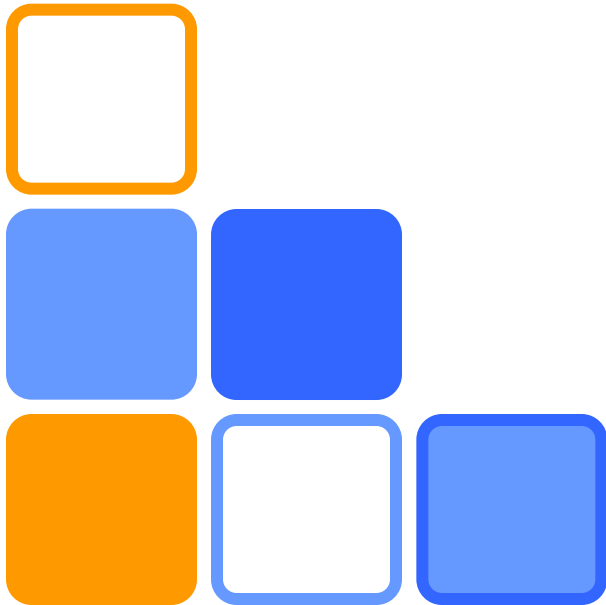


薬学情報処理演習 第6回

偏微分方程式の簡単な 解き方

～1次元拡散方程式～



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。

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

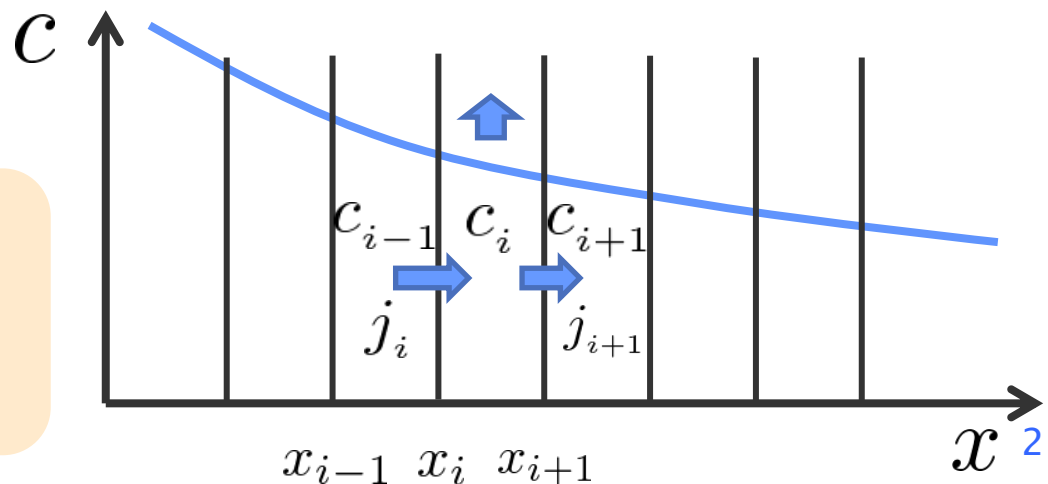
- 溶質の増加量は流入量に等しい(保存則)。

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

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

- 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

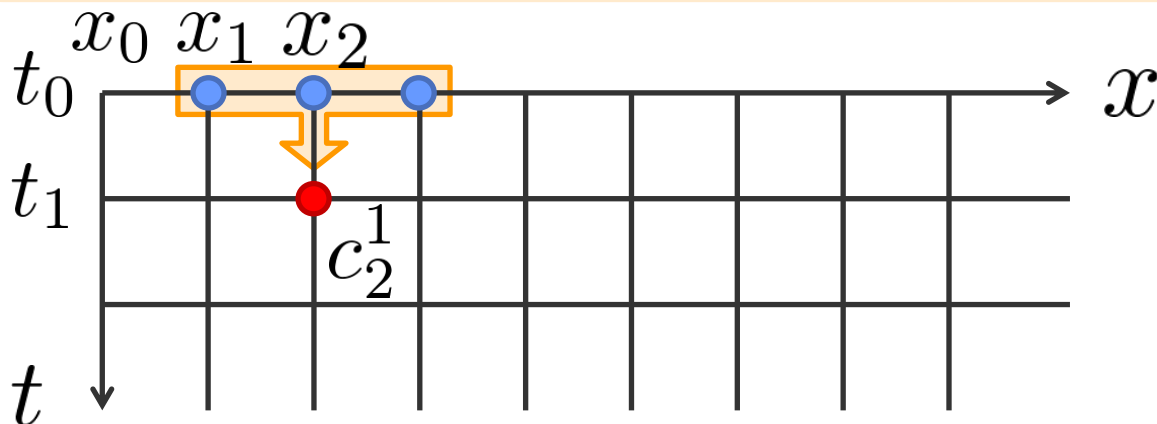
- $t_n = n\Delta t$, $x_i = i\Delta x$ での c の値を c_i^n と書く

- 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。

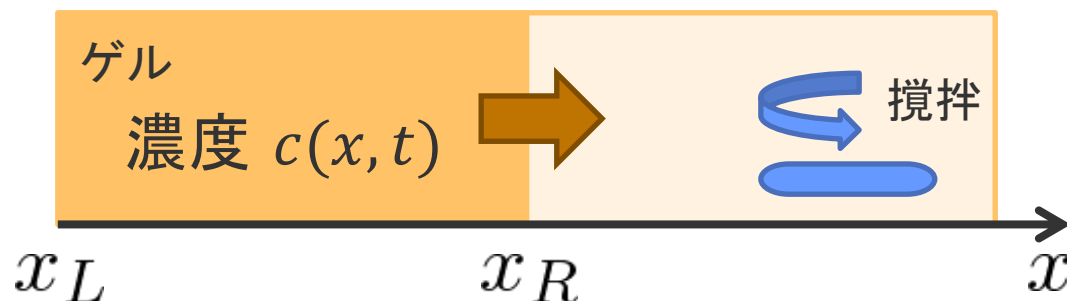
初期条件

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	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	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	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	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	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	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	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	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	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	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	

薬物の放出量を求める

□ ゲル中の薬物の拡散

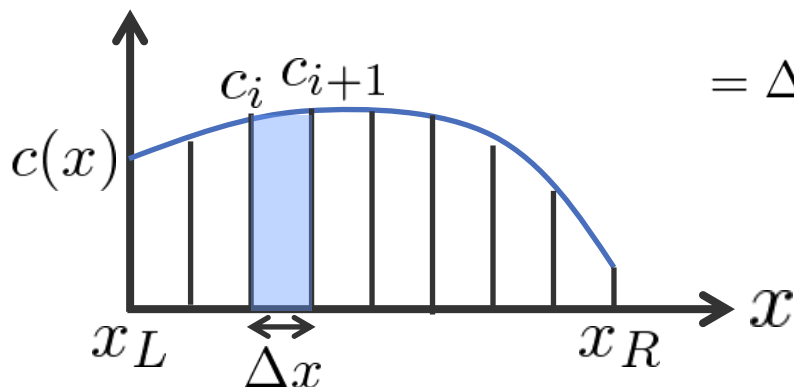


□ 薬物の放出量

(放出量) = (初期のゲル中の薬物量) - (時刻 t でのゲル中の薬物量)

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

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

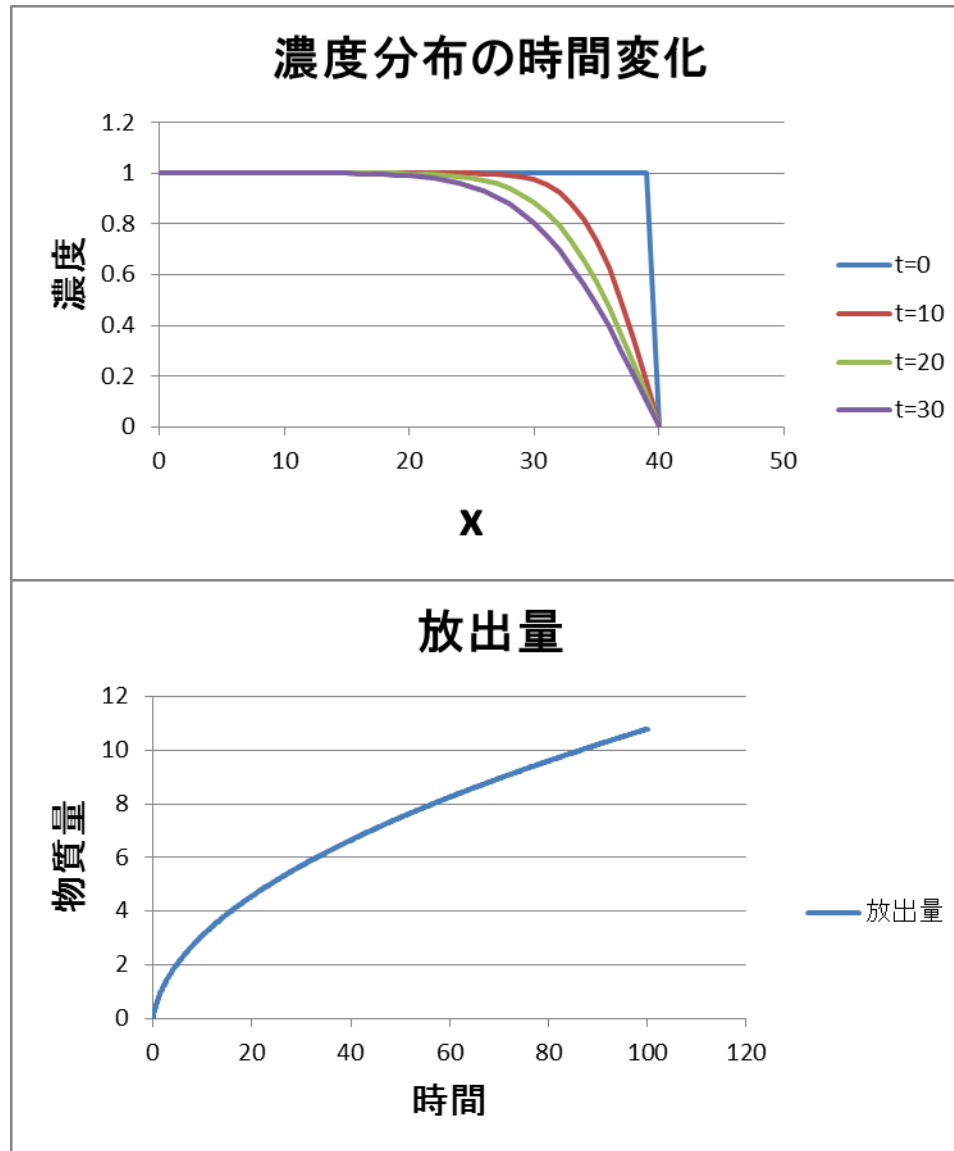




演習課題

- $x_L < x < x_R$ 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:

$$D = 1.0$$

$$C_0 = 1.0$$

$$C_1 = 0.0$$

$$\Delta x = 1.0$$

$$\Delta t = 0.1$$