12．拡散方程式

拡散とは、粒子、熱、エネルギー等が、その密度の高い領域から徐々に密度の低い領域に散らばり、広がっていく現象である。この拡散現象を記述する式が拡散方程式である。移動する量を u、時間を t、空間を x, y, z とすると、この u の時間的、空間的な変化は以下の拡散方程式で記述される（u は時間 t と空間 (x, y, z) の関数 $u(t, x, y, z)$ であることに注意。）。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) \tag{1}$$

ここで、κ は拡散の速さを表す定数であり、u が物質（分子、粒子等）の濃度であれば拡散係数であり、u が熱であれば熱伝導係数である。なお、熱の拡散方程式は、熱伝導方程式と呼ばれる。また、スカラー場の勾配を表すナブラ演算子 $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$、および、ラプラシアン演算子 $\Delta = \nabla^2 = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ を使えば、式(1)は、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \nabla^2 u = \kappa \Delta u \tag{2}$$

と書ける。

今回の実習ではこの偏微分方程式を数値計算するプログラムを作成、その結果を ParaView で可視化する。

１次元拡散方程式の数値解法

まずは、1 次元の拡散方程式を考える。１次元の場合、式(1)は以下のように書ける。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{3}$$

ここで、u は t と x の関数であるので、$u(t, x)$ である。式(3)をコンピュータで解くには、常微分方程式の時と同様、式(3)を離散化、差分近似しなければならない。時間は Δt の時間幅で、空間は Δx の空間幅で x 方向を離散化する。

まず、式(3)の左辺の時間に関する偏微分であるが、常微分方程式の数値解法で利用したオイラー法で差分近似する。

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u(t + \Delta t, x) - u(t, x)}{\Delta t} \tag{4}$$

また、式（3）の右辺は、Poisson 方程式の時と同様に差分近似する。

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) &\approx \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{u(t, x + \Delta x) - u(t, x)}{\Delta x} - \frac{u(t, x) - u(t, x - \Delta x)}{\Delta x}\right) \\ &= \frac{u(t, x + \Delta x) + u(t, x - \Delta x) - 2u(t, x)}{\Delta x^2}\end{aligned} \tag{5}$$

式(4)と式(5)を式(3)に代入し、整理をすると、以下の u に関する時間発展の式が得られる。

$$u(t + \Delta t, x) = u(t, x) + \kappa\left(\frac{u(t, x + \Delta x) + u(t, x - \Delta x) - 2u(t, x)}{\Delta x^2}\right)\Delta t \tag{6}$$

これは、$u(t, x)$ の時刻 t から Δt だけ未来の u の値 $u(t + \Delta t, x)$ は、時刻 t における、位置 x での u の値 $u(t, x)$ と、その両隣の $x + \Delta x$ と $x - \Delta x$ における u の値、$u(t, x + \Delta x)$ と $u(t, x - \Delta x)$ から計算できるということを意味している（図１）。

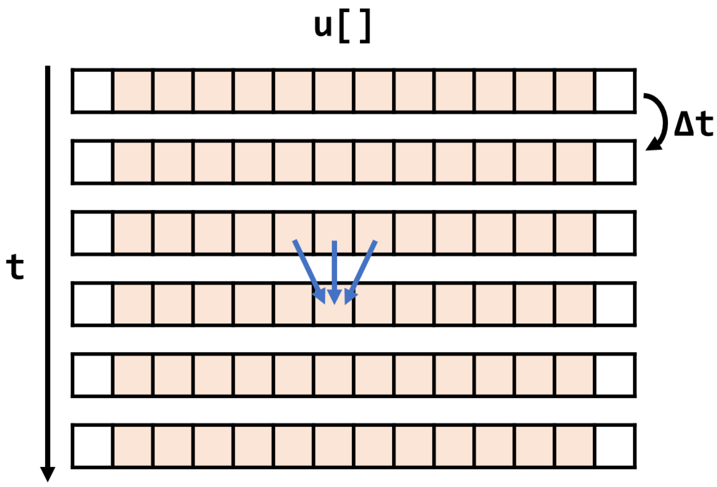

図１　１次元拡散方程式の数値計算のイメージ。中央の矢印で示したように、u[i]をΔt だけ時間発展させるためには、u[i-1],u[i],u[i+1]の情報が必要。また、一次元配列の両末端は境界条件を表現するために必要であり、時間発展させるのは配列の両末端を除いた薄い赤色で示した領域のみであることに注意。

課題 12-1:　１次元拡散方程式の数値計算

物質の一次元拡散方程式は、以下の式で表される。

$$\frac{\partial u(t,x)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2} \tag{7}$$

ここで $u(t,x)$ は、時刻 t、位置 x における物質の濃度であり、D は拡散係数である。（熱の拡散と考え、u を熱・温度、D を熱伝導率ととらえてもらってよい。）以下に記す条件で、式（7）の一次元拡散方程式を数値計算するプログラムを完成させなさい（kadai12-1.c）。計算結果は、ParaView で確認すること。

計算条件：

- x 軸方向の計算領域の長さ（L）： 10（$0 \le x \le 10$ を計算領域とする）
- x 軸方向の空間分割数（N）： 100 （100+1 個の離散化された点）
- タイムステップ Δt (DT)： 0.002
- 最大ステップ数（STEPMAX）： 10000 （シミュレーション時間は $0.002 \times 10000 = 20$）
- 計算結果の出力頻度（INTV）： 100 （100 ステップおきに結果を出力）
- $u(t,x)$ の初期値： *授業内で指示をします*
- 境界条件： $u(t,0) = u(t,10) = 0$（境界条件上の点の値を直に与えるもの“ディリクレ境界条件(Dirichlet boundary conditions)”と呼ぶ)。

注意！

以下プログラムを実行すると、大量の”data_XXXXXXXX.vtk”（XXXXXXXX は数値で連番となる）が生成される。また、これらファイルをローカルの PC にダウンロードし、ParaView で可視化をする。そのため、”KADAI12-1”などのような、新規ディレクトリを作成し、その中でプログラムの作成、実行をした方が良い。そして、ローカルの PC には、このディレクトリ（フォルダ）ごとダウンロードすればよい。課題 12－2 以降も同様。

また、”data_XXXXXXXX.vtk”は容量が大きな場合がある。必要がなくなり次第、削除することを勧める。

【１次元拡散方程式を解くプログラム】

（注意：init 関数、main 関数以外のコードを”kadai12-1.c.template”として配布する。このファイルを基に init 関数、および main 関数部分を作成すればよい。）

```
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>

#define N 100          // X 方向の空間分割数
#define STEPMAX 10000 // 最大ステップ数
#define INTV 100       // 出力頻度のコントロールパラメータ。INTV ステップ毎に結果を出力する。
#define L 10.0         // 計算領域の長さ
#define D 1.0          // 拡散係数
#define DT 0.002       // タイムステップ

double u[N+1] = {0.0} // u をグローバル変数として宣言。配列の大きさに注意。

/* writeVtk 関数（省略） */

int main() {

       /* 変数の宣言（複数行） */

       /* u[:]の初期値の設定 */

       /* 初期状態の出力 */
       step = 0;
       printf("%d\n", step); // 0 ステップ目の“0”を出力。
       writeVtk(step); // 0 ステップ目の系の状態を VTK ファイルに出力。

       /* メインループ */
       for (step=1; step<=STEPMAX; step++) {

              // u 配列のアップデート。式(6)を参考にする。
              // なお、一次元セルオートマトン、ライフゲーム、Poisson 方程式（Jacob 法）と同様に、
              // u 配列を一時的に別の配列にコピーし、その一時配列の値を使って
              // u 配列をアップデートすること。
              // また、u 配列は u[i](i=1~N)のみをアップデートする。

              /* INTV ステップ毎に、結果を出力 */
              if ( /* INTV ステップ毎であるかを判定 */ ) {
                     printf("%d\n", step);
```

```
                    writeVtk(step);
                }

        }

        return 0;
}
```

ParaView での計算結果の可視化は、「拡散律速凝集」の際と同様である。系の中央から、徐々に拡散していく様子が観察できるであろうか？

課題 12-2： ディリクレ境界条件の変更

系の両端で物質の濃度が一定に保たれている状態を仮定する。熱で考えれば、両端がある一定温度の熱浴に結合している状態である。以下で記す初期条件で 1 次元拡散方程式を数値的に解くプログラムを、kadai12-1.c を基に作成し（kadai12-2.c）、ParaView でどのような状態に収束するのかを確認しなさい。特に言及がない条件、パラメータは課題 12-1 と同じとする。

計算条件：

- $u(t,x)$ の初期値： *授業内で指示をします*

課題 12-3： 周期境界条件の適用

以下の条件の 1 次元拡散方程式を数値的に解くプログラムを、kadai12-2.c を基に作成しなさい（kadai12-3.c）。特に言及がない条件、パラメータは課題 12-1 と同じとする。

計算条件：

- $u(t,x)$ の初期値： *授業内で指示をします*
- 境界条件： 周期境界条件

【ヒント】

周期境界条件は u[0]=u[N-1], u[N]=u[1]とすることで実現可能（図２参照）。u[1],u[N-1]の値は毎ステップ変わるため、毎ステップ周期境界条件を適用する必要がある。

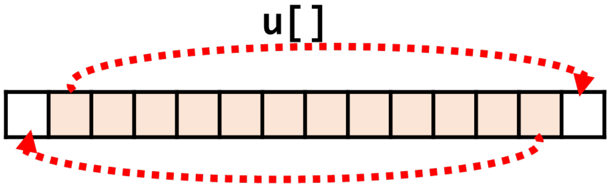

図２　周期境界条件のイメージ

課題 12-4：計算の安定性：タイムステップの大きさについて

ここまで、一次元の偏微分方程式を離散化、差分近似し数値計算するプログラムを作成した。ある時間までの計算をするうえで、当然ながら大きなタイムステップを設定できれば、それだけ速い計算が可能である。一方で、タイムステップを大きくすればするほど、差分近似の精度が悪くなり、計算自身が不安定なものとなってしまう。フォン・ノイマンの安定性解析（Von Neumann stability analysis）は偏微分方程式を有限差分法で解く際の数値的安定性を調べるのに使われる手法である。詳細は参考文献を参照してほしい。この解析は以下の安定性の必要条件を与える。

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\kappa} \tag{8}$$

課題 12-1 で考えれば、$\kappa = D = 1, \Delta x = 0.1, \Delta t = 0.002$であるので、式(8)を満たす（$0.002 \leq 0.005$）。課題 12-1 のプログラムでタイムステップを $\Delta t = 0.004, 0.005, 0.006$ の３つの条件で計算し、計算結果がどのようになるのかを確認しなさい。なお、計算が不安定な場合、プログラムが異常終了することもある。本課題の提出物はない。

２次元拡散方程式の数値解法

２次元拡散方程式は、以下の式で表される。

$$\frac{\partial u(t,x,y)}{\partial t} = \kappa\left(\frac{\partial^2 u(t,x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(t,x,y)}{\partial y^2}\right) \tag{9}$$

u の x に関する 2 階偏微分の差分近似式は、先の式(5)と同じであり、以下の通りである。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u(t, x+\Delta x, y) + u(t, x-\Delta x, y) - 2u(t,x,y)}{\Delta x^2} \tag{10}$$

また、u の y に関する 2 階偏微分の差分近似式は、式(10)と同様であり、

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \approx \frac{u(t, x, y+\Delta y) + u(t, x, y-\Delta y) - 2u(t,x,y)}{\Delta y^2} \tag{11}$$

となる。ここで $\Delta x = \Delta y$ とすると、2 次元のラプラス演算の部分は以下のように簡単となる。

$$\frac{\partial^2 u(t,x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(t,x,y)}{\partial y^2} \approx \frac{u(t,x+\Delta x,y) + u(t,x-\Delta x,y) + u(t,x,y+\Delta x) + u(t,x,y-\Delta x) - 4u(t,x,y)}{\Delta x^2} \tag{12}$$

つまり、**数値計算において位置 (x, y) における u のラプラス演算は、位置 (x, y) の上下左右の u の値の和から、位置 (x, y) での u の値を 4 倍して引いた値に比例**する。したがって、時間積分には、一次元の場合と同様、オイラー法を用いるのであれば、u に関する時間発展の次式で記述される。

$$\begin{aligned} u(t+\Delta t, x, y) &= u(t,x,y) \\ &+\kappa\left(\frac{u(t,x+\Delta x,y) + u(t,x-\Delta x,y) + u(t,x,y+\Delta x) + u(t,x,y-\Delta x) - 4u(t,x,y)}{\Delta x^2}\right)\Delta t \end{aligned} \tag{13}$$

課題 12-5：２次元拡散方程式の数値計算

ここでは、「課題 12-1：１次元拡散方程式の数値計算」の 2 次元版を作成してもらう。２次元拡散方程式は、以下の式で表される。

$$\frac{\partial u(t,x,y)}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 u(t,x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(t,x,y)}{\partial y^2}\right) \tag{14}$$

以下に記す条件で、式（14）の２次元拡散方程式を数値計算するプログラムを完成させなさい（kadai12-5.c）。計算結果は、ParaView で確認すること。特に言及がない条件、パラメータは課題 12-1 と同じとする。

計算条件：

- x 軸、y 軸方向の計算領域の長さ（L）： 10（$0 \leq x \leq 10, 0 \leq y \leq 10$ を計算領域とする）
- x 軸、y 軸方向の空間分割数（N）： 100 （100+1 個の離散化された点）
- $u(t,x,y)$ の初期値： *授業内で指示をします*
- 境界条件： $u = 0$ のディリクレ境界条件

【２次元拡散方程式を解くプログラム】

（注意：main 関数以外のコードを”kadai12-5.c.template”として配布する。このファイルを基に main 関数部分を作成すればよい。）

```
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>

#define N 100          // x,y 方向の空間分割数
#define STEPMAX 10000 // 最大ステップ数
#define INTV 100       // 出力頻度のコントロールパラメータ。INTV ステップ毎に結果を出力する。
#define L 10.0         // x,y 方向の長さ
#define D 1.0          // 拡散係数
#define DT 0.002       // タイムステップ

double u[N+1][N+1] = {0.0}    // u をグローバル変数として宣言。

/* writeVtk 関数（省略） */

int main() {

       // 以降は 1 次元の場合とほぼ同様。kadai12-1.c を基に考える。

       return 0;

}
```

課題 12-6： ディリクレ境界条件の変更

kadai12-5.c を改変し、以下に記す条件で、式（14）の２次元拡散方程式を数値計算するプログラムを完成させなさい（kadai12-6.c）。言及がない条件、パラメータは課題 12-5 と同じ。

計算条件：

- $u(t,x,y)$ の初期値：　*<u>授業内で指示をします</u>*
- 境界条件：　$x = 0$ の境界では $u = 1$、その他の領域は $u = 0$ のディリクレ境界条件

課題 12-7： 周期境界条件の適用

以下の条件の２次元拡散方程式を数値的に解くプログラムを、`kadai12-6.c` を基に作成しなさい（`kadai12-7.c`)。ただし、特に言及がない条件、パラメータは課題 12-5 と同じ。

計算条件：
- $u(t,x,y)$ の初期値：*<u>授業内で指示をします</u>*
- 境界条件：　周期境界条件