

乾燥過程における固体内水分拡散方程式の数値解（第3報）

—関数 $\phi = \int Ddw$ の導入—

山口 信吉, 若林嘉一郎

結 言

本研究の第1報²⁾では、拡散現象を確率過程とみなせることを示した。第2報³⁾では、拡散係数 D が含水率 w に依存する場合、拡散方程式を階差法で解くとき確率論に矛盾する恐れがあることを指摘した。本報では、含水率の関数 $\phi (= \int Ddw)$ の導入によりこの矛盾を解消し得ることを示し、球の乾燥における関数 ϕ および含水率 w の数値解析法を述べる。

1. 関数 ϕ の定義

前報の式(2-1)に示したように、拡散係数は次のように表されるものとする¹⁾。

$$D = D_0 \exp(Cw) \quad (3-1)$$

ここに、 D_0 および C は含水率に無関係（温度 T の関数）であり、通常の等温乾燥では定数と考えてよい。本報では等温乾燥を対象として、含水率の関数 $\phi(w)$ を次のように定義する。

$$\phi(w) = \int D(w)dw = D_0 \int \exp(Cw)dw \quad (3-2)$$

上の関数 ϕ の計算に当たり、積分範囲を定めなければならない。積分の下限を $w = 0$ とおくよりも $w = -\infty$ とするほうが演算結果は簡潔となる。含水率の負の値 ($-\infty$) は物理的に無意味であるが、これを単なる数学的な変数変換の手段と考えることとし、本報では次の表現を採用する。

$$\phi(w) = D_0 \int_{-\infty}^w \exp(Cw')dw' = \frac{D_0}{C} \exp(Cw) = \frac{D(w)}{C} \quad (3-3)$$

$$\therefore w = \frac{1}{C} \ln \left\{ \frac{C\phi(w)}{D_0} \right\} \quad (3-4)$$

これより、次の諸関係が成立することがわかる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial w} &= D, & \frac{\partial D}{\partial \phi} &= C, & \frac{\partial w}{\partial t} &= \frac{\partial w}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{D} \frac{\partial \phi}{\partial t} \\ \frac{\partial w}{\partial x} &= \frac{\partial w}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{D} \frac{\partial \phi}{\partial x} \end{aligned} \quad (3-5)$$

2. 関数 ϕ による基礎式と条件式の表示およびその階差表現

2.1 直交座標の1次元拡散

式(3-5)を応用して前報の式(2-2)を変形する。前報の式(2-2)左辺は式(3-5)より $\partial w / \partial t = (1/D)(\partial \phi / \partial t)$ となり、右辺は $\partial [D(\partial w / \partial x)] / \partial x = \partial [D(1/D)(\partial \phi / \partial x)] / \partial x = \partial^2 \phi / \partial x^2$ となるので、次の関係が得られる。

$$[\text{基礎式}] : \frac{\partial \phi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (3-6)$$

また、前報の式(2-3)～(2-5')より初期条件、境界条件は次のようになる。

$$[\text{初期条件}] t \leq 0, 0 \leq x \leq L \text{ において: } (\phi)_{t=0} = \frac{D_0}{C} \exp(Cw_i) = \frac{D(w_i)}{C} \quad (3-7)$$

$$[\text{境界条件1}] t > 0, x = 0 \text{ において: } \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{x=0} = 0 \quad (3-8)$$

$$[\text{境界条件2}] t > 0, x = L \text{ において: } (\phi)_{x=L} = \frac{D_0}{C} \exp(Cw_e) = \frac{D(w_e)}{C} \quad (3-9)$$

[境界条件2'] $t > 0, x = L$ において:

$$-\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{x=L} = \frac{k_w}{C} \left[\ln \left\{ \frac{C \phi(w_s)}{D_0} \right\} - \ln \left\{ \frac{C \phi(w_e)}{D_0} \right\} \right] = \frac{k_w}{C} \ln \left\{ \frac{\phi(w_s)}{\phi(w_e)} \right\} \quad (3-9')$$

上の関係を階差表現するとき、 ϕ は含水率の関数であるから、 $\phi[w(x_i, t)]$ のように表すべきであるが、本報ではそれを $\phi(x_i, t)$ と記す。 x の増分を δ とおくと、基礎式の階差表現は次のようになる。

$$\begin{aligned} \phi(x_i, t + \Delta t) = & \left[1 - \left\{ \frac{2D(x_i, t)\Delta t}{\delta^2} \right\} \right] \phi(x_i, t) \\ & + \left\{ \frac{D(x_i, t)\Delta t}{\delta^2} \right\} \{ \phi(x_i + \delta, t) + \phi(x_i - \delta, t) \} \end{aligned} \quad (3-10)$$

原点 ($x = 0$) では次の関係が応用される(前報の式(2-7)の誘導参照)。

$$\phi(x_0, t + \Delta t) = \left[1 - \left\{ \frac{2D(x_0, t)\Delta t}{\delta^2} \right\} \right] \phi(x_0, t) + \left\{ \frac{2D(x_0, t)\Delta t}{\delta^2} \right\} \phi(x_0 + \delta, t) \quad (3-11)$$

端面 ($x = L$) の境界条件が式(3-9)で与えられる場合、そこでの ϕ は定数 $D(w_e)/C$ となる。それが式(3-9')で与えられる場合は次のようになる(前報の式(2-10)の誘導参照)。

$$\begin{aligned} \phi(x_m, t + \Delta t) = & -\frac{2k_w \Delta x}{3C} \ln \left\{ \frac{\phi(x_m, t + \Delta t)}{\phi(w_e)} \right\} \\ & -\frac{1}{3} \phi(x_{m-2}, t + \Delta t) + \frac{4}{3} \phi(x_{m-1}, t + \Delta t) \end{aligned} \quad (3-12)$$

2.2 球内の半径方向1次元拡散

前報の式(2-13)の左辺は式(3-5)より $(1/D)(\partial \phi / \partial t)$ となる。また、式(3-5)より $\partial w / \partial r = (1/D)(\partial \phi / \partial r)$ であるから、前報の式(2-13)の右辺 $(1/r^2) [\partial \{r^2 D(\partial w / \partial r)\} / \partial r]$ は $(1/r^2) [\partial \{r^2 (\partial \phi / \partial r)\} / \partial r]$ となり、これを展開して左辺に等しいとおくと次の基礎式が得られる。

$$[\text{基礎式}] : \frac{\partial \phi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{2D}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} = \frac{D}{r^2} \frac{\partial \{r^2 (\partial \phi / \partial r)\}}{\partial r} \quad (3-13)$$

前報の式(2-14)～(2-16')より初期条件、境界条件は次のようになる。

$$[\text{初期条件}] \quad t \leq 0, \quad 0 \leq r \leq b \text{ において: } (\phi)_{t=0} = \frac{D_0}{C} \exp(Cw_i) = \frac{D(w_i)}{C} \quad (3-14)$$

$$[\text{境界条件 1}] \quad t > 0, \quad r = 0 \text{ において: } \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_{r=0} = 0 \quad (3-15)$$

$$[\text{境界条件 2}] \quad t > 0, \quad r = b \text{ において: } (\phi)_{t=b} = \frac{D_0}{C} \exp(Cw_s) = \frac{D(w_s)}{C} \quad (3-16)$$

[境界条件 2'] $t > 0, r = b$ において:

$$-\left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_{r=b} = \frac{k_w}{C} \left[\ln \left\{ \frac{C \phi(w_i)}{D_0} \right\} - \ln \left\{ \frac{C \phi(w_s)}{D_0} \right\} \right] = \frac{k_w}{C} \ln \left\{ \frac{\phi(w_s)}{\phi(w_i)} \right\} \quad (3-16')$$

r の増分を δ とおいて基礎式を階差表現すると, $1 \leq i \leq (m-1)$ に適用できる次式が得られる。

$$\begin{aligned} \phi(r_i, t + \Delta t) &= \phi(r_i, t) + \left\{ \frac{\Delta t D(r_i, t)}{r_i \delta} \right\} \{ \phi(r_i + \delta, t) - \phi(r_i - \delta, t) \} \\ &\quad + \left\{ \frac{\Delta t D(r_i, t)}{\delta^2} \right\} \{ \phi(r_i + \delta, t) + \phi(r_i - \delta, t) - 2\phi(r_i, t) \} \\ &= \left[1 - \left\{ \frac{2 \Delta t D(r_i, t)}{\delta^2} \right\} \right] \phi(r_i, t) \\ &\quad + \left\{ \frac{\Delta t D(r_i, t)}{\delta^2} \right\} \left\{ 1 + \frac{\delta}{i \Delta r} \right\} \phi(r_i + \delta, t) \\ &\quad + \left\{ \frac{\Delta t D(r_i, t)}{\delta^2} \right\} \left\{ 1 - \frac{\delta}{i \Delta r} \right\} \phi(r_i - \delta, t) \end{aligned} \quad (3-17)$$

球の中心 ($r=0$) では, 前々報の式 (1-28) と同様に次の関係が成立する。

$$\phi(r_0, t + \Delta t) = \left[1 - \left\{ \frac{6 \Delta t D(r_0, t)}{\delta^2} \right\} \right] \phi(r_0, t) + \left\{ \frac{6 \Delta t D(r_0, t)}{\delta^2} \right\} \phi(r_0 + \delta, t) \quad (3-18)$$

球表面 ($r=b$) の境界条件が式 (3-16) で与えられる場合, その ϕ は定数 $D(w_s)/C$ となる。

$$\phi(r_m, t) = \phi(r_m, t + \Delta t) = \phi(w_s) = (D_0/C) \exp(Cw_s) \quad (3-19)$$

それが式 (3-16') で与えられる場合は次のようになる (前報の式 (2-10) の誘導参照)。

$$\begin{aligned} \phi(r_m, t + \Delta t) &= -\frac{2k_w \Delta r}{3C} \ln \left\{ \frac{\phi(r_m, t + \Delta t)}{\phi(w_s)} \right\} \\ &\quad - \frac{1}{3} \phi(r_{m-2}, t + \Delta t) + \frac{4}{3} \phi(r_{m-1}, t + \Delta t) \end{aligned} \quad (3-19')$$

2.3 確率過程論による検討

直角座標の1次元拡散の場合は式 (3-10) より, $D(x_i, t) \Delta t / \delta^2$ が遷移確率 $\beta \Delta t$ に相当し, $1 - \{2D(x_i, t) \Delta t / \delta^2\}$ が補遷移確率に相当することがわかる。この場合は, 基礎式を直接階差表現した場合とは異なり, 前報の式 (2-11) の β_1, β_2 に含まれるような矛盾の恐れはない。すなわち, 関数 ϕ を介して階差表現すると非線形の場合でも確率論に矛盾することなく計算できることが示された。この場合の制約は, 補遷移確率の領域を $0 \sim 1$ に保つことより, 次式で与えられる。

$$0 \leq D(x_i, t) \frac{\Delta t}{\delta^2} \leq \frac{1}{2} \quad (3-20)$$

一方球の半径方向1次元拡散の場合, 式 (3-17) より, $\beta_0 \Delta t = D(r_i, t) \Delta t / \delta^2$ とおくと遷移確率は $\beta_1 \Delta t = \beta_0 \Delta t \{1 + (\delta / i \Delta r)\}$ および $\beta_2 \Delta t = \beta_0 \Delta t \{1 - (\delta / i \Delta r)\}$ となり, 補遷移確率は $(1 - 2\beta_0 \Delta t)$ となることがわかる。この場合 $\beta_1 \neq \beta_2$ であるが, β_2 において $i=1$ の場合より次の関係

$$\delta \leq \Delta r \tag{3-21}$$

を満足し、かつ、補遷移確率より $\beta_0 \Delta t \leq 1/2$ なる制約を満足すれば、矛盾無く計算できることになる。しかし、式(3-18)より球中心では $(1 - 6\beta_0 \Delta t)$ および $(6\beta_0 \Delta t)$ が補遷移確率および遷移確率に相当するので、上記の $\beta_0 \Delta t \leq 1/2$ よりも厳しい次の制約が必要条件となる。

$$0 \leq \frac{\Delta t D(r_i, t)}{\delta^2} \leq \frac{1}{6} \tag{3-22}$$

すなわち、これらの制約が保持されれば確率論に矛盾しないことになる。

2.4 Δr と δ について

階差法では、 Δt と Δr (または Δx) を一定とし、かつ、確率論に矛盾しないように遷移確率を設定しなければならない。前々報²⁾に示したように拡散係数を定数とみなせる場合には、 Δt を一定として、遷移確率を一定値に選べば Δr も一定となる。しかし拡散係数が定数でない場合、例えば、式(3-22)において Δt を一定とし遷移確率 $\Delta t D(r_i, t) / \delta^2$ を定数 K とおくと ($K \leq 1/6$)、増分 δ は次のように、拡散係数 $D(r_i, t)$ の関数、すなわち、 $\phi(r_i, t)$ の関数となる。

$$\delta(r_i, t) = \pm \left\{ \frac{\Delta t D(r_i, t)}{K} \right\}^{\frac{1}{2}} = \pm \left\{ \frac{\Delta t C \phi(r_i, t)}{K} \right\}^{\frac{1}{2}} \tag{3-23}$$

図3-1には、任意の地点 r_i およびそこから $\pm \Delta r$ の地点 r_{i-1} と r_{i+1} に垂線を引き、縦座標に ϕ をとってある。図の破線は式(3-23)で与えられる δ と ϕ の関係を描いたものである。この場合、 δ を介して ϕ の計算を進めることになり、計算法は複雑になる。次にその計算法を示す。

3. 球の乾燥における ϕ 分布の計算法

上述のように ϕ 分布の計算においては可変の増分 δ を考慮しなければならない。本報では、以下に球の乾燥における計算法を示すが、この計算法は直交座標の1次元拡散にも応用できる。

3.1 折れ線分布に基づく方法

任意時刻 t における地点 r_i 、 r_{i-1} および r_{i+1} の ϕ の値、 $\phi(r_i, t)$ 、 $\phi(r_{i-1}, t)$ および $\phi(r_{i+1}, t)$ は既知とし、図3-1を用いて ϕ 分布計算の原理を示す。図には ϕ の分布を折れ線で表し、式(3-23)を満足するように、 r_i からの距離 $\pm \delta$ と ϕ の関係を破線で描いてある。図のように、 $\phi(r_i, t)$ を通る水平線を引くと、破線との交点までの距離が $\pm \delta(r_i, t)$ となる。すると、 $r_i - \delta$ の位置に立てた垂線と ϕ 分布 (折れ線) との交点が $\phi(r_i - \delta, t)$ となり、 $r_i + \delta$ の位置に立てた垂線と ϕ 分布との交点が $\phi(r_i + \delta, t)$ となる。この両値と δ を式(3-17)に代入すれば Δt 後における r_i の ϕ の値、 $\phi(r_i, t + \Delta t)$ が求められる。

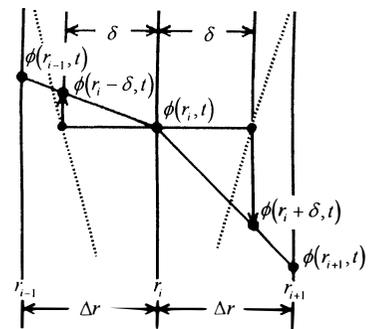


図3-1 ϕ 分布

上の図解の原理に基づき、次に代数的解法を示す。図の区間 $r_{i-1} \sim r_{i+1}$ の r 座標を Z で表し、 Z の原点を r_i とする。すると、 $\phi(r_{i-1}, t)$ と $\phi(r_i, t)$ を結ぶ直線および $\phi(r_i, t)$ と $\phi(r_{i+1}, t)$ を結ぶ直線の方程式はそれぞれ次の式(3-24) および (3-25) となる。

$$\phi(Z,t) = \frac{1}{\Delta r} \{ \phi(r_i,t) - \phi(r_{i-1},t) \} Z + \phi(r_i,t) \quad (3-24)$$

$$\phi(Z,t) = \frac{1}{\Delta r} \{ \phi(r_{i+1},t) - \phi(r_i,t) \} Z + \phi(r_i,t) \quad (3-25)$$

式(3-24)に $Z = -\delta$ を代入すると $\phi(r_i - \delta, t)$ が求められ、式(3-25)に $Z = \delta$ を代入すると $\phi(r_i + \delta, t)$ が求められる。

$$\phi(r_i - \delta, t) = \frac{\delta}{\Delta r} \{ \phi(r_{i-1},t) - \phi(r_i,t) \} + \phi(r_i,t) \quad (3-26)$$

$$\phi(r_i + \delta, t) = \frac{\delta}{\Delta r} \{ \phi(r_{i+1},t) - \phi(r_i,t) \} + \phi(r_i,t) \quad (3-27)$$

上の2式の和および差より次の関係が得られる。

$$\phi(r_i + \delta, t) + \phi(r_i - \delta, t) = \frac{\delta}{\Delta r} \{ \phi(r_{i+1},t) + \phi(r_{i-1},t) - 2\phi(r_i,t) \} + 2\phi(r_i,t) \quad (3-28)$$

$$\phi(r_i + \delta, t) - \phi(r_i - \delta, t) = \frac{\delta}{\Delta r} \{ \phi(r_{i+1},t) - \phi(r_{i-1},t) \} \quad (3-29)$$

これらを式(3-17)に代入して整理すると次のようになる。

$$\begin{aligned} \phi(r_i, t + \Delta t) = & \left[1 - \left\{ \frac{2 \Delta t D(r_i, t)}{\Delta r \delta} \right\} \right] \phi(r_i, t) \\ & + \left\{ \frac{\Delta t D(r_i, t)}{\Delta r \delta} \right\} \left\{ 1 + \frac{\delta}{i \Delta r} \right\} \phi(r_{i+1}, t) \\ & + \left\{ \frac{\Delta t D(r_i, t)}{\Delta r \delta} \right\} \left\{ 1 - \frac{\delta}{i \Delta r} \right\} \phi(r_{i-1}, t) \end{aligned} \quad (3-30)$$

上式に式(3-3)および(3-23)の関係を適用すると、 $\phi(r_i, t + \Delta t)$ を求める最終の式が得られる。

$$\begin{aligned} \phi(r_i, t + \Delta t) = & \left[1 - 2 \left\{ \frac{KC \Delta t \phi(r_i, t)}{\Delta r^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \right] \phi(r_i, t) \\ & + \left\{ \frac{KC \Delta t \phi(r_i, t)}{\Delta r^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{1}{i} \left\{ \frac{C \Delta t \phi(r_i, t)}{K \Delta r^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \right] \phi(r_{i+1}, t) + \left\{ \frac{KC \Delta t \phi(r_i, t)}{\Delta r^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{1}{i} \left\{ \frac{C \Delta t \phi(r_i, t)}{K \Delta r^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \right] \phi(r_{i-1}, t) \end{aligned} \quad (3-31)$$

ただし、上式の適用範囲は $1 \leq i \leq (m-1)$ であり、球中心($r=r_0=0$)および表面($r=r_m=b$)では以下に示すように、別途、境界条件より求めなければならない。

球中心では式(3-18)が成立するが、同式において $\phi(r_0 + \delta, t)$ を定めなければならない。時刻 t における地点 $r=r_0=0$ および $r=r_1=\Delta r$ の ϕ の値、 $\phi(r_0, t)$ および $\phi(r_1, t)$ は既知であるとする。区間 $r_0 \sim r_1$ の r 座標を Z で表すと、 $r_0 \leq Z \leq r_1$ の ϕ 分布はそれらの2点を結ぶ直線で与えられる。

$$\phi(Z,t) = \phi(r_0,t) + \frac{1}{\Delta r} \{ \phi(r_1,t) - \phi(r_0,t) \} Z \quad (3-32)$$

上式で $Z = \delta$ とおくと $\phi(r_0 + \delta, t)$ が得られる。

$$\begin{aligned} \phi(r_0 + \delta, t) &= \phi(r_0, t) + \frac{\delta(r_0, t)}{\Delta r} \{ \phi(r_1, t) - \phi(r_0, t) \} \\ &= \phi(r_0, t) + \left\{ \frac{C \Delta t \phi(r_0, t)}{K \Delta r^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \{ \phi(r_1, t) - \phi(r_0, t) \} \end{aligned}$$

ここでは、式(3-23)が応用された。上式を式(3-18)に代入して整理すると次のようになる。

$$\phi(r_0, t + \Delta t) = \left[1 - 6 \left\{ \frac{KC \Delta t \phi(r_0, t)}{\Delta r^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \phi(r_0, t) + 6 \left\{ \frac{KC \Delta t \phi(r_0, t)}{\Delta r^2} \right\} \phi(r_1, t) \right] \quad (3-33)$$

球表面 ($r=r_m=b$) の境界条件が式 (3-16) で与えられる場合、 ϕ は式 (3-19) のように定数となる。次に、それが式 (3-16') で与えられる場合を考える。時刻 $t + \Delta t$ における地点 r_{m-1} および r_m の ϕ の値 $\phi(r_{m-1}, t + \Delta t)$ および $\phi(r_m, t + \Delta t)$ を結ぶ直線で ϕ 分布が表されるとすれば、式 (3-16') の左辺は次のようになる。

$$\left\{ \frac{\partial \phi(r, t + \Delta t)}{\partial r} \right\}_{r=b} = \frac{\phi(r_m, t + \Delta t) - \phi(r_{m-1}, t + \Delta t)}{\Delta r}$$

したがって、式 (3-16') より次の関係がえられる。

$$\phi(r_m, t + \Delta t) = \phi(r_{m-1}, t + \Delta t) - \frac{k_w \Delta r}{C} \ln \left\{ \frac{\phi(r_m, t + \Delta t)}{\phi(w_s)} \right\} \quad (3-34)$$

上式左辺は陰関数で与えられているので、これを解いて左辺の $\phi(r_m, t + \Delta t)$ を求めるには前報の式 (2-10) および (2-19) の場合と同様に、trial and error法を応用すればよい。

3.2 2次曲線分布に基づく方法

図3-1において、 ϕ 分布を2次方程式で表すと次式となる (前報の式 (2-8) の誘導参照)。

$$\begin{aligned} \phi(Z, t) = \phi(r_i, t) + \frac{1}{2 \Delta r} \{ \phi(r_{i+1}, t) - \phi(r_{i-1}, t) \} \cdot Z \\ + \frac{1}{2 \Delta r^2} \{ \phi(r_{i+1}, t) + \phi(r_{i-1}, t) - 2 \phi(r_i, t) \} \cdot Z^2 \end{aligned} \quad (3-35)$$

図に上式の2次曲線を描き、 $r_i - \delta$ および $r_i + \delta$ の位置に立てた垂線と2次曲線との交点の高さを読み取れば、それぞれ $\phi(r_i - \delta, t)$ および $\phi(r_i + \delta, t)$ となる。それらを式 (3-17) に代入すれば、 $\phi(r_i, t + \Delta t)$ を求めることができる。これが図解による計算法であるが、以下にこの図解法に基づく代数的解法を示す。

式 (3-35) に $Z = \pm \delta$ を代入すると次のようになる。

$$\begin{aligned} \phi(r_i + \delta, t) = \phi(r_i, t) + \frac{\delta}{2 \Delta r} \{ \phi(r_{i+1}, t) - \phi(r_{i-1}, t) \} \\ + \frac{\delta^2}{2 \Delta r^2} \{ \phi(r_{i+1}, t) + \phi(r_{i-1}, t) - 2 \phi(r_i, t) \} \\ \phi(r_i - \delta, t) = \phi(r_i, t) - \frac{\delta}{2 \Delta r} \{ \phi(r_{i+1}, t) - \phi(r_{i-1}, t) \} \\ + \frac{\delta^2}{2 \Delta r^2} \{ \phi(r_{i+1}, t) + \phi(r_{i-1}, t) - 2 \phi(r_i, t) \} \end{aligned}$$

上の2式の和および差より次の関係が得られる。

$$\phi(r_i + \delta, t) + \phi(r_i - \delta, t) - 2 \phi(r_i, t) = \frac{\delta^2}{\Delta r^2} \{ \phi(r_{i+1}, t) + \phi(r_{i-1}, t) - 2 \phi(r_i, t) \} \quad (3-36)$$

$$\phi(r_i + \delta, t) - \phi(r_i - \delta, t) = \frac{\delta}{\Delta r} \{ \phi(r_{i+1}, t) - \phi(r_{i-1}, t) \} \quad (3-37)$$

これらを式 (3-17) に代入して整理すると次の関係に到達する。

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

$$\begin{aligned}
 & + \left\{ \frac{C \Delta t \phi(r_i, t)}{\Delta r^2} \right\} \{ \phi(r_{i+1}, t) + \phi(r_{i-1}, t) - 2\phi(r_i, t) \} \\
 = & \left[1 - \left\{ \frac{2C \Delta t \phi(r_i, t)}{\Delta r^2} \right\} \right] \phi(r_i, t) + \left\{ \frac{C \Delta t \phi(r_i, t)}{\Delta r^2} \right\} \left\{ 1 + \frac{1}{i} \right\} \phi(r_{i+1}, t) \\
 & + \left\{ \frac{C \Delta t \phi(r_i, t)}{\Delta r^2} \right\} \left\{ 1 - \frac{1}{i} \right\} \phi(r_{i-1}, t) \quad (3-38)
 \end{aligned}$$

上式は、基礎式、式(3-13)の階差表現において、式(3-17)以下の取り扱いのように r の増分として δ を介することなく、形式的に増分を Δr とおいて得られる式と同形であることに注目すべきである。

球の中心($i=0$)と表面($i=m$)における計算には、別途、境界条件を用いなければならない。時刻 t における球中心($r=r_0$)とそこから $\pm \Delta r$ の地点($r=r_1$), ($r=r_{-1}$)の ϕ の値、 $\phi(r_0, t)$, $\phi(r_{-1}, t)$, $\phi(r_1, t)$ が既知であり、式(3-8)より $\phi(r_{-1}, t) = \phi(r_1, t)$ であるとする。この区間の r 座標を Z とおくと、この区間の ϕ 分布を次の2次式で表すことができる(前報の式(2-8)の誘導参照)。

$$\phi(Z, t) = \phi(r_0, t) + \frac{1}{\Delta r^2} \{ \phi(r_1, t) - \phi(r_0, t) \} \cdot Z^2 \quad (3-39)$$

ここで、 $Z = \delta$ とおくと $\phi(r_0 + \delta, t)$ が求まり、それを式(3-18)に代入すると次のようになる。

$$\begin{aligned}
 \phi(r_0, t + \Delta t) = & \left[1 - \left\{ \frac{6 \Delta t D(r_0, t)}{\delta^2} \right\} \right] \phi(r_0, t) + \left\{ \frac{6 \Delta t D(r_0, t)}{\delta^2} \right\} \phi(r_0, t) \\
 & + \left\{ \frac{6 \Delta t D(r_0, t)}{\Delta r^2} \right\} \{ \phi(r_1, t) - \phi(r_0, t) \}
 \end{aligned}$$

上式に式(3-23)を適用すれば、球中心での計算式が次のように与えられる。

$$\phi(r_0, t + \Delta t) = \left[1 - \left\{ \frac{6C \Delta t \phi(r_0, t)}{\Delta r^2} \right\} \right] \phi(r_0, t) + \left\{ \frac{6C \Delta t \phi(r_0, t)}{\Delta r^2} \right\} \phi(r_1, t) \quad (3-40)$$

球表面の関係は、この場合も式(3-19)あるいは(3-19')で与えられる。

3.3 考 察

時刻 t における任意地点 r_i および r_i から $\pm \Delta r$ 離れた地点の ϕ の値、すなわち、 $\phi(r_{i-1}, t)$, $\phi(r_i, t)$, $\phi(r_{i+1}, t)$ より、 Δt 後の r_i での ϕ 、すなわち、 $\phi(r_i, t + \Delta t)$ を求めるとき、時刻 t における ϕ 分布を折れ線(1次式)で表す場合とそれを2次曲線で表す場合について検討した。一般に前者よりも後者の方が計算精度は高くなる。検討の結果、前者の計算式は式(3-31)、後者のそれは式(3-38)で与えられることがわかった。両式を比べると式(3-38)の方が簡潔であることは明らかである。すなわち、後者は計算精度が高く計算式が簡潔になるので、本研究では後者の計算法を推奨する。

ここで式(3-38)と(3-40)が、拡散係数一定の場合の前々報³⁾の式(1-26)と(1-28)に類似であることに気づく。従って、確率過程論に矛盾しない制約条件は、前々報の3.3節に示した式(1-29)と類似の次の関係で与えられる。

$$0 \leq \frac{\Delta t D(r_i, t)}{\Delta r^2} \leq \frac{1}{6} \quad (3-41)$$

この場合式(3-21)の制約、すなわち、 $\delta \leq \Delta r$ なる条件を考慮する必要はない。

4. ϕ 分布より含水率 w 分布の計算

以上に述べた数値計算法によって ϕ の分布, $\phi(r_i, t_j)$ が求められれば, 式 (3-4) より, 次式で含水率分布 $w(r_i, t_j)$ を算出することができる。

$$w(r_i, t_j) = \frac{1}{C} \ln \left\{ \frac{C \phi(r_i, t_j)}{D_0} \right\} \quad (3-42)$$

結 言

3報からなる本研究の第1報では, 拡散係数を一定とおける場合の線形拡散方程式を階差表現し, 拡散現象がマルコフ過程で説明されることを示した。空間座標の刻みを Δr (または Δx), 時間の刻みを Δt と表すと, $D\Delta t/\Delta r^2$ が遷移確率に相当し, その値を確率論に矛盾しないように選ぶべきであることを明らかにした。第2報では, 拡散係数が含水率の関数となる場合, 拡散方程式の階差表現において確率論に照らして矛盾を示す恐れがあることを指摘した。

第3報である本報では, 拡散係数 D が含水率 w の関数になる場合に $\phi = \int Ddw$ で定義される関数 ϕ を導入した。基礎拡散方程式を関数 ϕ で表現し, それを階差表現すると, 前報に示した矛盾の恐れなく数値計算を遂行できることがわかった。この ϕ を用いる計算法について, 球の乾燥の場合を詳細に検討し, 時間の増分 Δt と半径座標の増分 Δr , および含水率の関数である拡散係数 $D(w)$ の関係が, $0 \leq \Delta t D(w)/\Delta r^2 \leq 1/6$ となることを確認すれば, 確率論に矛盾なく階差法によって ϕ 分布の変化を求めることができ, ϕ を w に換算すれば含水率分布が得られることを示した。

使用記号

b : 球半径	[m]
C : 式 (3-1) の定数	[$\text{kg}^{-1} \cdot \text{kg-solid}$]
D : 拡散係数	[$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$]
D_0 : 式 (3-1) の定数	[$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$]
k_w : 含水率差基準物質移動係数	[$\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \Delta w^{-1}$]
L : 長さ	[m]
r : 半径座標	[m]
t : 時間	[s]
w : 含水率 (乾量基準)	[$\text{kg} \cdot (\text{kg-solid})^{-1}$]
x : 長さ方向座標	[m]
$\beta \Delta t$: 遷移確率	[-]
$\Delta r, \Delta x$: 長さ座標の刻み	[m]
Δt : 時間の刻み	[s]
δ : 長さ座標の増分 (可変)	[m]
ϕ : 式 (3-3) で定義される関数	[$\text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-1} \cdot (\text{kg-solid})^{-1}$]

参考文献

- 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)
- 3) 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2報）, 富山大学工学部紀要, **47**, 149(1996)

Numerical solution for Moisture Diffusion Equation in Solid during Drying Process (Part 3)

— Introduction of a function $\phi = \int Ddw$ —

Shinkichi YAMAGUCHI and Kaichiro WAKABAYASHI

Summary

We introduced a function of moisture content defined by $\phi = \int Ddw$ and then expressed the diffusion equation by using the function ϕ instead of moisture content w . It was found that the finite difference method of the diffusion equation used ϕ did not have any contradicting content as mentioned previous paper. The calculation method of the function ϕ was described in detail for radial diffusion in a sphere during drying. It was also shown that the dimensionless term $\Delta t D(W)/\Delta r^2$ which corresponded to a transition probability had to be in the range of $0 \sim 1/6$.

[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3報）

—関数 $\phi = \int Ddw$ の導入—

山口 信吉, 若林嘉一郎

$\phi = \int Ddw$ で定義される関数 ϕ を導入し、含水率 w の代わりにその関数 ϕ を用いて拡散方程式を表現した。この関数 ϕ を用いた拡散方程式の階差法には、前報で述べたような矛盾はないことがわかった。乾燥過程における球内半径方向拡散の場合の ϕ の計算法が詳細に述べられた。また、遷移確率に相当する無次元項 $\Delta t D(W)/\Delta r^2$ は、 $0 \sim 1/6$ の範囲にあるべであることが示された。