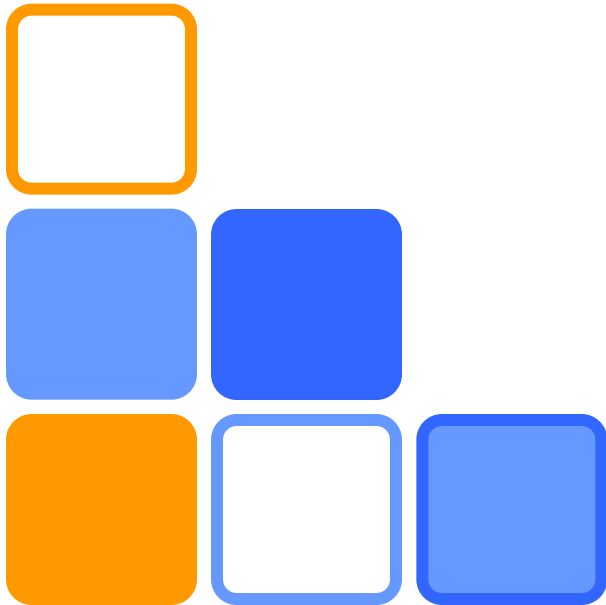


薬学情報処理演習 第6回

2次元拡散方程式の シミュレーション(つづき) ～復習と補足～



奥菌 透

コロイド・高分子物性学



前回の復習

- 2次元拡散方程式を有限差分法を用いて解く。

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

- 用いる差分方程式:

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

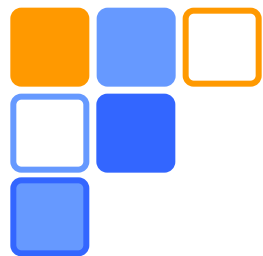
- 境界条件はノイマン型:

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



数値的に解く手順の概略

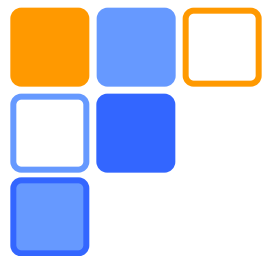
1. 初期値(時刻0での濃度分布)の入力
 - $n = 0$ での $c_{i,j}^n$ の値を設定する。
2. 次の時刻($n+1$)での濃度分布を計算する
 - $c_{i,j}^{n+1}$ の値を差分式にしたがって計算する
 - 境界値($c_{i,0}^{n+1}$, $c_{i,N}^{n+1}$, ...)を計算する
3. 時刻を1進めて2. へ戻る
 - $n \leftarrow n + 1$ として計算を繰り返す
4. 終わりの時刻になったら計算を終了する



Excel で計算結果をアニメーションとして表示するための手順の概略

1. Sheet1のセルに初期値を入力
 - セルの値をカラースケール表示する
2. Sheet2で計算
 - Sheet1(時刻n)の値を用いて次の時刻(n+1)の値を計算する
 - 境界値も計算する
3. Sheet2の計算結果(値のみ)をコピーし、Sheet1に貼り付ける
 - 時刻を1進めて2. へ戻る
4. 終わりの時刻になったら終了する

マクロを利用する



マクロについて

□ マクロとは？

- 一連の操作や処理をまとめたもの

□ マクロの実体

- VBA言語で書かれたプログラム(関数)
- 開発タブの「マクロの記録」でマクロを記録すると、自動的にVBAのコードが生成される

□ VBA (Visual Basic for Applications)

- Microsoft Office に搭載されているプログラミング言語
- 開発タブの「Visual Basic」をクリックすると、Visual Basic Editor (VBE)が起動され、VBAの編集ができるようになる



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」



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



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
```

ボタンをクリックすると、このマクロが実行される

- VBE を閉じ、デザインモードをオフにする

Sheet1の外観(例)

2次元拡散方程式

	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	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	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	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	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	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	0	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
17	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
18	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
19	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
20	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
21	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
22	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
23	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
24	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
25	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
26	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
27	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
28	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
29	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
30	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

パラメータ

D= 1

dt= 0.1

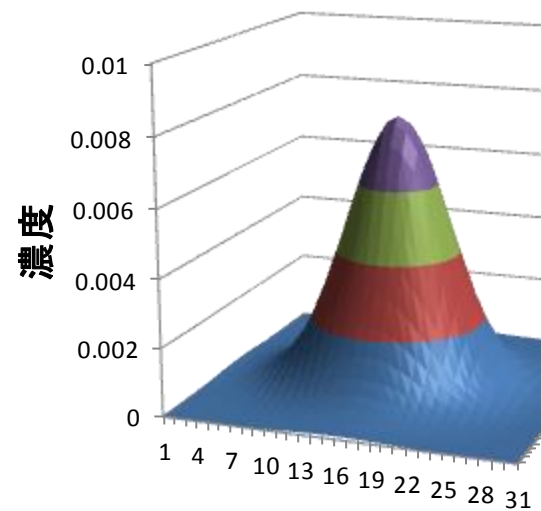
dx= 1

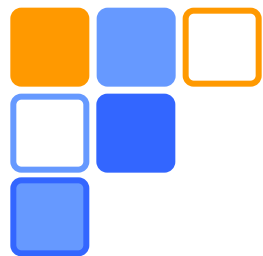
Max n = 100

t= 10

START

CLEAR





Sheet2の内容(例)

	A	B	C	D	E	...
1	$Ddt/dx^2 =$	【セルB1】				
2						
3		=C3	=C4	=D4	=E4	
4		=C4	【セルC4】			
5		=C5				
...						

【セルB1】=Sheet1!\$A1\$3*Sheet1!\$A1\$4/Sheet1!\$A1\$5^2

【セルC4】=Sheet1!C4+\$B\$1*(Sheet1!B4+Sheet1!D4
+Sheet1!C3+Sheet1!C5-4*Sheet1!C4)



VBAで記述されたマクロ(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
```

```
'
```

```
    Dim i As Integer      ← 変数 i の宣言
```

```
'
```

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

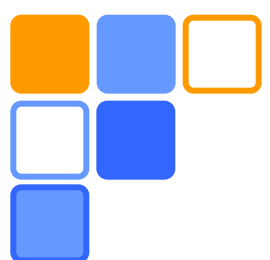
```
        Application.ScreenUpdating = False
```

```
        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
```



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。