薬学情報処理演習　第3回

偏微分方程式の簡単な解き方
～1次元拡散方程式～

奥薗　透

コロイド・高分子物性学

偏微分方程式とそれによって表される現象

- 複数の変数をもつ関数とその偏導関数の間に成り立つ関係式を偏微分方程式という。
- 現象の例
  - 電荷密度$\rho(x,y,z)$による静電ポテンシャル$\psi(x,y,z)$
    - ポアソン方程式: $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=-\frac{\rho}{\epsilon_0}$
  - 濃度$c(x,y,z,t)$が均一になる過程
    - 拡散方程式: $\frac{\partial c}{\partial t}=D(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 c}{\partial z^2})$
  - 神経軸索上を伝わるパルス(膜電位の時間変化)
    - 反応拡散方程式: $$\frac{\partial u}{\partial t}=D_u\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+f(u,v)$$ $$\frac{\partial v}{\partial t}=D_v\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}+g(u,v)$$

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。

$$j = -D\frac{\partial c}{\partial x}$$ （Fick の法則） D : 拡散係数

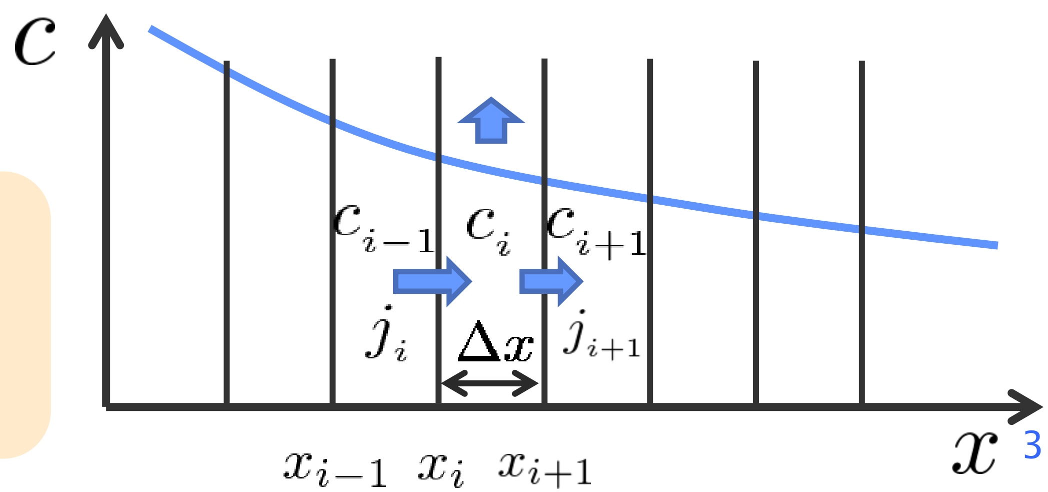
- 溶質の増加量は流入量に等しい（保存則）。

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

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

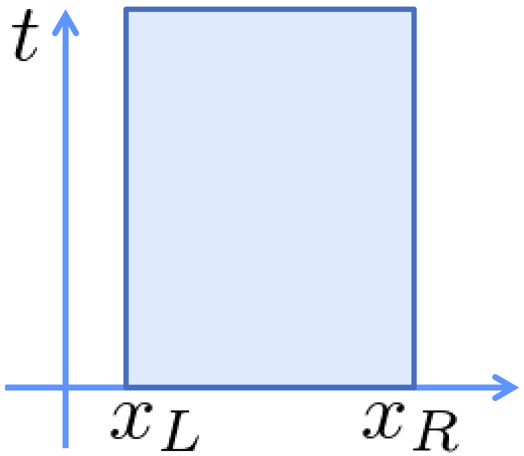
- 拡散方程式

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



初期条件と境界条件

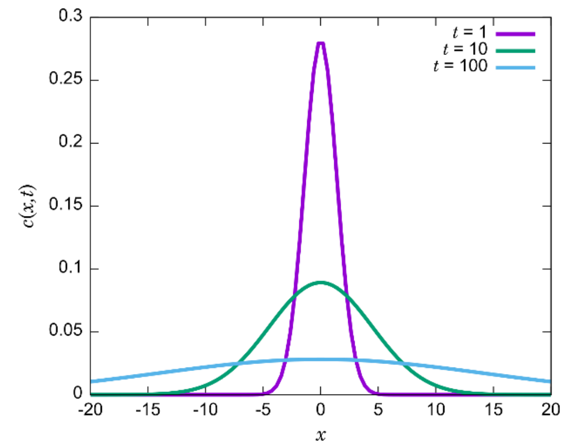
- 拡散方程式を解く範囲：$t > 0,\ x_L < x < x_R$
- 初期条件：最初の状態（濃度分布）を与える
  - 時刻 $t = 0$ での c の値（x の関数）を与える。
- 境界条件：“端”での条件を与える
  - ディリクレ条件
    $x = x_L, x_R$ での c の値を与える
  - ノイマン条件
    $x = x_L, x_R$ で $\dfrac{\partial c}{\partial x} = 0$ とする
  - 周期境界条件
    $c(x + X, t) = c(x, t),\ X \equiv x_R - x_L$ とする



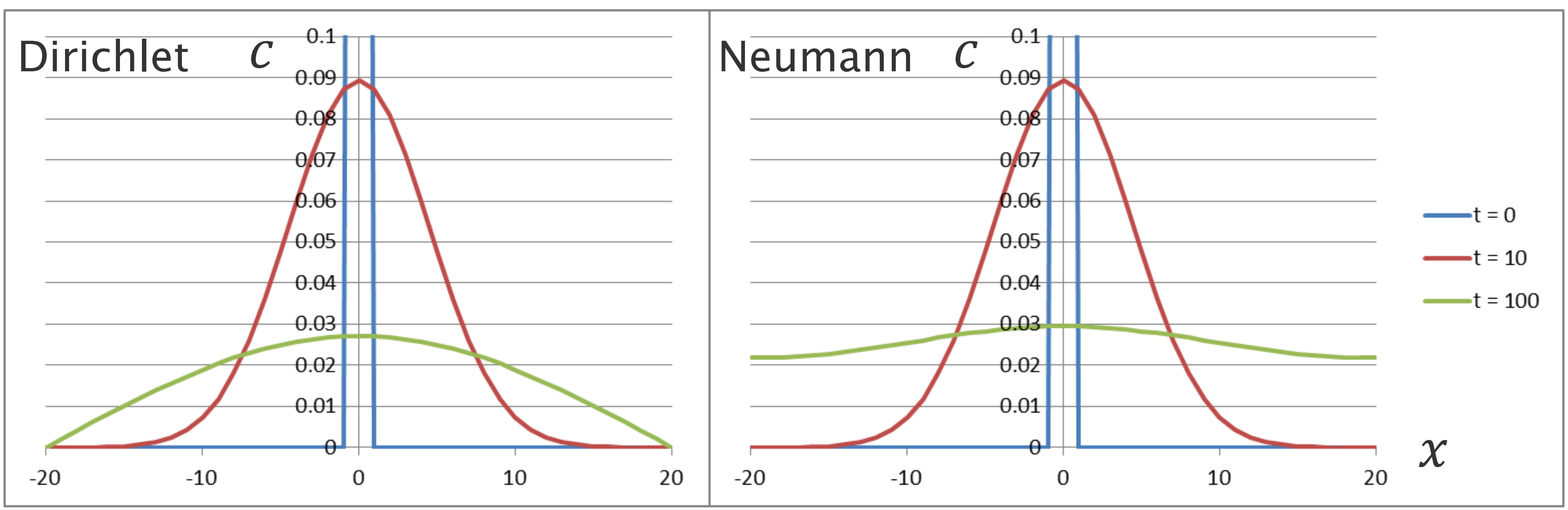
拡散方程式の解

- 無限領域$(-\infty < x < \infty)$での解析解

$$c(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$



- 有限領域での数値解
  - ディリクレ条件$(c = 0 \text{ at } x = \pm 20)$
  - ノイマン条件$\left(\frac{\partial c}{\partial x} = 0 \text{ at } x = \pm 20\right)$



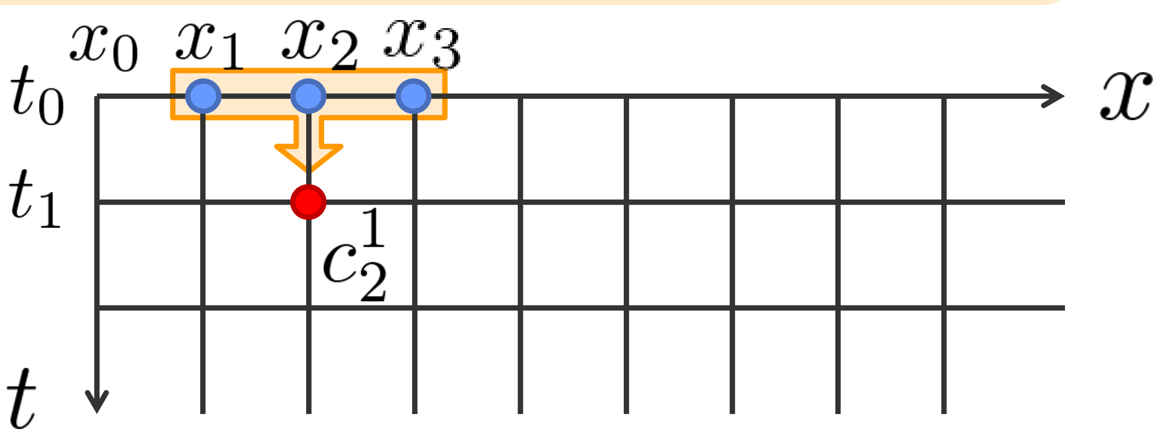
拡散方程式の差分化(陽的解法)

- 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

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

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} = D\frac{c_{i-1}^n - 2c_i^n + c_{i+1}^n}{\Delta x^2}$$

$$c_i^{n+1} = c_i^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}(c_{i-1}^n - 2c_i^n + c_{i+1}^n) \quad \left(0 < \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}\right)$$



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。

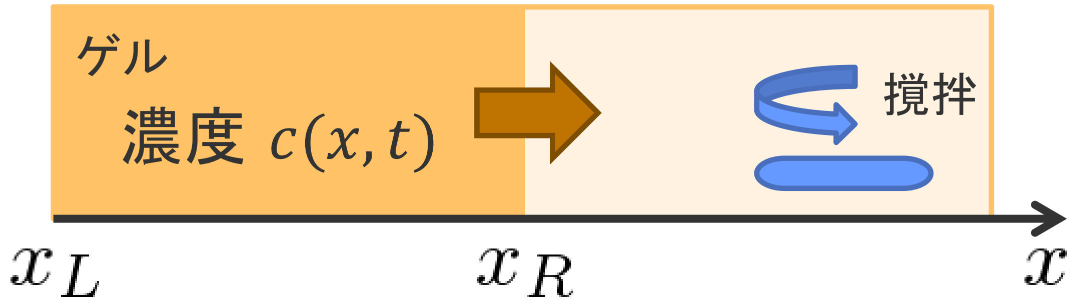
初期条件

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

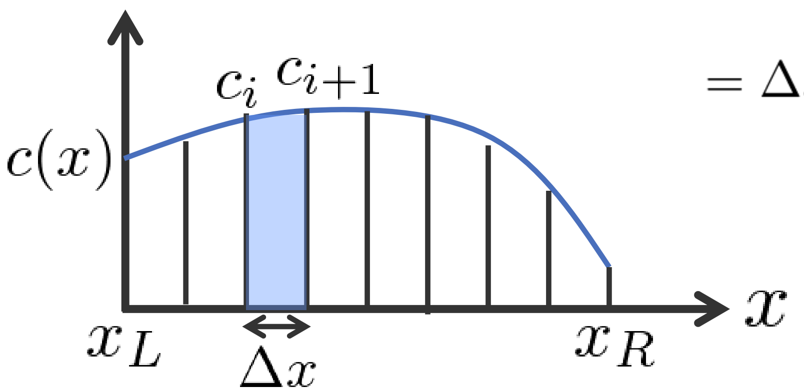


- 薬物の放出量

（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）

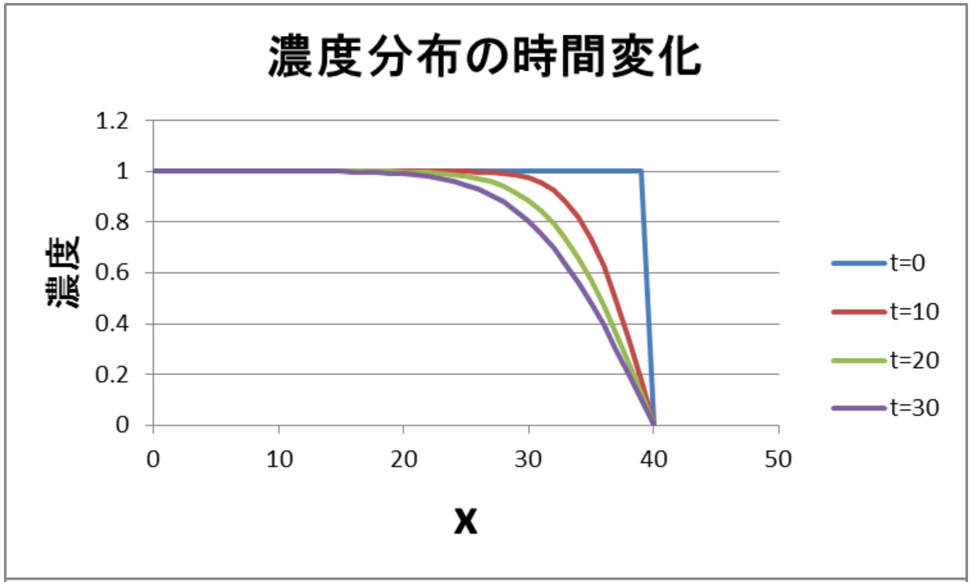
$$= \Delta x \left[\frac{1}{2}(c_0 + c_N) + c_1 + c_2 + \cdots + c_{N-1} \right]$$

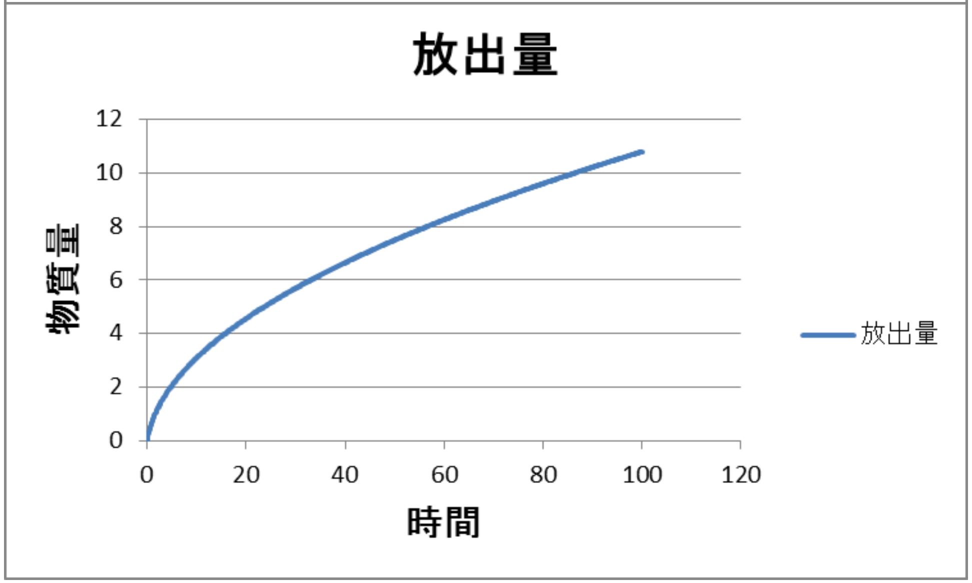


演習課題

- $x_L < x < x_R$ 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
    - $c(x, 0) = C_{\mathrm{init}}\ (x_L < x < x_R)$
  - 境界条件
    - $c_0 = c_1$（ノイマン条件）, $c_N = C_R$（ディリクレ条件）
  - パラメータ：$C_{\mathrm{init}}, C_R, D$（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：

$D = 1.0$

$C_{\mathrm{init}} = 1.0$

$C_R = 0.0$

$\Delta x = 1.0$

$\Delta t = 0.1$

参考図書

- スタンリー・ファーロウ著(伊理正夫・伊理由美訳)『偏微分方程式―科学者・技術者のための使い方と解き方』(朝倉書店、1996)
- 登坂宣好、大西和榮著『偏微分方程式の数値シミュレーション』(東京大学出版会, 1991)