乾燥過程における固体内水分拡散方程式の数値解（第２報）

―含水率依存性の拡散係数の場合―

山口　信吉，若林嘉一郎

緒　　言

前報[2]では，拡散係数Dを一定とおける場合の１次元拡散方程式の階差表現を介して，拡散現象が確率過程論のマルコフ過程に相当することを明らかにし，空間座標の刻みΔxと時間の刻みΔtを含む無次元項（$D\Delta t/\Delta x^2$）の値を確率論に矛盾しないように決めるべきであることを示した。

拡散係数が含水率の関数になる場合，拡散方程式は非線形となりその数値解法も複雑になる。本報では，前報の線形拡散方程式の階差表現法で得られた知見に基づいて，拡散係数が含水率の関数になる非線形１次元拡散方程式の階差表現法を検討し，注意すべき問題点を指摘する。

１．直交座標の非線形１次元拡散方程式

著者らは，玄米粒内水分の拡散係数Dを測定し，Dが次のように含水率wの関数になることを示した[1]。

$$D=D_0\exp(Cw) \qquad (2-1)$$

ここに，D_0およびCは温度のみの関数であり，含水率に無関係である。通常の等温乾燥では，D_0およびCは定数であると見なしてよい。

1.1　基礎式と境界条件（前報からの再掲を含む）

この場合，拡散係数が含水率の関数になるので，拡散の基礎式は非線形となり，前報[2]の式（１－10）で与えられる。初期条件と境界条件は同報の式（１－12）～（１－14）で与えられる。本報ではそれらに新しく式番号を付けて示すことにする。また，空気流に接する端面での境界条件として，前報では考慮しなかった境界条件２’を設ける。

［基礎式］：
$$\frac{\partial w}{\partial t}=\frac{\partial\{D(\partial w/\partial x)\}}{\partial x}=D\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}+\frac{\partial D}{\partial x}\frac{\partial w}{\partial x} \qquad (2-2)$$

［初期条件］　$t\leqq 0$，$0\leqq x\leqq L$において：$(w)_{t=0}=w_I$　（２－３）

［境界条件１］　$t>0$，$x=0$において：$\left(\dfrac{\partial w}{\partial x}\right)_{x=0}=0$　（２－４）

［境界条件２］　$t>0$，$x=L$において：$(w)_{x=L}=w_e$　（２－５）

上の境界条件２は，空気側の物質移動抵抗が無視できることを意味するものであるが，それを無視することが許されない場合，次のようになると考える。空気の水蒸気分圧p[Pa]と固体の平衡含水率w_e

[kg·(kg−solid)$^{-1}$] との関係（吸着等温線）を近似的に直線で表し，その直線の勾配を M [kg·(kg−solid)$^{-1}$·Pa^{-1}] とする。すると，空気側の水蒸気分圧差推進力（p_s-p）は次式

$$M(p_s-p)=(w_s-w_e)$$

により固体の含水率差（w_s-w_e）に換算され，その換算含水率差を推進力とする物質移動係数 k_w [kg·m^{-2}·s^{-1}·Δw^{-1}] を定義することができる。ここに，p_s は固体表面に接する空気の水蒸気分圧，w_s は固体表面の含水率である。この場合の境界条件は次のように表される。

［境界条件2'］$t>0$，$x=L$ において：$-D\left(\dfrac{\partial w}{\partial x}\right)_{x=L}=k_w(w_s-w_e)$　（2－5'）

1.2　階差法による表現

1.2.1　基礎式の階差表現　　前報と同じ表記法を採用する。ただし，この場合は拡散係数 D が含水率 $w(x_i,t)$ の関数となるので，$D\{w(x_i,t)\}$ と表記すべきであるが，簡略化のためそれを $D(x_i,t)$ のように表すことにする。式（2－2）は次の階差式で表現される。

$$\frac{w(x_i,t+\Delta t)-w(x_i,t)}{\Delta t}=\frac{D(x_i,t)\ \{w(x_{i+1},t)+w(x_{i-1},t)-2w(x_i,t)\}}{\Delta x^2}+\frac{D(x_{i+1},t)-D(x_{i-1},t)}{2\Delta x}\frac{w(x_{i+1},t)-w(x_{i-1},t)}{2\Delta x}$$

これを整理すると次のようになる。

$$w(x_i,t+\Delta t)=\left[1-\left\{\frac{2D(x_i,t)\Delta t}{\Delta x^2}\right\}\right]w(x_i,t)+\left\{\frac{D(x_i,t)\Delta t}{\Delta x^2}\right\}\left[1+\frac{D(x_{i+1},t)-D(x_{i-1},t)}{4D(x_i,t)}\right]w(x_{i+1},t)+\left\{\frac{D(x_i,t)\Delta t}{\Delta x^2}\right\}\left[1-\frac{D(x_{i+1},t)-D(x_{i-1},t)}{4D(x_i,t)}\right]w(x_{i-1},t)\qquad(2-6)$$

上式は $1\leqq i\leqq(m\text{-}1)$ の範囲で用いられる関係であり，両端点 $x=x_0$ および $x=x_m$ の含水率は，別途，境界条件から求めなければならない。

1.2.2　原点（$x=x_0=0$）における関係　　式（2－4）より，原点では含水率分布が対称であるので，$w(x_{+1},t)=w(x_{-1},t)$ となる。式（2－6）で $i=0$ とおき，これを適用すると次の関係が得られる。

$$w(x_0,t+\Delta t)=\left[1-\left\{\frac{2D(x_0,t)\Delta t}{\Delta x^2}\right\}\right]w(x_0,t)+\left\{\frac{2D(x_0,t)\Delta t}{\Delta x^2}\right\}w(x_1,t)\qquad(2-7)$$

1.2.3　表面（$x=x_m=L$）における関係　　表面の境界条件が式（2－5）で与えられる場合は，そこの含水率 $w(x_m,t)$ は常に w_e となるから問題はない。

$$(w)_{x=L}=w(x_m,t)=w_e$$

次にそれが式（2－5'）で与えられる場合の計算法を示す。時刻 $t+\Delta t$ における表面とその近くの地点，x_m, x_{m-1}, x_{m-2} の含水率，$w(x_m,\ t+\Delta t)$, $w(x_{m-1},\ t+\Delta t)$, $w(x_{m-2},\ t+\Delta t)$ が図2-1に示すように与えられているとする。この区間の x 座標を Z とし，含水率分布を次式のように2次方程式で表す。

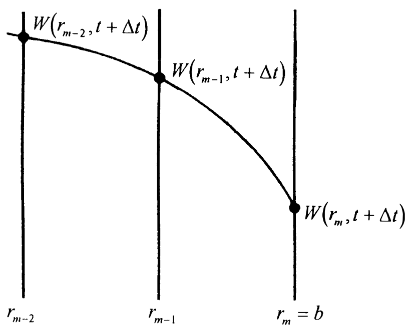

図2-1　球表面近傍の含水率分布
（2次曲線表示）

$$w(Z,t+\Delta t)=c+bZ+aZ^2$$

Zの原点を地点x_{m-1}に一致させると，地点x_{m-2}およびx_mのZ座標はそれぞれ$-\Delta x$および$+\Delta x$となる。ここで，上式の定数c, b, aを定めなけらばならない。まず，上式に$Z=0$を代入するとcが決定される。

$$c=w(x_{m-1},t+\Delta t)$$

次に，$Z=-\Delta x$および$Z=+\Delta x$を代入すると次の関係が得られる。

$$w(x_{m-2},t+\Delta t)=w(x_{m-1},t+\Delta t)-b\Delta x+a\Delta x^2$$
$$w(x_m,t+\Delta t)=w(x_{m-1},t+\Delta t)+b\Delta x+a\Delta x^2$$

この２式より定数b, aは次のように決定される。

$$b=\{w(x_m,t+\Delta t)-w(x_{m-2},t+\Delta t)\}\frac{1}{2\Delta x}$$

$$a=\{w(x_m,t+\Delta t)+w(x_{m-2},t+\Delta t)-2w(x_{m-1},t+\Delta t)\}\frac{1}{2\Delta x^2}$$

上に求められたc, b, aを元の式に代入すると，２次方程式は次のように表される。

$$w(Z,t+\Delta t)=w(x_{m-1},t+\Delta t)+\{w(x_m,t+\Delta t)-w(x_{m-2},t+\Delta t)\}\frac{1}{2\Delta x}\cdot Z$$
$$+\{w(x_m,t+\Delta t)+w(x_{m-2},t+\Delta t)-2w(x_{m-1},t+\Delta t)\}\frac{1}{2\Delta x^2}\cdot Z^2 \qquad (2-8)$$

Z座標によると，境界条件を表す式（２－５'）は次のように表される。

$$-D\left(\frac{\partial w}{\partial Z}\right)_{Z=\Delta x}=k_w\{w(x_m,t+\Delta t)-w_e\} \qquad (2-9)$$

式（２－８）をZで微分し，得られた結果に$Z=\Delta x$を代入すると次のようになる。

$$\left(\frac{\partial w}{\partial Z}\right)_{Z=\Delta x}=\frac{3w(x_m,t+\Delta t)-4w(x_{m-1},t+\Delta t)+w(x_{m-2},t+\Delta t)}{2\Delta x}$$

これを式（２－９）に代入して整理すると，時刻$t+\Delta t$における表面の含水率$w(x_m,t+\Delta t)$を与える次の関係が得られる。

$$w(x_m,t+\Delta t)$$
$$=\frac{2k_w\Delta x w_e+4D(x_m,t+\Delta t)w(x_{m-1},t+\Delta t)-D(x_m,t+\Delta t)w(x_{m-2},t+\Delta t)}{2k_w\Delta x+3D(x_m,t+\Delta t)} \qquad (2-10)$$

ここに，拡散係数$D(x_m,t+\Delta t)$は含水率$w(x_m,t+\Delta t)$の関数である。その拡散係数が複雑な形で右辺に含まれていることより，上式の$w(x_m,t+\Delta t)$は陰関数で与えられていることがわかる。これを解いて$w(x_m,t+\Delta t)$を求めるには，以下に示すtrial and error法によればよい。

まず，式（２－10）右辺の$D(x_m,t+\Delta t)$を$D(x_m,t)$に置き換えて左辺の値，すなわち，$w(x_m,t+\Delta t)$の第１近似値を求め，それを$w(x_m,t+\Delta t)_1$とおく。ここに，$D(x_m,t)$は含水率$w(x_m,t)$を式（２－１）に代入して求められる拡散係数であり，既知の値である。次に，第１近似値$w(x_m,t+\Delta t)_1$を式（２－１）に代入して拡散係数$D(x_m,t+\Delta t)_1$を求め，それを式（２－10）右辺の$D(x_m,t+\Delta t)$に置き換えて計算し，同式左辺の値，すなわち，第２近似値$w(x_m,t+\Delta t)_2$を求める。この試行をｎ回繰り返し，第ｎ近似値$w(x_m,t+\Delta t)_n$と第（ｎ－１）近似値$w(x_m,t+\Delta t)_{n-1}$との差の絶対値が予め設定しておいた

微小値以下になったならば，第n近似値を$w(x_m,t+\Delta t)$と見なす。

1.3　確率論による検討

式（2－6）を前報の確率過程論に照らして検討する。前報によると，$D(x_i,t)\Delta t/\Delta x^2$が遷移確率$\beta\Delta t$に相当し，$(1-2\beta\Delta t)$が補遷移確率に相当する。前報の図1-2を参照すると，拡散係数一定の場合遷移確率$\beta\Delta t$は左右とも等しくなるが，上式の場合，右側の遷移確率$\beta_1\Delta t$と左側のそれ$\beta_2\Delta t$とは等しくならない。ここに，$D(x_i,t)\Delta t/\Delta x^2=\beta_0\Delta t$とおくと$\beta_1$，$\beta_2$は次のように表される。

$$\beta_1=\beta_0\left[1+\frac{D(x_{i+1},t)-D(x_{i-1},t)}{4D(x_i,t)}\right] \qquad (2-11)$$

$$\beta_2=\beta_0\left[1-\frac{D(x_{i+1},t)-D(x_{i-1},t)}{4D(x_i,t)}\right]$$

これより，$\beta_1+\beta_2=2\beta_0$となることがわかる。ここで，次の関係

$$1<\left|\frac{D(x_{i+1},t)-D(x_{i-1},t)}{4D(x_i,t)}\right| \qquad (2-12)$$

が成立する場合，β_1かβ_2のいずれかが負となり確率論に整合しなくなる。式（2－12）が成立する恐れがあるのは，(1)拡散係数が含水率によって大きく変化し，(2)刻みΔxの設定値が大きく，かつ，(3)含水率勾配が大きい場合である。通常の乾燥問題の解析において式（2－12）が成立することは滅多にないと思われるが，常にそれが成立しないという保証もない。したがって，非線形拡散方程式の求解にあたり，式（2－6）を用いる解析法は一般性に欠けることになる。

2．球内の半径方向の1次元拡散

2.1　基礎式と境界条件（前報からの再掲を含む）

球内の1次元拡散の基礎式は，拡散係数が含水率依存性を示す場合は前報の式（1－21）で表され，初期条件，境界条件は前報の式（1－23）～（1－25）で与えられる。次に，それらに新しく式番号を付けて示す。また，球表面における境界条件として，前報と同じ境界条件2のほかに，前報では考慮しなかった境界条件2'を設定する。

［基礎式］ $$\frac{\partial w}{\partial t}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial\{r^2D(\partial w/\partial r)\}}{\partial r}=D\frac{\partial^2 w}{\partial r^2}+\frac{\partial D}{\partial r}\frac{\partial w}{\partial r}+\frac{2D}{r}\frac{\partial w}{\partial r} \qquad (2-13)$$

［初期条件］$t\leqq 0$，$0\leqq r\leqq b$において：　$(w)_{t=0}=w_I$　（2－14）

［境界条件1］$t>0$，$r=0$において：　$\left(\dfrac{\partial w}{\partial r}\right)_{r=0}=0$　（2－15）

［境界条件2］$t>0$，$r=b$において：　$(w)_{r=b}=w_e$　（2－16）

上の式（2－16）は空気側の物質移動抵抗を無視した関係を表す。空気側の物質移動抵抗を無視できない場合は，式（2－5'）と同様に次のように表される。

［境界条件2'］$t>0$，　$r=b$において：$-D\left(\dfrac{\partial w}{\partial r}\right)_{r=b}=k_w(w_s-w_e)$　（2－16'）

2.2　階差法の応用

2.2.1　基礎式の階差表現

基礎式，式（2－13），を階差表現すると次のようになる。

$$\frac{w(r_i,t+\Delta t)-w(r_i,t)}{\Delta t}=\frac{D(r_i,t)}{\Delta r^2}\ \{w(r_{i+1},t)+w(r_{i-1},t)-2w(r_i,t)\}$$
$$+\left(\frac{1}{2\Delta r}\right)^2\ \{D(r_{i+1},t)-D(r_{i-1},t)\}\{w(r_{i+1},t)-w(r_{i-1},t)\}$$
$$+\frac{2D(r_i,t)}{i\Delta r}\frac{1}{2\Delta r}\ \{w(r_{i+1},t)-w(r_{i-1},t)\}$$

これを整理すると次式が得られる。

$$w(r_i,t+\Delta t)=\left[1-\left\{\frac{2\Delta tD(r_i,t)}{\Delta r^2}\right\}\right]w(r_i,t)$$
$$+\left[\left\{\frac{\Delta tD(r_i,t)}{\Delta r^2}\right\}\left\{1+\frac{1}{i}\right\}+\frac{\Delta t}{4\Delta r^2}\ \{D(r_{i+1},t)-D(r_{i-1},t)\}\right]w(r_{i+1},t)$$
$$+\left[\left\{\frac{\Delta tD(r_i,t)}{\Delta r^2}\right\}\left\{1-\frac{1}{i}\right\}+\frac{\Delta t}{4\Delta r^2}\ \{D(r_{i+1},t)-D(r_{i-1},t)\}\right]w(r_{i-1},t)$$
$$=\left[1-\left\{\frac{2\Delta tD(r_i,t)}{\Delta r^2}\right\}\right]w(r_i,t)+\left\{\frac{\Delta tD(r_i,t)}{\Delta r^2}\right\}\left[\left\{1+\frac{1}{i}\right\}+\frac{D(r_{i+1},t)-D(r_{i-1},t)}{4D(r_i,t)}\right]w(r_{i+1},t)$$
$$+\left\{\frac{\Delta tD(r_i,t)}{\Delta r^2}\right\}\left[\left\{1-\frac{1}{i}\right\}-\frac{D(r_{i+1},t)-D(r_{i-1},t)}{4D(r_i,t)}\right]w(r_{i-1},t) \qquad (2-17)$$

2.2.2　球中心における関係　　球の中心（$r=0$）では，前報の式（１－28）と同様に次の関係が成立する。

$$w(r_0,t+\Delta t)=\left[1-\left\{\frac{6\Delta tD(r_0,t)}{\Delta r^2}\right\}\right]w(r_0,t)+\left\{\frac{6\Delta tD(r_0,t)}{\Delta r^2}\right\}w(r_1,t) \qquad (2-18)$$

2.2.3　球表面における関係　　式（２－16）が成立すれば表面含水率 $w(r_m,t)$ は常に w_e に一致する。式（２－16'）が成立する場合は，式（２－10）におけると同様に次の関係を用いればよい。

$$w(r_m,t+\Delta t)=\frac{2k_w\Delta rw_e+4D(r_m,t+\Delta t)w(r_{m-1},t+\Delta t)-D(r_m,t+\Delta t)w(r_{m-2},t+\Delta t)}{2k_w\Delta r+3D(r_m,t+\Delta t)} \qquad (2-19)$$

2.3　確率論による検討

次に，この場合（非線形拡散）の結果を前報に述べた確率過程論と比較して検討する。式（２－17）において，$\beta_0=D(r_i,t)\Delta t/\Delta r^2$ とおいて次のように β_1 と β_2 を定義する。

$$\beta_1=\beta_0\frac{\{1+(1/i)\}\ +\ \{D(r_{i+1},t)-D(r_{i-1},t)\}}{4D(r_i,t)}$$
$$\beta_2=\beta_0\frac{\{1-(1/i)\}\ -\ \{D(r_{i+1},t)-D(r_{i-1},t)\}}{4D(r_i,t)} \qquad (2-20)$$

すると，$\beta_1\Delta t$ および $\beta_2\Delta t$ を遷移確率とみなすことができる。ここで，$i=1$ の場合，$[1-(1/i)]=0$ であり，$D(r_{i+1},t)>D(r_{i-1},t)$ のとき $\beta_2<0$ となり，容易に確率論に矛盾することがわかる。すなわち，式（２－17）による計算法は一般性に欠けることになる。また球中心の式（２－18）において，$(1-6\beta_0\Delta t)$ が補遷移確率に相当することより，前報と同様に，$0\leqq D(r_i,t)\Delta t/\Delta r^2\leqq 1/6$ が制約条件となることがわかる。

結　　言

拡散係数が含水率の関数で与えられると拡散の基礎式は非線形となる。この場合の基礎式を階差表現し，前報[2]で示された拡散現象と確率過程論の関係に準拠して検討したところ，この階差表現による数値計算法には確率論に整合しない恐れがあることがわかった。とくに球の乾燥の場合，矛盾を生じる可能性が高いことが示された。続報では，この矛盾を解消する計算法を検討する。

使用記号

b：球半径	[m]
C：式（2－1）の定数	[$kg^{-1}\cdot kg-solid$]
D：拡散係数	[$m^2\cdot s^{-1}$]
D_0：式（2－1）の定数	[$m^2\cdot s^{-1}$]
k_w：含水率差基準物質移動係数	[$kg\cdot m^{-2}\cdot s^{-1}\cdot \Delta w^{-1}$]
L：長さ	[m]
p：水蒸気分圧	[Pa]
r：半径座標	[m]
t：時間	[s]
w：含水率（乾量基準）	[$kg\cdot(kg-solid)^{-1}$]
x：長さ方向座標	[m]
$\beta\Delta t$：遷移確率	[－]
Δr，Δx：長さ座標の刻み	[m]
Δt：時間の刻み	[s]

引用文献

1）Yamaguchi,S.: *Proc. 8th Int. Drying Symp.*, Part B, p.1389(1992)
2）山口信吉，若林嘉一郎：乾燥過程における固体内水分拡散方程式の数値解（第1報），富山大学工学部紀要，**47**，141(1996)

Numerical solution for Moisture Diffusion Equation in Solid during Drying Process (Part 2)

— Moisture Dependent Diffusivity —

Shinkichi YAMAGUCHI and Kaichiro WAKABAYASHI

Summary

It has been known that the moisture diffusivity in some solids depends on moisture content. For one-dimensional diffusion in a rectangular-coordinate and for radial diffusion in a sphere, a finite-diference method was described to obtain the numerical solution of the diffusion equations for moisture-dependent diffusivity, then the accuracy and convergence of the solutions were discussed. It was pointed out that the finite-difference method for the moisture dependent diffusivity had a fear of a contradiction in the light of the stochastic process theory as mentioned previous paper.

〔英文和訳〕

乾燥過程における固体内水分拡散方程式の数値解（第２報）

—含水率依存性の拡散係数の場合—

山口　信吉，若林嘉一郎

固体内の水分拡散係数は含水率に依存することが知られている。含水率依存性の拡散係数の場合の拡散方程式の数値解を得るために直交座標の１次元拡散および球の半径方向拡散に関する階差法が示され，解の精度と収束が検討された。この含水率依存性の拡散係数の場合の階差法は，既報で論じた確率過程論に照らして矛盾の恐れを持つことを指摘した。