移動論第三 2012 伊東

■10/4 第 1 回 拡散方程式 定常拡散
10/11 第 2 回 静止媒体中の非定常拡散
10/18 第 3 回 対流物質移動 1次元
11/25 第 4 回 対流物質移動 2 次元
11/1 第 5 回 反応を伴う拡散
11/8 第 6 回 物質移動係数と境界層理論
11/15 第 7 回 アナロジーと各種形状物質移動
11/22 第 8 回 分離プロセスの基礎 乾燥と湿球温度
11/29 第 9 回 吸着・クロマト
12/6 第 10 回 微分接触プロセス
(下山担当分)
12/13 第 11 回 蒸気圧
12/20 第 12 回 相平衡と溶解度(1)
1/10 第 13 回 相平衡と溶解度(2)
1/24 第 14 回 輸送物性(1)
1/31 第 15 回 輸送物性(2)
2/7 期末試験(S421 講義室)

担当教官:(前半)伊東 章 S1 421
(後半)下山裕介 S1 411

木曜 3,4 限(10:45-12:15) S421 講義室
実習は情報ネットワーク演習室第 1(D)(S4 3F)

伊東回は毎回演習レポート(手書きおよびプリントアウト)を課します。講義時間内に提出のこと。
(講義時間内に提出できなかった場合の〆切は当日 17:00, 提出は南 1 421 伊東居室前の Box へ。)

演習・実習用の Excel シートテンプレートファイルは以下にあります。当日のフォルダ"tp3_*"をデスクトップにコピーして使ってください。
1. [エクスプローラ]
2. "¥¥nest2.g.gsic.titech.ac.jp¥home0"を入力
3. "usr2/ito-a-ac/"に入る

2.1 拡散の基礎式

物質拡散を支配する基礎式すなわち拡散方程式は微小領域における成分収支とフィックの拡散法則から導かれる[1, p. 117]。3 つの座標系について 2 次元での拡散方程式を表 2.1 に示す。

各基礎式の左辺第 1 項は時間変化項(非定常項, 蓄積項), 第 2 項が対流項, 右辺第 1 項が拡散項, 第 2 項が生成・消失項である。対流項には拡散媒体(流体)の速度(u, v など)が入っている。そのため拡散方程式を解くためには, 媒体の速度(分布)が運動方程式(ナビエ-ストークスの式)によりあらかじめ解かれていなければならない。つまり対流項のある拡散方程式の解(成分 c_A の濃度分布)は, 流れの場に従属している。

物質移動解析の理想は, 適用する場と境界条件で表 2.1 の基礎式をそのまま解くことである。現在は計算機による差分解法(CFD, Computed Fluid Dynamics)により, ナビエ-ストークスの式を含むこれら基礎式をその形式のままで数値解を求めることも可能である。しかし物質移動の原理を理解し, 基礎式を現実の現象のモデルとして応用するためには, 基礎式中の各項の意味・働きの理解が必要である。このため物質移動解析は, 拡散項のみの単純な式から出発し, 順次蓄積項, 対流項を加えた基礎式について順を追って解析法を示す構成となっている。表 2.2 は本章で述べる物質移動解析モデル式を一覧にしたものである。

表 2.1 物質移動の基礎式(拡散方程式)

	(蓄積項)+(対流項)	=	(拡散項)	+(消失項)	
直交座標系(x, y2 次元)	$\frac{\partial c_A}{\partial t} + u\frac{\partial c_A}{\partial x} + v\frac{\partial c_A}{\partial y}$	=	$D_{AB}\left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2}\right)$	$+ r_A$	(2.1)
円筒座標系(r, z 二次元)	$\frac{\partial c_A}{\partial t} + v_r\frac{\partial c_A}{\partial r} + v_z\frac{\partial c_A}{\partial z}$	=	$D_{AB}\left\{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c_A}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2}\right\}$	$+ r_A$	(2.2)
球座標系(r 一次元)	$\frac{\partial c_A}{\partial t} + v_r\frac{\partial c_A}{\partial r}$	=	$D_{AB}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial c_A}{\partial r}\right)\right\}$	$+ r_A$	(2.3)

表 2.2 物質移動解析モデル一覧

		(蓄積項)＋(対流項)=(拡散項)+(消失項)		関連用語・モデル
定常	1 次元	$0=\frac{d}{dy}\left(D_{\mathrm{AB}}\frac{dc_{\mathrm{A}}}{dy}\right)$	(2.4)	
	球座標	$0=\frac{d}{dr}\left(r^2D_{\mathrm{AB}}\frac{dc_{\mathrm{A}}}{dr}\right)$	(2.8)	球外側への拡散 : $Sh=2$
	2 次元直交座標	$0=\frac{\partial^2 c_{\mathrm{A}}}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c_{\mathrm{A}}}{\partial y^2}$	(2.12)	
	2 次元円筒座標	$0=\frac{\partial^2 c_A}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial c_A}{\partial r}+\frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2}$	(2.15)	
非定常	1 次元	$\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial t}=D_{\mathrm{AB}}\frac{\partial^2 c_{\mathrm{A}}}{\partial y^2}$	(2.25)	擬定常状態モデル, 浸透説
	円筒座標 1 次元	$\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial t}=\frac{D_{\mathrm{AB}}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial r}\right)$	(2.37)	
	球座標 1 次元	$\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial t}=\frac{D_{AB}}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial r}\right)$	(2.40)	LDF モデル(4 章)
対流物質移動	1 次元	$v\frac{dc_{\mathrm{A}}}{dy}=D_{\mathrm{AB}}\frac{d^2c_{\mathrm{A}}}{dy^2}$	(2.50)	一方拡散
	非定常 1 次元	$\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial t}+v\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial y}=D_y\frac{\partial^2 c_{\mathrm{A}}}{\partial y^2}$	(2.64)	移流拡散, 混合拡散モデル, 槽列モデル,ステップ・インパルス応答
	直交流れへの拡散	$u\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial x}=D_{\mathrm{AB}}\frac{\partial^2 c_{\mathrm{A}}}{\partial y^2}$	(2.73)	流下液膜への吸収, 浸透説
	直交流れへの拡散(円筒)	$u\frac{\partial c_A}{\partial z}=\frac{D_{AB}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c_A}{\partial r}\right)$	(2.84)	円管内物質移動:Sh=3.66, 点源からの拡散
反応を伴う物質移動	1次元0次反応	$0=D_{\mathrm{AB}}\frac{d^2c_{\mathrm{A}}}{dy^2}-k_0$	(2.98)	
	1 次元 1 次反応	$0=D_{\mathrm{AB}}\frac{d^2c_{\mathrm{A}}}{dy^2}-k_1c_{\mathrm{A}}$	(2.101)	反応係数(境膜説)
	非定常 1 次元 1 次反応	$\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial t}=D_{\mathrm{AB}}\frac{\partial^2 c_{\mathrm{A}}}{\partial y^2}-k_1c_{\mathrm{A}}$	(2.106)	反応係数(浸透説)
	定常移流拡散	$v\frac{dc_{\mathrm{A}}}{dy}=D_y\frac{d^2c_{\mathrm{A}}}{dy^2}-k_1c_{\mathrm{A}}$	(2.108)	管型反応器モデル
	定常球座標 0次反応	$0=\frac{D_{\mathrm{AB}}}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dc_{\mathrm{A}}}{dr})-k_0$	(2.114)	細胞の大きさ
	定常球座標 1次反応	$0=\frac{D_{\mathrm{AB}}}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dc_{\mathrm{A}}}{dr})-k_1c_{\mathrm{A}}$	(2.115)	触媒有効係数
境界層方程式(3 章)		$u\frac{\partial c_A}{\partial x}+v\frac{\partial c_A}{\partial y}=D_{AB}\frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2}$	(3.19)	層流物質移動: $\mathrm{Sh}=0.664\mathrm{Re}^{1/2}Sc^{1/3}$
吸着を伴う非定常 1 次元移流拡散(4 章)		$\frac{\partial c_A}{\partial t}+u\frac{\partial c_A}{\partial z}=D_z\frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2}-\frac{1-\varepsilon_b}{\varepsilon_b}\frac{\partial \bar{q}}{\partial z}$	(4.38)	固定層吸着, クロマト

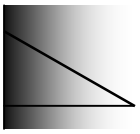
2.2 定常拡散(定常濃度分布)

2.2.1 静止媒体中の定常拡散(1次元)－拡散係数が変化する場合－

静止媒体中の 1 次元拡散では基礎式中の左辺の項は省略され，基礎式は拡散項のみとなる。

1 次元拡散:

$$0 = \frac{d}{dy}\left(D_{AB} \frac{dc_A}{dy} \right) \quad (2.4)$$



これを積分すると，物質の流束(拡散流束)JA が拡散係数と濃度勾配の積で表せるという Fick の拡散法則:

$$J_A = -D_{AB} \frac{dc_A}{dy} \quad (2.5)$$

となる。これらの式は，拡散係数が一定の場合には直線濃度勾配を表すが，拡散係数が位置 y(例題1)や濃度 cA(例題2)で変化する場合は以下のように常微分方程式解法の問題となる。

【例題 1】2 層膜を通しての拡散<diff17.xls>(<_temp.xls>で実習)

非対称多孔質膜の成分透過では，膜表面は緻密で拡散係数が小さく，膜本体は多孔質のため拡散係数が大きい。厚さ δ = 1 mm のゼオライト多孔質ガス分離膜で， 0.1 mm の表面層の拡散係数が 1.2×10^{-8} m^2/s，支持層の拡散係数が 3×10^{-7} m^2/s で，膜の供給側濃度が c_A= 50 mol/m^3 の，透過側濃度が c_A= 0 としての透過流束と膜内濃度分布を求めよ。

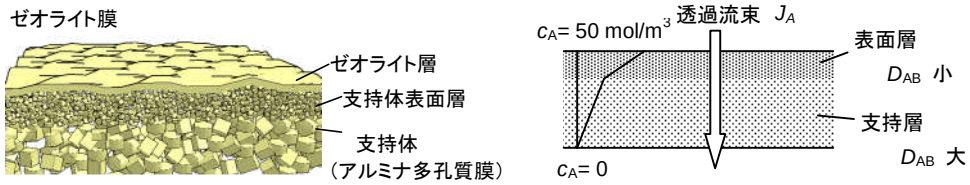


図 1 ゼオライト膜の構造と2層膜を通した拡散

(解)拡散係数 D_{AB} が位置 y で変化するものとして，常微分方程式:

$$\frac{dc_A}{dy} = -\frac{J_A}{D_{AB}(y)} \quad (2.6)$$

境界条件:y=0: c_A =50, y= δ : $_{cA}$=0

を解く，境界条件を満足する透過流束 J_A を試行する問題となる。

図 2 の「微分方程式解法シート」で定数をセル G2:G3 に書く。ここで流束 J_A は仮の値とする。また，G3 の D_{AB} は位置 y (A3)で値が異なるものとする。微分方程式を B5 に記述し，c_A の初期値(50 mol/m^3)を入れて，積分する。積分の結果 y= δ での c_A が問題の条件，c_A= 0，となるよう J_A の値を試行する。計算結果を図 2 に，膜中の濃度分布を図 3 に示す。J_A=0.0044 $mol/(m^2\cdot s)$となる。

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	微分方程式数	1				定数		
2	y=	cA=				JA=	0.00444	mol/m
3	0.0010	-0.024	=-G2/G3			DAB=	0.0000003	
4		T'=						
5	微分方程式→	-1.48E+04	=IF(A3<0.0001,1.2e-8,3e-7)					
6								
7	積分区間y=[a,	0						
8	b]	0.001	Runge-Kutta					
9	積分刻み幅Δ	0.00005						
10	計算結果							
11	y[m]	cA[mol/m3]						
12	0.00000	50.00				←初期値		
13	0.00005	31.50						
14	0.00010	13.30						
15	0.00015	12.56						

図 2.2 2 層膜を通した拡散計算シート

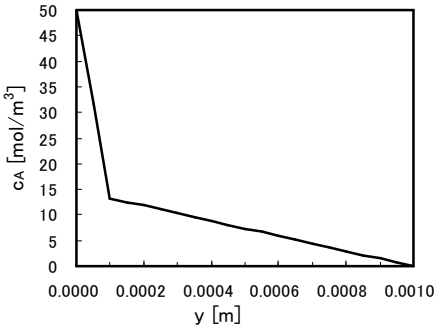


図 2.3 2層膜を通した拡散(濃度分布)

【例題 2.2】拡散係数に濃度依存性がある場合<diff16.xls>(<_temp.xls>で実習)

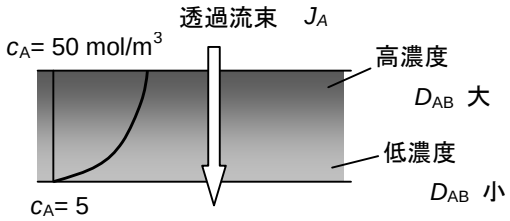


図 4 拡散係数に濃度依存性がある場合の膜内濃度分布

たとえば膨潤性の高分子膜では膜内の透過成分の濃度で拡散係数が変化する。拡散係数が $D_{AB} = 1\times10^{-11}\{1+\exp(3c_A)\}$ の濃度依存性[2, p. 162]があるとき, 厚さ 100 □m(δ = 0.0001 m)の高分子膜で膜面の供給側濃度 c_{A1}=1.0, 透過側 c_{A2}=0 の条件における膜内濃度分布と透過流束を求めよ。

(解)常微分方程式:

$$\frac{dc_A}{dy} = -\frac{J_A}{D_{AB}(c_A)} \quad (2.7)$$

境界条件:y=0: c_A =1, y= δ : c_A=0

を解く問題である。境界条件を満足する定数 J_A を試行する問題となる。

図 2.5 の「微分方程式解法シート」でセル G2 に流束 J_A の仮の値を書く。拡散係数の濃度依存性を含めた微分方程式を B5 に記述し, c_A の初期値を入れて積分する。積分の結果 y= δ での c_A が問題の条件, c_A= 0, となるよう J_A の値を試行する。計算結果を図 2.5 に, 膜中の濃度分布を図 2.6 に示す。解は J_A =7.36×10^{-7} である。

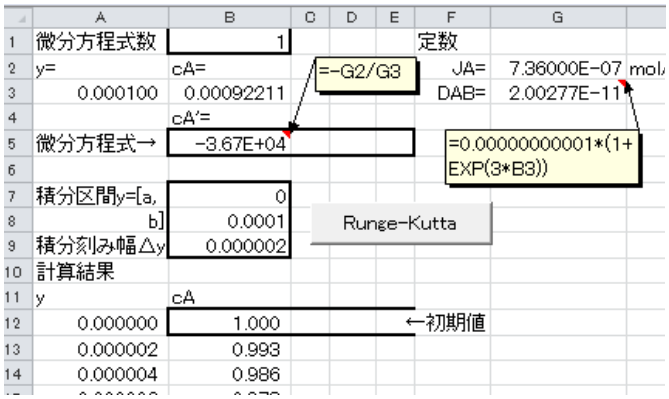


図 2.5 濃度依存性拡散計算シート

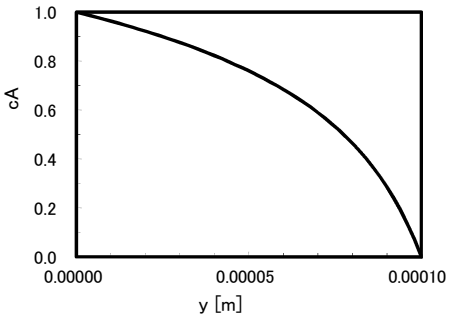


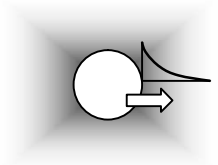
図 2.6 濃度依存性拡散係数(濃度分布)

2.2 静止媒体中の定常拡散(球座標)

球座標の拡散方程式において, 半径 r 方向のみの拡散では次式のように 1 項だけの常微分方程式となる。

1次元拡散(球座標):

$$0 = \frac{d}{dr}\left(r^2 D_{AB}\frac{dc_A}{dr}\right) \quad (2.8)$$



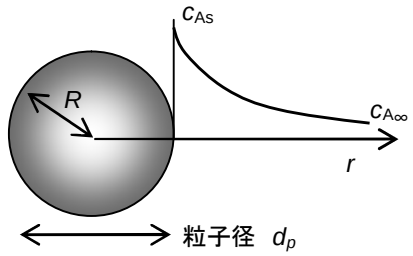


図 2.7 球表面から外側への定常拡散

球表面から外側媒体中への拡散を考える。(図 2.7)境界条件は $r = R : c_A = c_{As}, r = \infty : c_A = c_{A\infty}$ である。基礎式を積分して,

$$r^2 D_{AB}(dc_A / dr) = C_1 \quad (2.9)$$

であり,(C_1 は定数)これを両境界条件間で積分して,

$$C_1 = RD_{AB}(c_{A\infty} - c_{As}) \quad (2.10)$$

となる。よって球外側の濃度分布が次式となる。

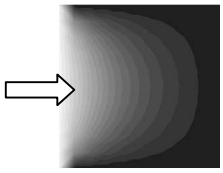
$$\frac{R}{r} = \frac{(c_A - c_{A\infty})}{(c_{As} - c_{A\infty})} \quad (2.11)$$

2.2.3 静止媒体中の定常 2 次元拡散(x-y 座標, 円筒座標)

拡散係数 D_{AB} が媒体内で一定として, 静止媒体中での直交座標 2 次元拡散の基礎式は次式となる。

2 次元定常拡散(直交座標)

$$0 = \frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} \quad (2.12)$$



この式は Laplace の式と呼ばれ, 伝熱, 電界など多くの物理現象の基礎式である。

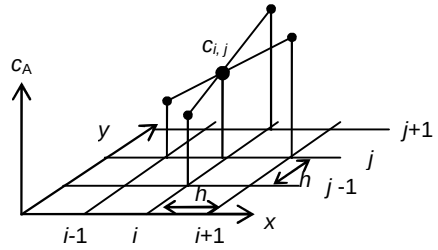


図 2.8 差分解法における節点

Laplace 式を差分法で解く。差分法(finite difference method, FDM)は解析領域を等間隔メッシュに分割し, 基礎式を差分方程式に変換して解く方法である。領域を区間巾 h で格子状に区切り(図 2.8), 各格子点での濃度 $c_A(x,y)$ の値を $c_{i,j}$ であらわすと, x および y 各方向の二次微分は,

$$\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right)_{i,j} = \frac{1}{h}\left(\frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h} - \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h}\right) = \frac{c_{i+1,j} + c_{i-1,j} - 2c_{i,j}}{h^2} \quad (2.13)$$

$$\left(\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right)_{i,j} = \frac{c_{i,j+1} + c_{i,j-1} - 2c_{i,j}}{h^2}$$

のように差分化される。これを式(12)に代入して,

$$c_{i,j} = \frac{1}{4}(c_{i+1,j} + c_{i-1,j} + c_{i,j+1} + c_{i,j-1}) \quad (2.14)$$

が得られる。すなわち差分方程式で書くと「ある点の濃度はその周囲の4点の濃度の平均値」という簡単な関係となる。この関係を全格子点について解く。すなわち基本的には各格子点での c 値に関する連立方程式となる。計算上はこのような大規模な連立方程式を直接・同時に解くことは困難なので、仮の初期値から出発して近似計算をおこない、収束した値を解とする。

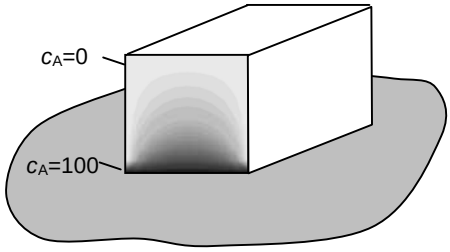


図 2.9　片面水に接した木材中の水分濃度分布

【例題 2.3】2次元定常拡散<diff18.xls>(<_temp.xls>で実習)

10 cm 角の木材が水の上に置かれ，底面の水分の濃度が c_A=100，空気に接した他の面は c_A=0 における木材内部の水分濃度分布を求めよ。

(解)材料断面を x-y 方向 10 分割し，11×11 の節点を作り，これらを表のセルとする。周辺のセルに境界の値を入れる。セル　B2　に式(2.14)を書き，これを領域内全てのセルにコピーする。この際「循環参照」の警告がでるがキャンセルする。ツールーオプションー計算方法で反復計算にチェックを入れて再計算実行をおこなう。(Excel 2010 ではファイルーオプションー数式ー■反復計算) 自動的に収束解が得られる。得られた濃度分布を図 2.11 に示す。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
2	0	49	67	75	79	80	79	75	67	49	0
3	0	28	=(A2+B1+C2+B3)/4			62	60	55	46	28	0
4	0	18	31	40	45	47	45	40	31	18	0
5	0	12	22	29	33	34	33	29	22	12	0
6	0	8	15	21	24	25	24	21	15	8	0
7	0	6				17	15	11	6	0	
8	0	4				11	10	7	4	0	
9	0	2	4	6	7	7	7	6	4	2	0
10	0	1	2	3	3	4	3	3	2	1	0
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

B2を領域内全セルにコピー

図 2.10　直交座標での差分解法

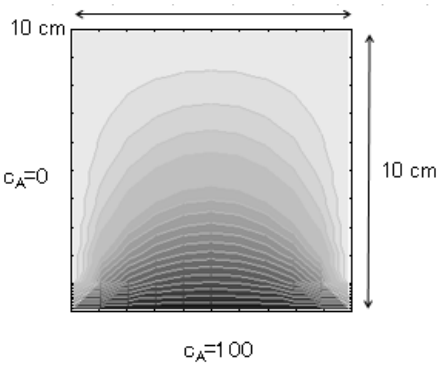
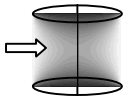


図 2.11　木材中の水分濃度分布

次に円筒座標系での拡散を考える。拡散係数 D_{AB} 一定での円筒座標 2 次元拡散の基礎式は次式である。

2次元拡散ー円筒座標ー:

$$0=\frac{\partial^2 c_A}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial c_A}{\partial r}+\frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \quad (2.15)$$



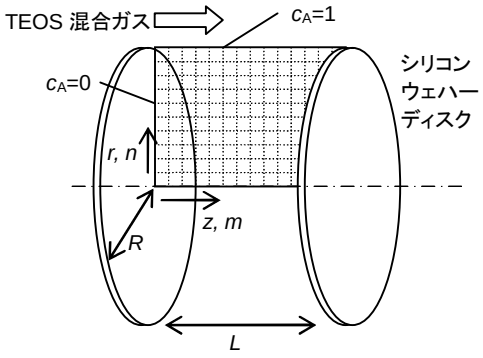


図 2.12 シリコンウェハーの表面処理:円柱座標による問題設定と差分格子

この基礎式を r 方向を $r=(n\Delta r)$, z 方向を $z=(m\Delta z)$ で等分割し, 濃度を $c_A(r,z)=c_{n,m}$ の節点値で差分化する。左辺 1,2 項は,

$$\frac{1}{(\Delta r)^2}\left[(1+\frac{1}{2n})c_{n+1,m}+(1-\frac{1}{2n})c_{n-1,m}-2c_{n,m}\right] \quad (2.16)$$

第 3 項は,

$$(1/(\Delta z)^2)(c_{n,m+1}+c_{n,m-1}-2c_{n,m}) \quad (2.17)$$

なので, $\Delta z=\Delta r$ として各節点の値は次式の差分式となる

$$c_{n,m}=\frac{1}{4}\left[(1+\frac{1}{2n})c_{n+1,m}+(1-\frac{1}{2n})c_{n-1,m}+c_{n,m+1}+c_{n,m-1}\right] \quad (2.18)$$

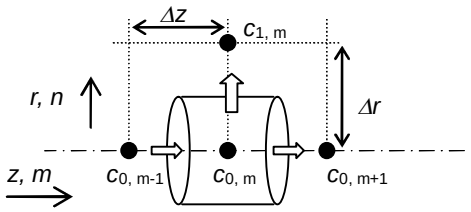


図 2.13 中心軸上の節点

また, 中心 ($r=0$) の節点値は次式である。

$$c_{0,m}=\frac{2}{3}\left[\frac{1}{4}(c_{0,m+1}+c_{0,m-1})+c_{1,m}\right] \quad (2.19)$$

これは中心節点の円柱において,

(*z* 方向からの流入)=(*z* 方向への流出)+(*r* 方向への流出)の関係から,

$$\frac{\pi(\Delta r)^2}{4}\frac{(c_{0,m}-c_{0,m-1})}{\Delta z}$$

$$=\frac{\pi(\Delta r)^2}{4}\frac{(c_{0,m+1}-c_{0,m})}{\Delta z}+\pi\Delta r\Delta z\frac{(c_{1,m1}-c_{0,m})}{\Delta r} \quad (2.20)$$

より導かれる。(図 2.13)

【例題 2.4】シリコンウェハーの表面処理 [3, p.477] <diff19.xls>(<_temp.xls>で実習)

シリコンウェハーは高温下で SiO_2 の堆積による表面処理がなされる。SiO_2 の原料は TEOS($Si(OC_2H_5)_4$)であり, これが不活ガス中を拡散係数 D_{AB} で拡散し, ウェハー表面で

$Si(OC_2H_5)_4(g)\rightarrow 4C_2H_4(g)+2H_2O(g)+SiO_2(s)$

の反応により SiO_2 となり, 消失する。2 枚のウェハー内の拡散場は円柱座標の軸対象であり, 半径 R = 60 mm, 軸方向に L = 105 mm とする。TEOS 濃度の条件はウェハー周辺が c_A=1, ウェハー面で c_A =0 である。

(解)図 2.12 のように領域を r 方向 12 分割, z 方向 21 分割し, 図 2.14 のシートで行方向を r 座標, 列方向をz 座標として, 各セルが対応する濃度の節点値とする。周辺に濃度条件を設定し, 領域内のセルは式(2.18)を, 中心軸上のセルは式(2.19)を書く。Excel のツールーオプションー反復計算を on にしておくことで, 収束計算がなされる。図 2.15 に得られた領域内の濃度分布を示す。なお, ウェハー表面での SiO_2 堆積速度は界面の濃度勾配から得られる。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1	m=	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
2	n=													
3	12	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
4	11	0.00	0.52	0.73	0.82	0.87	0.90	0.92	0.94	0.95	0.95	0.95	0.95	0.95
5	10	0.00	0.33	0.54	0.68	0.76	0.81	0.85	0.87	0.89	0.90	0.90	0.90	0.90
6	9	0.00	0.24								0.85	0.85	0.85	0.85
7	8	0.00	0.19	0.35	0.48	0.58	0.66	0.71	0.75	0.78	0.80	0.81	0.81	0.80
8	7	0.00	0.16	0.30	0.42	0.52	0.60	0.66	0.70	0.73	0.75	0.76	0.76	0.75
9	6	0.00	0.14	0.26	0.38	0.47	0.55	0.61	0.66	0.69	0.71	0.72	0.72	0.71
10	5	0.00	0.12	0.24	0.34	0.44	0.51	0.57	0.62	0.65	0.68	0.69	0.69	0.68
11	4	0.00	0.11	0.22	0.32	0.41	0.48	0.54	0.59	0.62	0.65	0.66	0.66	0.65
12	3	0.00	0.11	0.21	0.30	0.39	0.46	0.52	0.57	0.60	0.63	0.64	0.64	0.62
13	2	0.00	0.10	0.1					0.55	0.59	0.61	0.62	0.62	0.61
14	1	0.00	0.10	0.19	0.28	0.36	0.43	0.49	0.54	0.58	0.60	0.61	0.61	0.60
15	0	0.00	0.10	0.19	0.28	0.36	0.43	0.49	0.54	0.57	0.60	0.61	0.61	0.60

=(1/4)*((1+1/(2*$A4))*C3+(1-1/(2*$A4))*C5+B4+D4)

=(2/3)*((1/4)*(D15+B15)+C14)

図 2.14　円柱座標での差分解法シート

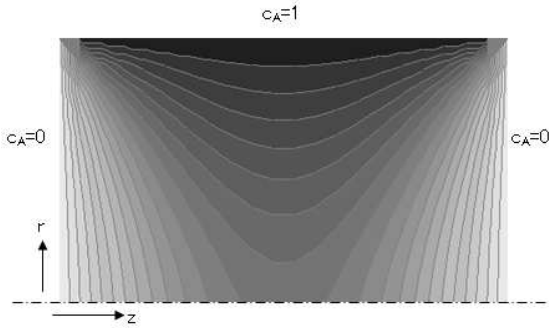


図 2.15　円柱座標領域内の拡散成分濃度分布

【Excel 演習レポート 1】<diff19.xls>シートを作成して, そのシートの 1 ページ目のみプリントして提出。

【筆記演習レポート 1】

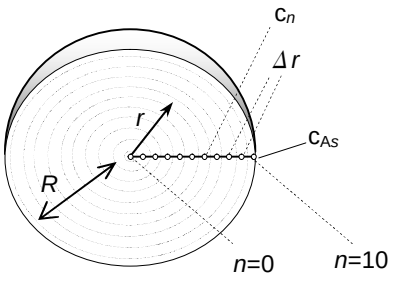


図 球の差分化

1 次元定常拡散（球座標）の基礎式は

$$0 = \frac{D_{AB}}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial c_A}{\partial r}\right)$$ すなわち

$$0 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial c_A}{\partial r}\right) \quad (2.21)$$

である。r 座標を区間幅 Δr で等分割して,

c_n を数値解における濃度（節点値）とする。先ず（微分を実施して）左辺を 2 項に分ける。その式を一階微分項は c_{n+1}, c_{n-1} で差分化し, 2 階微分項は c_{n+1}, c_n, c_{n-1} で差分化する。（$r = n(\Delta r)$）得られた差分式を $c_n = f(c_{n+1}, c_{n-1}, n)$ の形で示せ。