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

奥薗　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。

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

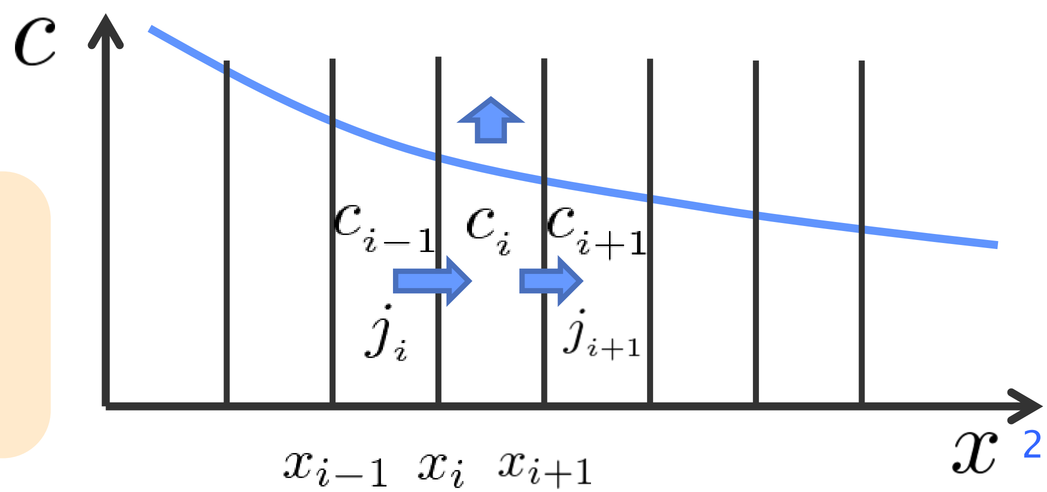
- 溶質の増加量は流入量に等しい（保存則）。

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

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

- 拡散方程式

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



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 $\dfrac{\partial c}{\partial x} = 0$ 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

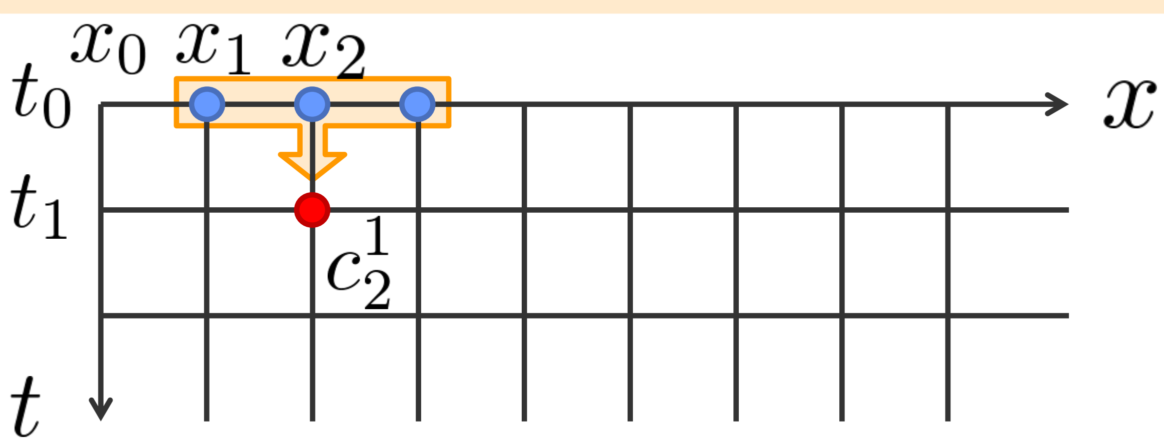
拡散方程式の差分化(陽的解法)

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

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

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。

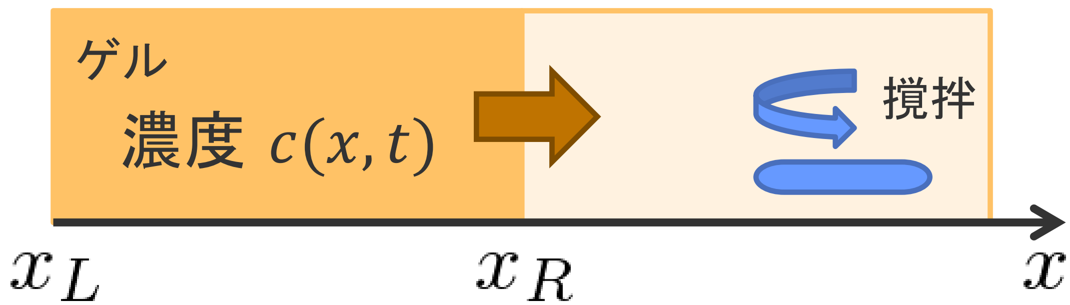
初期条件

境界条件

(x,t)	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	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
0.1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
0.2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
0.3	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
0.4	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
0.5	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
0.6	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
0.7	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
0.8	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
0.9	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0

薬物の放出量を求める

ゲル中の薬物の拡散

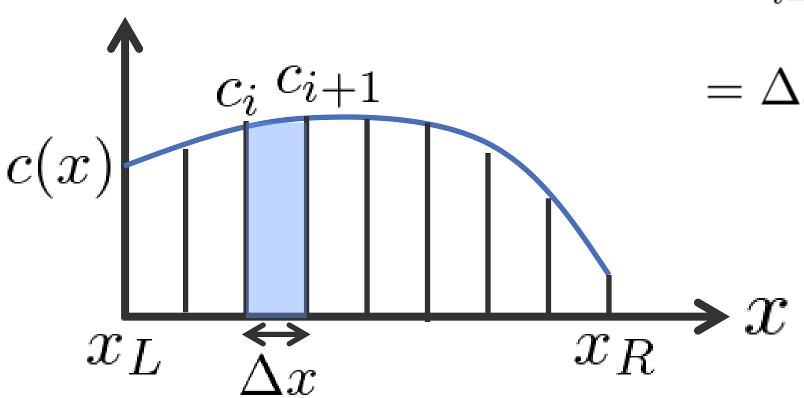


薬物の放出量

（放出量）＝（初期のゲル中の薬物量）ー（時刻tでのゲル中の薬物量）

ゲル中の薬物量: $\displaystyle \int_{x_L}^{x_R} c(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\Delta x}{2}(c_i + c_{i+1})$ （台形公式）

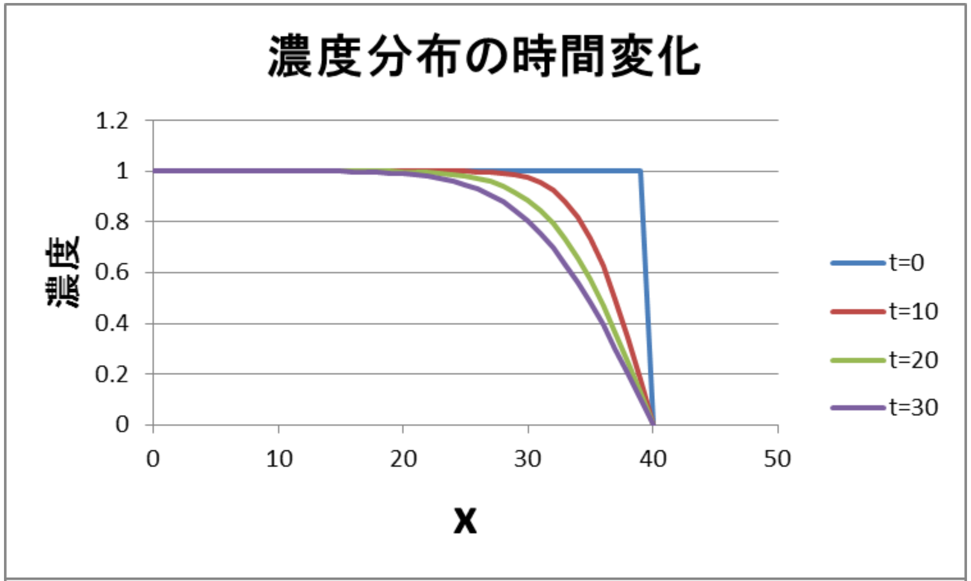
$$= \Delta x \left[\frac{1}{2}(c_0 + c_N) + c_1 + c_2 + \cdots + c_{N-1} \right]$$

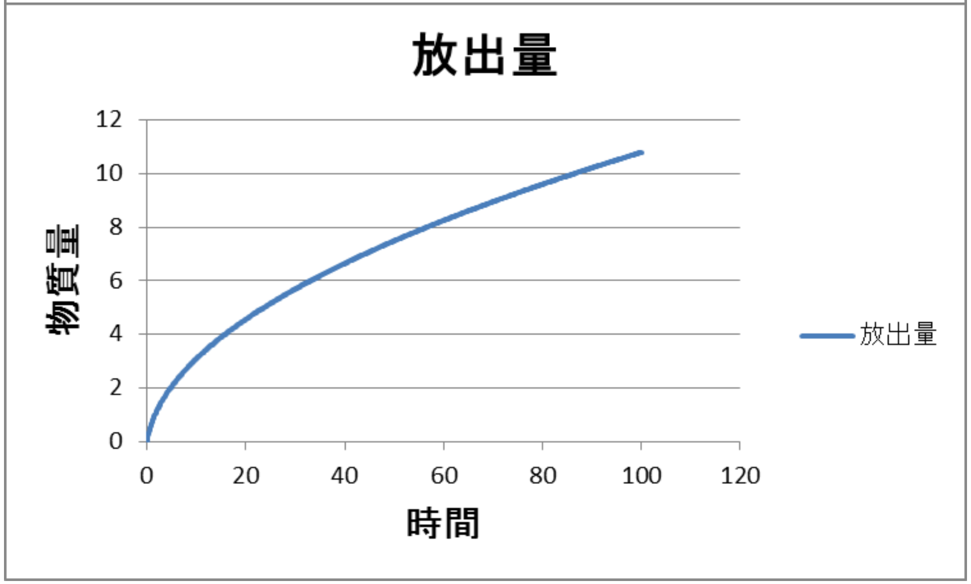


演習課題

- $x_L < x < x_R$ の範囲で拡散方程式を解く。
  - $x_L = 0,\ x_R = 40$ くらい
  - 初期条件
    - $c(x, 0) = C_0\ (x_L < x < x_R)$
  - 境界条件
    - $c_0 = c_1$（ノイマン条件）, $c_N = C_1$（ディリクレ条件）
  - パラメータ: C_0, C_1, D（拡散係数）
    - $\Delta x = 1, \Delta t = 0.1$ くらい
- いくつかの時刻での濃度分布のグラフを描く。
- 薬物放出量の時間変化のグラフを描く。

グラフ(例)





パラメータ:

$D = 1.0$

$C_0 = 1.0$

$C_1 = 0.0$

$\Delta x = 1.0$

$\Delta t = 0.1$