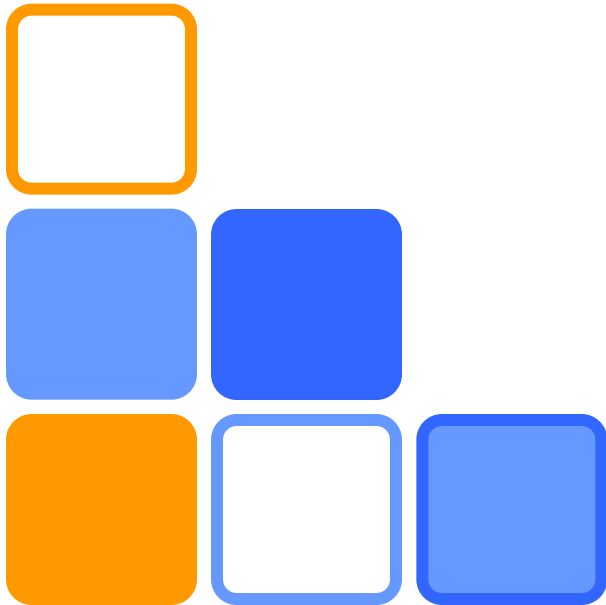


薬学情報処理演習 第6回

1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

薬物が溶媒中で広がる様子

- 溶質が“流れ出る”速さは濃度の勾配に比例する。

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

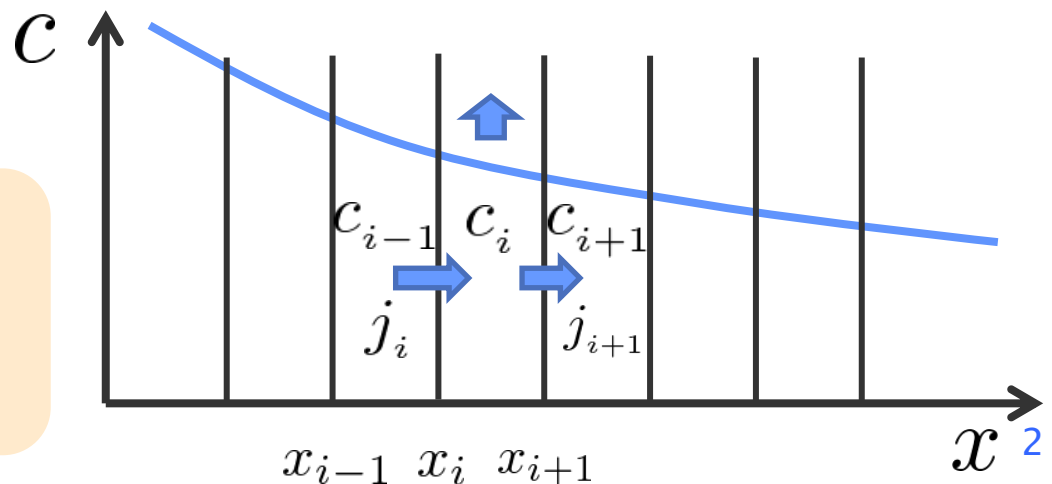
- 溶質の増加量は流入量に等しい(保存則)。

$$[c_i(t + \Delta t) - c_i(t)] \Delta x = [j_i(t) - j_{i+1}(t)] \Delta t$$

$$\Rightarrow \frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$$

- 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(陽的解法)

□ 拡散方程式を差分化する

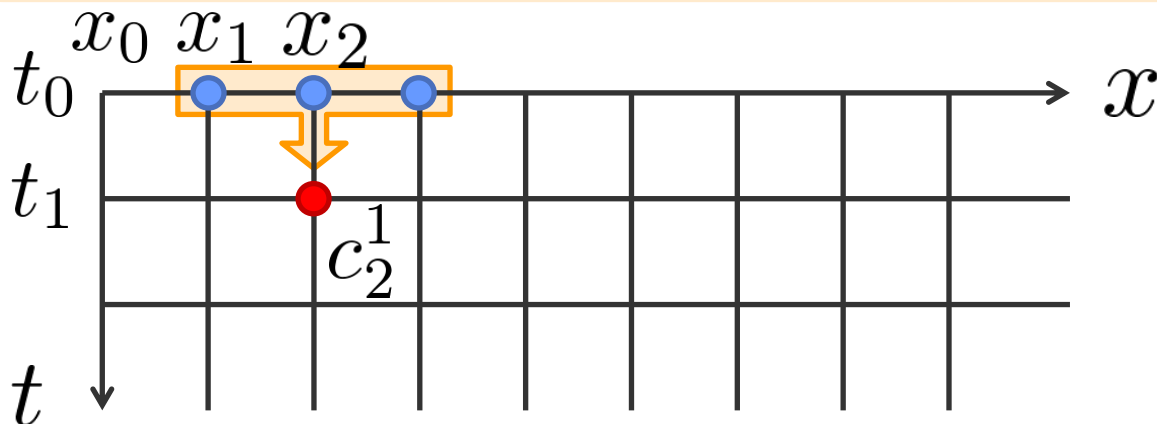
- $t_n = n\Delta t$, $x_i = i\Delta x$ での c の値を c_i^n と書く

- 差分公式 $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \simeq \frac{c_{i-1}^n - 2c_i^n + c_{i+1}^n}{\Delta x^2}$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right) \simeq \frac{1}{\Delta x} \left[\left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i+1/2} - \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{i-1/2} \right] = \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{c_{i+1}^n - c_i^n}{\Delta x} - \frac{c_i^n - c_{i-1}^n}{\Delta x} \right] \right]$$

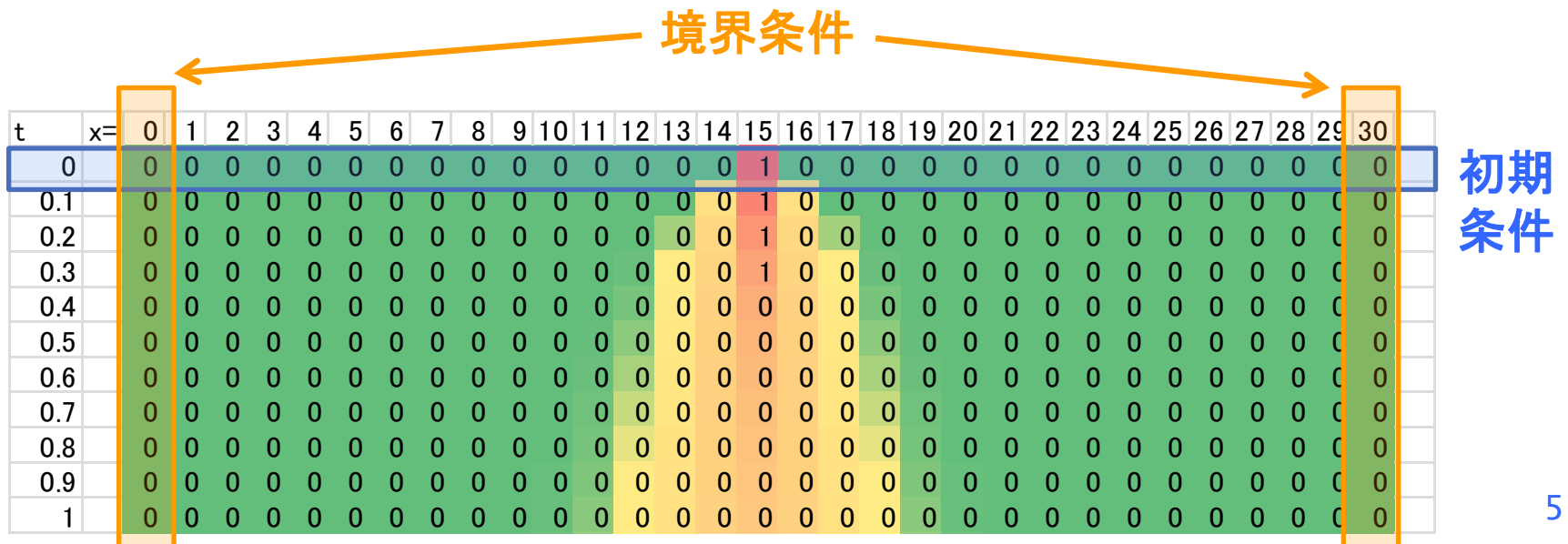
を用いると、拡散方程式の差分式は

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



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。



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: $c_0^n = c_1^n$, $c_{30}^n = c_{29}^n$
- $c(x, t)$ の鳥瞰図 (等高線図)、 $x = x_0$ での c の時間変化を両対数プロットした図を作成する。
(グラフの傾きが一定の値 ($-1/2$) に近づくことを確かめよ。)

