet1!C4+...

□ Sheet2で境界条件の差分式を入力(ノイマン条件)

$$c_{0,j}^n = c_{1,j}^n, \quad c_{N,j}^n = c_{N-1,j}^n, \quad c_{i,0}^n = c_{i,1}^n, \quad c_{i,N}^n = c_{i,N-1}^n$$



マクロを利用してみる

- (準備)「開発」タブをリボンに表示する
 - Officeボタン→オプション→☒開発タブをリボンに...
- Sheet2の計算結果をSheet1にコピーする作業をマクロとして記録する
 - 開発タブの「マクロの記録」をクリック
 - ダイアログボックスでマクロ名などを入力する
 - Sheet2の計算結果が表示されている範囲を選択
 - クリップボードにコピー
 - Sheet1の貼り付けたい範囲を選択
 - 貼り付けメニューの「形式を選択して貼り付け」をクリック
 - ダイアログボックスの「値」を選択して「OK」をクリック
 - 貼り付けた範囲外のセル(A1など)をクリック
 - マクロの「記録終了」をクリック
- マクロを実行する
 - 開発タブの「マクロ」→作成したマクロを選択して「実行」



コマンドボタンを作る

□ コマンドボタンを貼り付ける

- 開発タブの「コントロール」→「挿入」→「コマンドボタン (ActiveX コントロール)」を選択しボタンを貼り付ける
- コマンドボタンが選択された状態で「コントロール」→「プロパティ」→オブジェクト名とCaptionを入力する

□ コマンドボタンとマクロを関連付ける

- 「デザインモード」がオンになっていることを確認し、コマンドボタンをダブルクリックする
- Visual Basic Editor が開き、コマンドボタンをクリックしたときの動作を記したコードが現れるので、以下のように入力する

```
Private Sub StartButton_Click()  
時間発展 ←ここにマクロ名を入力  
End Sub
```

- VBE を閉じ、デザインモードをオフにする



マクロの内容を変更する

□ マクロの内容を見る

- 開発タブの「Visual Basic」をクリックしVBEを起動する
- “時間発展”マクロの処理内容が書かれたコードを開く
- コードはVBA (Visual Basic for Applications) 言語で書かれている

□ 時間発展を動画表示するように変更する

- 自動記録した動作を For ... Next で繰り返す
- コピー&ペーストの動作を簡略化する
- スクリーンをアップデートするタイミングを指定する



マクロの変更例

```
Sub 時間発展()
```

```
'
```

```
' 時間発展 Macro
```

```
' 計算結果を動画として表示する
```

```
'
```

```
'
```

```
For i = 1 To Range("A16").Value ← セルA16で指定した回数だけ繰り返す
```

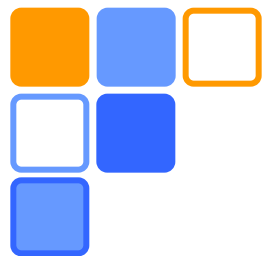
```
Application.ScreenUpdating = False
```

```
Sheets("Sheet1").Range("B3:AF33").Value _ ← Sheet2のB3:AF33の  
= Sheets("Sheet2").Range("B3:AF33").Value 範囲の値をSheet1の  
B3:AF33に代入する
```

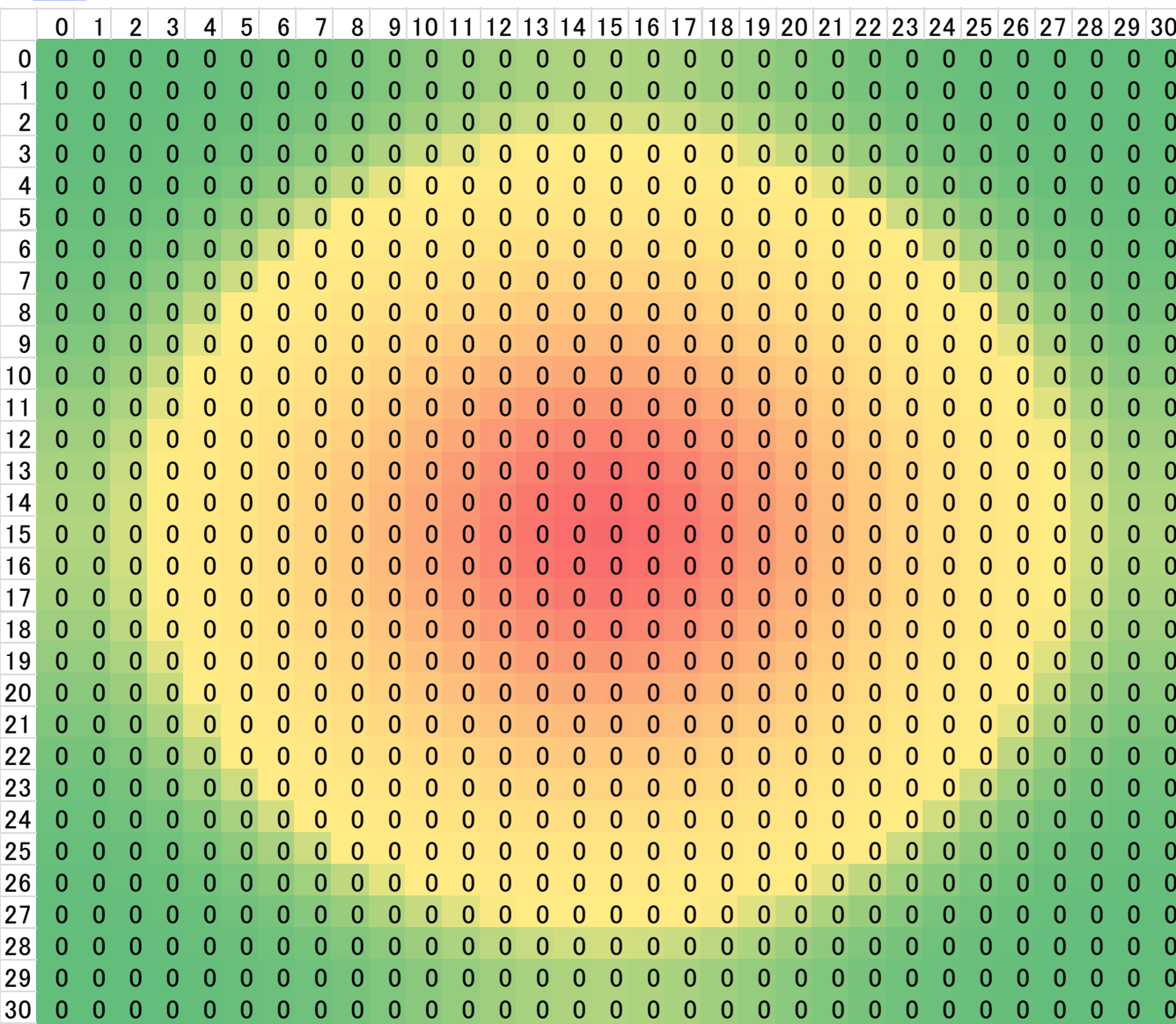
```
Application.ScreenUpdating = True ← 上の処理が終わってから  
スクリーンをリフレッシュする
```

```
Next i
```

```
End Sub
```



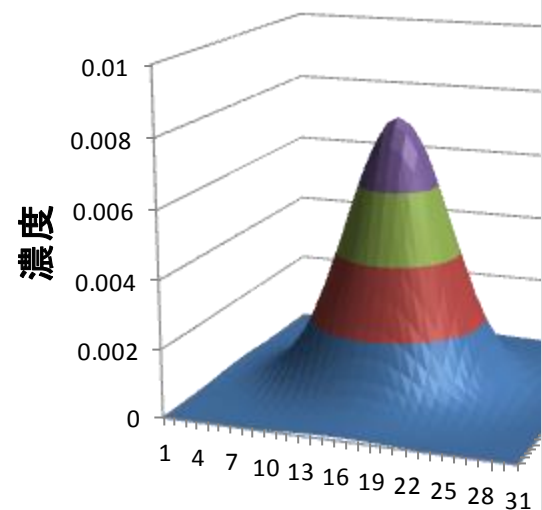
実行例



パラメータ	
D=	1
dt=	0.1
dx=	1
Max n =	100
t=	10

START

CLEAR





演習課題

- $0 < x < 30, 0 < y < 30$ の範囲で適当に初期条件を与え、2次元拡散方程式を解く。ただし、境界条件はノイマン条件とし、 $D = 1, \Delta x = \Delta y = 1$ とする。
- いくつかの機能をつけてみる。たとえば、
 - 時刻を表示する。
 - Sheet1 の C の値をすべて0にするボタンを付ける。
- 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。