拡散方程式

みそ

2005.1.18

1　拡散方程式とは

拡散方程式とは、温度の物質中の伝わり方や、空気中の煙の広がり方など、自然界に多く見られる、徐々に自然に広がっていく現象を表したものである。その形は、

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

今回は、熱の伝わり方を数値計算してみる。

2　１次元拡散方程式

１次元の拡散方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{1}$$

を考える。T は温度、κ は熱伝導係数である。まずテイラー展開より Δt は１次、Δx については２次まで近似するとして、以下の式、

$$T(x, t+\Delta t) = T(x,t) + \frac{\partial T}{\partial t}\Delta t \tag{2}$$

$$T(x+\Delta x, t) = T(x,t) + \frac{\partial T}{\partial x}\Delta x + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(\Delta x)^2 \tag{3}$$

$$T(x-\Delta x, t) = T(x,t) - \frac{\partial T}{\partial x}\Delta x + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(\Delta x)^2 \tag{4}$$

を用意する。式（２）より、

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T(x,t+\Delta t) - T(x,t)}{\Delta t} \tag{5}$$

また、式（3）（4）をたして整理すれば、

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T(x+\Delta x,t)+T(x-\Delta x,t)-2T(x,t)}{(\Delta x)^2} \tag{6}$$

式（5）（6）を式（1）に入れて、整理すれば、

$$T(x,t+\Delta t) = T(x,t)+\kappa\Delta t\frac{T(x+\Delta x,t)+T(x-\Delta x,t)-2T(x,t)}{(\Delta x)^2} \tag{7}$$

さらに、

$$x_{i+1}-x_i = \Delta x$$

$$t_{i+1}-t_i = \Delta t$$

として、(x_i, t_j) の温度を $T(i,j)$ と表すと、

$$T(i,j+1) = T(i,j)+\kappa\Delta t\frac{T(i+1,j)+T(i-1,j)-2T(i,j)}{(\Delta x)^2} \tag{8}$$

となる。この式を利用して数値計算を行う。

もし、調べる熱の媒体が大きいか、熱伝導係数が小さいと温度が変化しなくなる熱平衡まで時間がかかる。そういうときは、新たな変数 x', t' を用いて L を媒体の長さだとすると、

$$x' = \frac{x}{L}$$

$$t' = \frac{\kappa}{L^2}t$$

と無次元化した量を用いて、

$$\frac{\partial T}{\partial t'} = \frac{\partial^2 T}{\partial x'^2}$$

の形にすればよい。結局スケールの大きさや、性質の違いにより変化が違うだけで、基本的に変化は相似であることがわかる。

3 解の安定性

拡散方程式の数値計算について１つ問題点がある。それは、熱伝導係数と Δx 、 Δt のそれぞれの値を変えながら数値計算を行うと結果がおかしくなるところである。これは、数値計算特有の問題で理論的解には問

題ないが数値計算を用いて解を求めるとき先の値について条件範囲がある。これについて調べてみよう。

式 (8) の解としてフーリエ級数を考え以下のように置く。

$$T(i,j) = A_j \sin(\frac{in\pi}{N}) \tag{9}$$

n は任意整数で、係数 A_j は j すなわち時間に依存するということであり、正弦関数を用いたのは境界条件、

$$T(0,j) = T(N,j) = 0 \tag{10}$$

を満たすためである。ここで１次元の系を細かく分けて 0 から N 番目まで番号をふった。式 (9) を式 (8) に入れて三角関数の公式を使い整理すると以下の式が導ける。

$$A_{j+1} = A_j(1 - \frac{4\kappa\Delta t}{(\Delta x)^2}\sin^2\frac{n\pi}{2N}) \tag{11}$$

よって A_j は、

$$A_j = A_0(1 - \frac{4\kappa\Delta t}{(\Delta x)^2}\sin^2\frac{n\pi}{2N})^j \tag{12}$$

となり、式 (9)(12) より $T(i,j)$ は、

$$T(i,j) = A_0(1 - \frac{4\kappa\Delta t}{(\Delta x)^2}\sin^2\frac{n\pi}{2N})^j \sin\frac{in\pi}{N} \tag{13}$$

となる。この解は時間が経過すれば収束しなければならない。そうでなければいつまでたっても熱であれば一定の温度に落ち着かない。収束条件は境界条件より、十分時間が経過したら全体が温度０℃になるから、

$$\lim_{j\to\infty} T(i,j) = 0 \tag{14}$$

となる。式 (13) を見れば収束条件はすなわち、

$$\frac{\kappa\Delta t}{(\Delta x)^2} < \frac{1}{2} \tag{15}$$

である。この式の条件に当てはまるように各パラメータを決定しなければならない。時間間隔を大きくとったり、系の各点の距離を小さくとったりするときは気をつけなければならない。

4　2次元拡散方程式

系を2次元にして数値計算を行いたいときも、1次元の場合と同じようにすればよい。ここで熱伝導係数を κ とする。よって2次元拡散方程式は

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}) \tag{16}$$

である。後は1次元と同様な方法をとればよい。2次元の系に xy 座標をつけ、時刻 t における温度 $T(t,x,y)$ を $T(i,j,k)$ と表せば

$$\begin{aligned}&T(i+1,j,k) = T(i,j,k)\\&+\kappa\Delta t\frac{T(i,j+1,k)+T(i,j-1,k)+T(i,j,k+1)+T(i,j,k-1)-4T(i,j,k)}{(\Delta x)^2}\end{aligned}$$

となる。

また解の安定性については1次元の場合と同様に、まず2次元の系の回りは温度0とする境界条件を設定する。また2次元の系を四角形の形であるとし、系の座標を x 軸 y 軸それぞれ M,N 等分して、それぞれの目盛りに x 軸なら 0〜M、y 軸なら 0〜N と番号をつける。そうすると解 $T(i,j,k)$ はフーリエ級数を用いて

$$T(i,j,k) = A_i \sin\frac{jm\pi}{M}\sin\frac{kn\pi}{N}$$

と表記できる。m,n は任意整数である。これを上の式に代入して整理すると

$$A_{i+1} = A_i(1-\frac{4\kappa\Delta t}{(\Delta x)^2}(\sin^2\frac{m\pi}{2M}+\sin^2\frac{n\pi}{2N}))$$

となる。よってこれから

$$A_i = A_0(1-\frac{4\kappa\Delta t}{(\Delta x)^2}(\sin^2\frac{m\pi}{2M}+\sin^2\frac{n\pi}{2N}))^i$$

最終的に系の温度は0に収束する、すなわち係数 A_i は0に収束するわけだから、上の式から

$$0 < \frac{\kappa\Delta t}{(\Delta x)^2} < \frac{1}{4}$$

であることがわかる。