
* 「1次元拡散解析K」の紹介 * [著者] 算生会 黒田英夫

<プログラム開発環境>

OS : Windows 11NET Framework 4.8が必要

言語 : Visual Basic 2022 (Visual Studio 2022 Community)

<プログラムと本書の著作権>

フリーソフトで、著作権を開放します

汎用的な1次元拡散解析ソフトを提供します。本ソフトは、差分法により、1次元の拡散問題を解くものです。1次元拡散解析は、1方向のみの拡散を取り扱うため、基礎的な拡散問題の検討に適しており、入力データ作成の手間や計算時間も少なくて済みます。また、非定常解析の初期濃度データとして、実施済みの結果データファイルを利用することができます。

[備考]本書の解析事例の計算時間は、下記仕様のパソコンによります。

CPU : 3GHz (64bit、4コア) RAM : 16GB

<目次>

	ページ
第1章 差分法 -----	2
第2章 プログラムの機能・構成 -----	13
第3章 構造データの作り方 -----	16
第4章 「データ」処理プログラム -----	19
第5章 「計算」プログラム -----	32
第6章 「後処理」プログラム -----	39
第7章 多層拡散の計算例 -----	49
[参考文献] -----	58

第1章 差分法

差分法は、対象を平行なメッシュで有限個の差分要素に分割し、要素毎にその要素変数に関する差分方程式を作成し、それを合わせて全体の方程式として解く解析方法です。以下では、1次元の拡散に限定して説明します。

1.1 1次元拡散モデル

本ソフトで取り扱うモデルを図1-1に示します。同図において、境界1と境界2の間に1次元に拡散する複数の層があります。そして、その複数の各層はそれぞれ均等分割して差分方程式を組み立てます。もちろん、複数層でなく単一層であっても構いません。また、同図に示すように、層を構成する材料の物性は拡散係数のみで、拡散係数は濃度依存で与えることができます。さらに、境界条件は、不透過、濃度固定、濃度伝達、濃度流束の4種類があります。

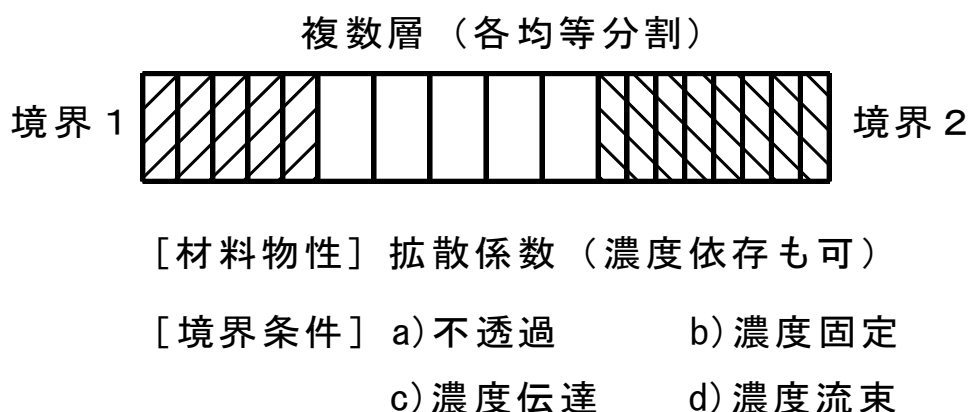


図1-1 1次元拡散のモデル

1.2 差分法の基本計算式

上述のように、本ソフトでは複数層の計算が可能です。差分法の基本計算式は複数層でも単一層でも同様なので、図1-2の単一層のモデルで説明します。同図において、境界1と境界2の間に1次元に拡散する単一層があり、同層は n 等分されています。また、同図と重複しますが、次のように記号を定めます。

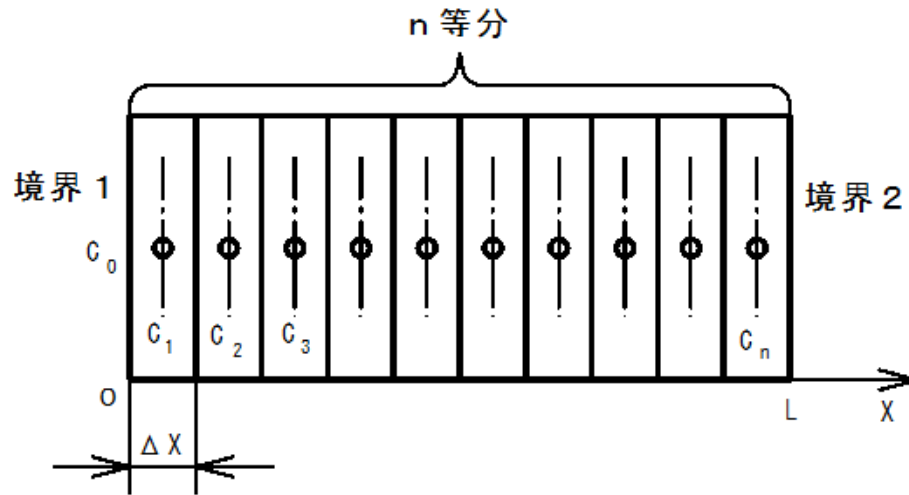
X : X 座標（拡散方向）

ΔX : メッシュ幅

T_i : 各メッシュの中心濃度 ($i=1, 2, \dots, n$)

T_0 : 境界の表面濃度

D : 拡散係数



[記号] C: 濃度

[材料物性] D: 拡散係数

図1-2 差分法の単一層モデル

さて、1次元の非定常拡散問題の支配方程式は、次式で表わされます。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} \quad (1-1)$$

そして、(1-1)式を差分法の式に変形するにあたり、時刻 t の濃度が既知で、 Δt 後の各部濃度を計算することとします。なお、以下の式で添え字を次のように規定します。

[添え字規定]

t の時点の変数は b を添え、 $t + \Delta t$ の時点の変数には何も付けない。

また、定常問題では(1-1)式は次のようになります。

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} = 0 \quad (1-1S)$$

(1-1)の支配方程式をクランク・ニコルソン法の差分方程式で表わすと下記のようになります。

注) クランク・ニコルソン法は、(1-1)式の右辺について、時刻 t と $t + \Delta t$ との平均を取る方法です。他に、時刻 t を採用する前進差分法、時刻 $t + \Delta t$ を採用する後退差分法があります。

<通常メッシュ>

メッシュ i における差分方程式を示します。

$$\frac{C_i - C_{ib}}{\Delta t} = D \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{i+1,b} - 2C_{ib} + C_{i-1,b}}{2(\Delta X)^2} \quad (1-2)$$

$$\therefore \frac{D}{2(\Delta X)^2} C_{i+1} - \left\{ \frac{D}{(\Delta X)^2} + \frac{1}{\Delta t} \right\} C_i + \frac{D}{2(\Delta X)^2} C_{i-1} = -\frac{C_{ib}}{\Delta t} + B_b \quad (1-3)$$

$$\text{ただし、} B_b = D_b \frac{C_{i+1,b} - 2C_{ib} + C_{i-1,b}}{2(\Delta X)^2} \quad (1-4)$$

また、定常問題では(1-2)式は次のようになります。

$$\frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{(\Delta X)^2} = 0 \quad (1-2S)$$

<端メッシュ>

左端境界メッシュ1における差分方程式を導出します。なお、右端メッシュnにおける差分方程式は、 T_1 、 T_2 のかわりに T_n 、 T_{n-1} を入れます。

まず、ある時刻において、左端境界メッシュでは次式が成立します。

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} = D \frac{\frac{C_2 - C_1}{\Delta X} - \frac{C_1 - C_0}{\Delta X/2}}{\Delta X} = D \frac{C_2 - 3C_1 + 2C_0}{(\Delta X)^2} \quad (1-5)$$

クランク・ニコルソン法では、(1-5)式の右辺は、時刻tと時刻t+ Δt との平均を取ります。従って、(1-1)式は次の差分方程式となります。

$$\frac{C_1 - C_{1b}}{\Delta t} = D \frac{C_2 - 3C_1 + 2C_0}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{2b} - 3C_{1b} + 2C_{0b}}{2(\Delta X)^2} \quad (1-6)$$

ただし、境界表面濃度 C_0 は境界条件により異なり、 C_1 の関数になることもあります。それ故、(1-6)式は境界条件により、個別に整理し直します（後述）。

また、定常問題では(1-5)式は次のようになります。ただし、Dは境界条件に合わせるために付けておきます。

$$D \frac{C_2 - 3C_1 + 2C_0}{(\Delta X)^2} = 0 \quad (1-5S)$$

1.3 境界表面濃度

左端の境界1について、各境界種類毎に表面濃度の式を示します。

<不透過境界>

不透過境界では、境界側は何も考慮しなくてよく、表面濃度は端メッシュ中心濃度と同じになります。

$$C_0 = C_1 \quad (1-7)$$

<濃度固定境界>

濃度固定境界では、まさに表面濃度が固定値として与えられます。固定濃度を C_s とすると、

$$C_0 = C_s$$

(1-8)

<濃度伝達境界>

図1-3に濃度伝達境界の説明図を示します。
同図において、 C_1 から C_0 への濃度移動量と
 C_0 から外部へ流出する濃度移動量が等しいと
置くことにより、次式が得られます。

$$D \frac{C_1 - C_0}{\Delta X / 2} = \alpha (C_0 - C_E) \quad (1-9)$$

ただし、 α : 濃度伝達係数

C_E : 外部濃度

$$\therefore C_0 = \frac{\alpha C_E + (2D / \Delta X) C_1}{\alpha + 2D / \Delta X} \quad (1-10)$$

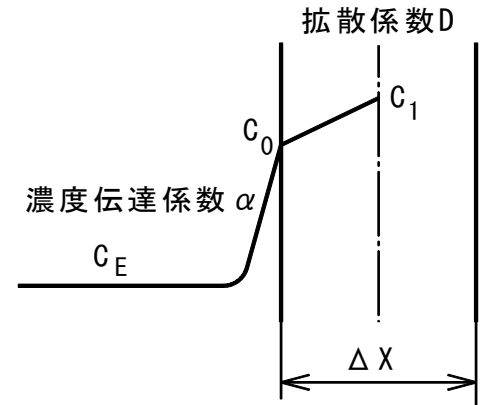


図1-3 濃度伝達境界の説明図

<濃度流束境界>

図1-4に濃度流束境界の説明図を示しま
す。同図において、 C_1 から C_0 への濃度
移動量と C_0 から外部へ流出する濃度移動
量が等しいと置くことにより、次式が得
られます。

$$D \frac{C_1 - C_0}{\Delta X / 2} = Q \quad (1-11)$$

ただし、 Q : 濃度流出量

$$\therefore C_0 = C_1 - Q \cdot \Delta X / (2D) \quad (1-12)$$

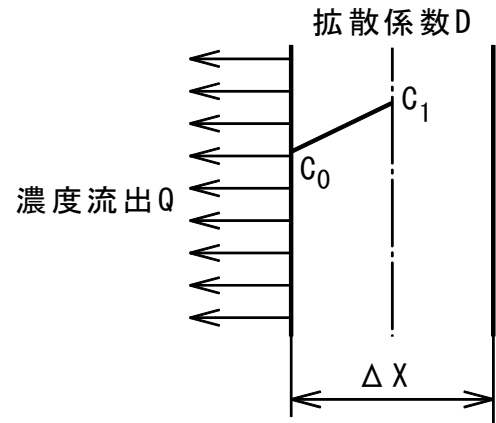


図1-4 濃度流束境界の説明図

1.4 左端境界

図1-2のメッシュ1（中心濃度 C_1 ）において、境界1の各境界種類に関する差分方程式を
示します。

<不透過境界>

(1-6)式に(1-7)式（ C_{0b} も同じ）を代入すると、

$$\frac{C_1 - C_{1b}}{\Delta t} = D \frac{C_2 - C_1}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{2b} - C_{1b}}{2(\Delta X)^2} \quad (1-13)$$

$$\therefore -\left\{ \frac{D}{2(\Delta X)^2} + \frac{1}{\Delta t} \right\} C_1 + \frac{D}{2(\Delta X)^2} C_2 = -\frac{C_{1b}}{\Delta t} - B_b \quad (1-14)$$

$$\text{ただし、} B_b = D_b \frac{C_{2b} - 2C_{1b}}{2(\Delta X)^2} \quad (1-15)$$

また、定常問題では(1-13)式は次のようになります。ただし、Dは境界条件に合わせるために付けておきます。

$$D \frac{C_2 - C_1}{(\Delta X)^2} = 0 \quad (1-13S)$$

<濃度固定境界> (C_s : 固定濃度)

(1-6)式に(1-8)式 (C_{0b} も同じ) を代入すると、

$$\frac{C_1 - C_{1b}}{\Delta t} = D \frac{C_2 - 3C_1 + 2C_s}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{2b} - 3C_{1b} + 2C_s}{2(\Delta X)^2} \quad (1-16)$$

$$\therefore -\left\{ \frac{3D}{2(\Delta X)^2} + \frac{1}{\Delta t} \right\} C_1 + \frac{D}{2(\Delta X)^2} C_2 = -\frac{C_{1b}}{\Delta t} - B_b \quad (1-17)$$

$$\text{ただし、 } B_b = \frac{2D \cdot C_s + D_b (C_{2b} - 3C_{1b} + 2C_s)}{2(\Delta X)^2} \quad (1-18)$$

また、定常問題では(1-16)式は次のようになります。ただし、Dは境界条件に合わせるために付けておきます。

$$D \frac{C_2 - 3C_1}{(\Delta X)^2} = -D \frac{2C_s}{(\Delta X)^2} \quad (1-16S)$$

<濃度伝達境界> (C_E : 外部濃度、 α : 濃度伝達係数)

時刻 $t + \Delta t$ における境界表面濃度 C_{0b} は(1-10)式で得られます。同様に、時刻 t における境界表面度 C_{0b} は次式で表わされます。

$$C_{0b} = \frac{\alpha C_E + (2D_b / \Delta X) C_{1b}}{\alpha + 2D_b / \Delta X} \quad (1-19)$$

(1-6)式に(1-10)式を代入すると、

$$\frac{C_1 - C_{1b}}{\Delta t} = D \frac{C_2 - 3C_1 + 2 \frac{\alpha C_E + (2D_b / \Delta X) C_{1b}}{\alpha + 2D_b / \Delta X}}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{2b} - 3C_{1b} + 2C_{0b}}{2(\Delta X)^2} \quad (1-20)$$

$$\therefore -\left\{ \frac{3D}{2(\Delta X)^2} + \frac{1}{\Delta t} - \frac{\frac{2D(2D_b / \Delta X)}{\alpha + 2D_b / \Delta X}}{2(\Delta X)^2} \right\} C_1 + \frac{D}{2(\Delta X)^2} C_2 = -\frac{C_{1b}}{\Delta t} - B_b \quad (1-21)$$

$$\text{ただし、 } B_b = \frac{\frac{2D \alpha C_E}{\alpha + 2D_b / \Delta X} + D_b (C_{2b} - 3C_{1b} + 2C_{0b})}{2(\Delta X)^2} \quad (1-22)$$

また、定常問題では(1-20)式は次のようになります。ただし、Dは境界条件に合わせるために付けておきます。

$$\therefore -D \left\{ \frac{3}{(\Delta X)^2} - \frac{\frac{2(2D_b / \Delta X)}{\alpha + 2D_b / \Delta X}}{(\Delta X)^2} \right\} C_1 + \frac{D}{(\Delta X)^2} C_2 = -D \frac{\frac{2 \alpha C_E}{\alpha + 2D_b / \Delta X}}{(\Delta X)^2} \quad (1-20S)$$

<濃度流束境界> (Q: 単位面積当たり濃度流出量)

時刻 $t + \Delta t$ における境界表面濃度 C_0 は(1-12)式で得られます。同様に、時刻 t における境界表面濃度 C_{0b} は次式で表わされます。

$$C_{0b} = C_{1b} - Q \cdot \Delta X / (2D_b) \quad (1-23)$$

(1-6)式に(1-12)式を代入すると、

$$\frac{C_1 - C_{1b}}{\Delta t} = D \frac{C_2 - 3C_1 + 2(C_1 - Q \cdot \Delta X / (2D))}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{2b} - 3C_{1b} + 2C_{0b}}{2(\Delta X)^2} \quad (1-24)$$

$$\therefore -\left\{ \frac{D}{2(\Delta X)^2} + \frac{1}{\Delta t} \right\} C_1 + \frac{D}{2(\Delta X)^2} C_2 = -\frac{C_{1b}}{\Delta t} - B_b \quad (1-25)$$

$$\text{ただし、} B_b = -\frac{Q}{2 \cdot \Delta X} + D_b \frac{C_{2b} - 3C_{1b} + 2C_{0b}}{2(\Delta X)^2} \quad (1-26)$$

また、定常問題では(1-23)式は次のようになります。

$$D \frac{C_2 - C_1}{(\Delta X)^2} = \frac{Q}{\Delta X} \quad (1-23S)$$

1.5 右端境界

右端境界も前節の左端境界と同様ですが、念のため差分式を示しておきます。図1-2のメッシュ n (中心濃度 C_n) において、境界2の各境界種類に関する差分方程式を示します。ただし、境界表面濃度は、左端境界と同じ記号 C_0 、 C_{0b} を使用します。

<不透過境界>

$$\frac{C_n - C_{nb}}{\Delta t} = D \frac{C_{n-1} - C_n}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{n-1, b} - C_{nb}}{2(\Delta X)^2} \quad (1-27)$$

$$\therefore -\left\{ \frac{D}{2(\Delta X)^2} + \frac{1}{\Delta t} \right\} C_n + \frac{D}{2(\Delta X)^2} C_{n-1} = -\frac{C_{nb}}{\Delta t} - B_b \quad (1-29)$$

$$\text{ただし、} B_b = D_b \frac{C_{n-1, b} - 2C_{nb}}{2(\Delta X)^2} \quad (1-30)$$

また、定常問題では次のようになります。ただし、 D は境界条件に合わせるために付けておきます。

$$D \frac{C_{n-1} - C_n}{(\Delta X)^2} = 0 \quad (1-27S)$$

<濃度固定境界> (C_s : 固定濃度)

$$\frac{C_n - C_{nb}}{\Delta t} = D \frac{C_{n-1} - 3C_n + 2C_s}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{n-1, b} - 3C_{nb} + 2C_s}{2(\Delta X)^2} \quad (1-31)$$

$$\therefore -\left\{\frac{3D}{2(\Delta X)^2} + \frac{1}{\Delta t}\right\}C_n + \frac{D}{2(\Delta X)^2}C_{n-1} = -\frac{C_{nb}}{\Delta t} - B_b \quad (1-32)$$

$$\text{ただし、 } B_b = \frac{2D \cdot C_s + D_b(C_{n-1, b} - 3C_{nb} + 2C_s)}{2(\Delta X)^2} \quad (1-33)$$

また、定常問題では次のようになります。ただし、Dは境界条件に合わせるために付けておきます。

$$D \frac{C_{n-1} - 3C_n}{(\Delta X)^2} = -a \frac{2C_s}{(\Delta X)^2} \quad (1-31S)$$

<濃度伝達境界> (C_E : 外部濃度、 α : 濃度伝達係数)

$$C_0 = \frac{\alpha C_E + (2D/\Delta X)T_n}{\alpha + 2D/\Delta X} \quad (1-34)$$

$$C_{0b} = \frac{\alpha C_E + (2D_b/\Delta X)C_{nb}}{\alpha + 2D_b/\Delta X} \quad (1-35)$$

$$\begin{aligned} \frac{C_n - C_{nb}}{\Delta t} &= D \frac{C_{n-1} - 3C_n + 2C_0}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{n-1, b} - 3C_{nb} + 2C_{0b}}{2(\Delta X)^2} \\ &= D \frac{C_{n-1} - 3C_n + 2 \frac{\alpha C_E + (2D/\Delta X)C_n}{\alpha + 2D/\Delta X}}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{n-1, b} - 3C_{nb} + 2C_{0b}}{2(\Delta X)^2} \end{aligned} \quad (1-36)$$

$$\therefore -\left\{\frac{3D}{2(\Delta X)^2} + \frac{1}{\Delta t} - \frac{\frac{2D(2D/\Delta X)}{\alpha + 2D/\Delta X}}{2(\Delta X)^2}\right\}C_n + \frac{D}{2(\Delta X)^2}C_{n-1} = -\frac{C_{nb}}{\Delta t} - B_b \quad (1-37)$$

$$\text{ただし、 } B_b = \frac{\frac{2D\alpha C_E}{\alpha + 2D/\Delta X} + D_b(C_{n-1, b} - 3C_{nb} + 2C_{0b})}{2(\Delta X)^2} \quad (1-38)$$

また、定常問題では次のようになります。ただし、Dは境界条件に合わせるために付けておきます。

$$\therefore -D \left\{ \frac{3}{(\Delta X)^2} - \frac{\frac{2(2D/\Delta X)}{\alpha + 2D/\Delta X}}{(\Delta X)^2} \right\} C_n + \frac{D}{(\Delta X)^2} C_{n-1} = -D \frac{\frac{2\alpha C_E}{\alpha + 2D/\Delta X}}{(\Delta X)^2} \quad (1-36S)$$

<濃度流束境界> (Q : 単位面積当たり濃度流出量)

$$C_0 = C_n - Q \cdot \Delta X / (2D) \quad (1-39)$$

$$C_{0b} = C_{nb} - Q \cdot \Delta X / (2D_b) \quad (1-40)$$

$$\begin{aligned} \frac{C_n - C_{nb}}{\Delta t} &= D \frac{C_{n-1} - 3C_n + 2C_0}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{n-1, b} - 3C_{nb} + 2C_{0b}}{2(\Delta X)^2} \\ &= D \frac{C_{n-1} - 3C_n + 2(C_n - Q \cdot \Delta X / (2D))}{2(\Delta X)^2} + D_b \frac{C_{n-1, b} - 3C_{nb} + 2C_{0b}}{2(\Delta X)^2} \end{aligned} \quad (1-41)$$

$$\therefore -\left\{\frac{D}{2(\Delta X)^2} + \frac{1}{\Delta t}\right\}C_n + \frac{D}{2(\Delta X)^2}C_{n-1} = -\frac{C_{nb}}{\Delta t} - B_b \quad (1-42)$$

$$\text{ただし、 } B_b = -\frac{Q}{2 \cdot \Delta X} + D_b \frac{C_{n-1, b} - 3C_{nb} + 2C_{0b}}{2(\Delta X)^2} \quad (1-43)$$

また、定常問題では次のようになります。

$$\therefore D \frac{C_{n-1} - C_n}{(\Delta X)^2} = \frac{Q}{\Delta X} \quad (1-41S)$$

1.6 右端層間

複数層の場合は、各層において拡散の仕方が変わるので、隣り合う2つの層の間の差分式を導出する必要があります。そこで、図1-5に層間境界の説明図を示します。左側は層1でメッシュn、右側は層2でメッシュ1とし、層1のメッシュnについて右端層間の差分式を導出します。

まず、図1-5に示すように層間面の濃度を C_0 とおくと、層間面で左右のメッシュからの濃度の出入りが釣り合うことから次式が得られます。

$$D_1 \frac{C_0 - C_n}{\Delta X_1} = D_2 \frac{C_1 - C_0}{\Delta X_2} \quad (1-44)$$

$$\therefore C_0 = \frac{(D_1 / \Delta X_1) C_n + (D_2 / \Delta X_2) C_1}{D_1 / \Delta X_1 + D_2 / \Delta X_2} \quad (1-45)$$

従って、時刻 t の層間面濃度については、変数に添え字 b を付して、次式となります。

$$C_{0b} = \frac{(D_{1b} / \Delta X_1) C_{nb} + (D_{2b} / \Delta X_2) C_{1b}}{D_{1b} / \Delta X_1 + D_{2b} / \Delta X_2} \quad (1-46)$$

そこで、(1-6)式の端メッシュの式において、右端メッシュの式にするため C_1 、 C_2 をそれぞれ C_n 、 C_{n-1} に置き換え、さらに(1-45)式を代入すると、次式が得られます。

$$\begin{aligned} \frac{C_n - C_{nb}}{\Delta t} &= D \frac{C_{n-1} - 3C_n + 2C_0}{2(\Delta X_1)^2} + D_b \frac{C_{n-1, b} - 3C_{nb} + 2C_{0b}}{2(\Delta X_1)^2} \\ &= D \frac{C_{n-1} - 3C_n + 2 \frac{(D_1 / \Delta X_1) C_n + (D_2 / \Delta X_2) C_1}{D_1 / \Delta X_1 + D_2 / \Delta X_2}}{2(\Delta X_1)^2} + D_b \frac{C_{n-1, b} - 3C_{nb} + 2C_{0b}}{2(\Delta X_1)^2} \\ \therefore -\left\{3 \frac{D}{2(\Delta X_1)^2} + \frac{1}{\Delta t} - \frac{2D(D_1 / \Delta X_1)}{2(D_1 / \Delta X_1 + D_2 / \Delta X_2)}\right\} C_n &+ \frac{D}{2(\Delta X_1)^2} C_{n-1} + \frac{2D(D_2 / \Delta X_2)}{2(D_1 / \Delta X_1 + D_2 / \Delta X_2)} C_1 \end{aligned} \quad (1-47)$$

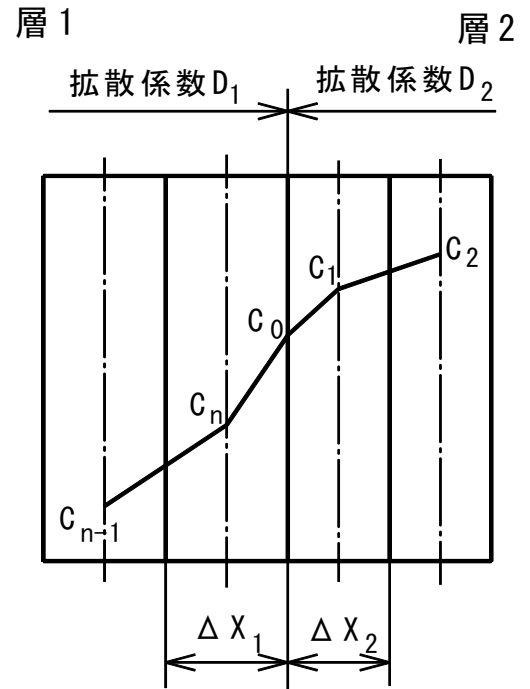


図1-5 層間境界の説明図

$$= -\frac{C_{nb}}{\Delta t} - B_b \quad (1-48)$$

$$\text{ただし、 } B_b = D_b \frac{C_{n-1,b} - 3C_{nb} + 2C_{0b}}{2(\Delta X_1)^2} \quad (1-49)$$

また、定常問題では(1-57)式は次のようになります。ただし、Dは境界条件に合わせるために付けておきます。

$$D \frac{C_{n-1} - \left(3 - 2 \frac{(D_1/\Delta X_1)}{D_1/\Delta X_1 + D_2/\Delta X_2} \right) C_n + 2 \frac{(D_2/\Delta X_2) C_1}{D_1/\Delta X_1 + D_2/\Delta X_2}}{\Delta X_1^2} = 0 \quad (1-47S)$$

1.7 左端層間

同様に、図1-5の右側層2の開始メッシュ1について左端層間の差分式を導出します。層間面の濃度は同様に C_0 とおくと、前節と同じく、(1-45)式、(1-46)式が成立します。そこで、(1-45)式を(1-6)式に代入すると、次式が得られます。

$$\frac{C_1 - C_{1b}}{\Delta t} = D \frac{C_2 - 3C_1 + 2 \frac{(D_1/\Delta X_1) C_n + (D_2/\Delta X_2) C_1}{D_1/\Delta X_1 + D_2/\Delta X_2}}{2(\Delta X_2)^2} + D_b \frac{C_{2b} - 3C_{1b} + 2C_{0b}}{2(\Delta X_2)^2} \quad (1-50)$$

$$\begin{aligned} \therefore & - \left\{ 3 \frac{D}{2(\Delta X_2)^2} + \frac{1}{\Delta t} - \frac{2D(D_2/\Delta X_2)}{D_1/\Delta X_1 + D_2/\Delta X_2} \right\} C_1 + \frac{D}{2(\Delta X_2)^2} C_2 + \frac{2D(D_1/\Delta X_1)}{D_1/\Delta X_1 + D_2/\Delta X_2} C_n \\ & = -\frac{C_{1b}}{\Delta t} - B_b \end{aligned} \quad (1-51)$$

$$\text{ただし、 } B_b = D_b \frac{C_{2b} - 3C_{1b} + 2C_{0b}}{2(\Delta X_2)^2} \quad (1-52)$$

また、定常問題では(1-50)式は次のようになります。ただし、Dは境界条件に合わせるために付けておきます。

$$D \frac{C_2 - \left(3 - 2 \frac{(D_2/\Delta X_2)}{D_1/\Delta X_1 + D_2/\Delta X_2} \right) C_1 + 2 \frac{(D_1/\Delta X_1) C_n}{D_1/\Delta X_1 + D_2/\Delta X_2}}{(\Delta X_2)^2} = 0 \quad (1-50S)$$

1.8 全体の差分方程式

以上で導出してきた各メッシュの差分式を、全メッシュについて合わせると全体の差分方程式が次式の形で得られます。

$$[K]\{C\} = \{F\} \quad (1-53)$$

ただし、 $[K]$ ：全体の拡散差分マトリックス

$\{C\}$ ：全メッシュ点の濃度ベクトル

$\{F\}$ ：全体の右辺ベクトル

微小時間間隔 Δt を設定すれば、行列 $[K]$ と右辺ベクトル $\{F\}$ はすべて既知となるので、(1-53) 式を解いて濃度ベクトル $\{C\}$ を求めることができます。その際、行列 $[K]$ はバンド幅 3 のいわゆるバンドマトリックス形となり、バンドマトリックスの解法により方程式を解くことができます。バンド幅が 3 となることは、各メッシュの差分式で、その両隣のメッシュの濃度しか関係しないことから容易にわかります。

1.9 微小時間間隔 Δt の設定方法

上記の差分方程式において、微小時間間隔 Δt の取り方は重要で、濃度変化が激しい初期段階では小さな値に設定して、計算時の発散を防ぐ必要があります。濃度変化が緩慢になれば、 Δt も大きな値に設定できます。

本ソフトでは、 Δt として、計算開始のステップだけはユーザー入力値を使用しますが、2 回目以降の計算ステップでは各メッシュの濃度変化量が許容値以下になるように自動設定しています。

また、次式による Δt の上限制約を選択することも可能です。もし発散を生じるときは、 Δt の上限制約により防止できます。

$$\Delta t \leq \frac{\Delta X^2}{D} \quad (1-53)$$

1.10 複数ステップとサイクルの関係

本ソフトでは、両端の境界条件について、単一だけでなく、複数のステップで切替変更することができます。その切替変更は、異種の境界でも構いません。

また、その複数ステップを多サイクル繰返すこともできます。ステップ数およびサイクル数は任意に設定できます。それらの関係を図1-6に示します。同図は、ステップ数 3 の例で、各ステップの時間が t_1 、 t_2 、 t_3 です。そして、そのステップ数 3 を 1 サイクルとして、 n サイクル数繰返します。なお、このサイクル数 n は計算時に指定します。

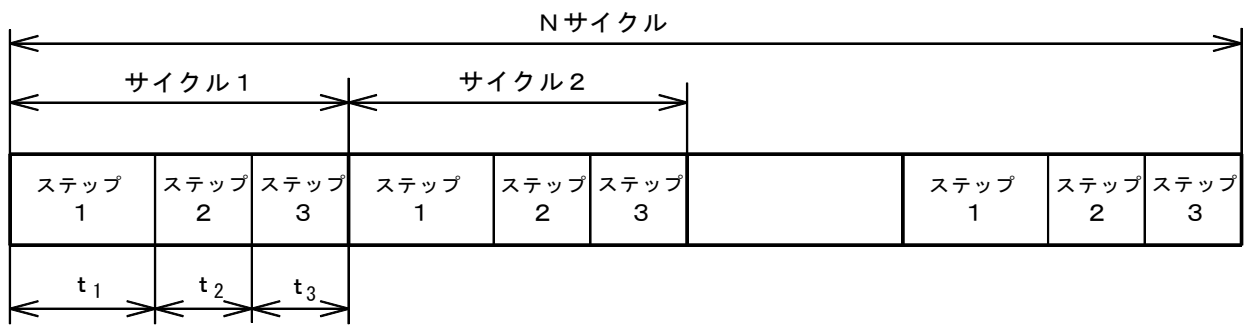


図1-6 境界条件の複数ステップとサイクルの関係（ステップ数3の例）

第2章 プログラムの機能・構成

[VBプロジェクト名] Diffusion1D

本ソフトは両端に境界を有する1次元の拡散解析を行なうもので、定常および非定常の解析が可能です。

本ソフトの立ち上げ画面は、図2-1のメニュー画面です。同図のように、基本メニューは「データ」、「計算」、「後処理」、「終了」の4つです。「データ」メニューでは入力データを作成し、「計算」メニューでは解析計算を実行し、「後処理」メニューでは計算結果の図を作画します。そして、ソフトを終了させる際は、「終了」をクリックします。

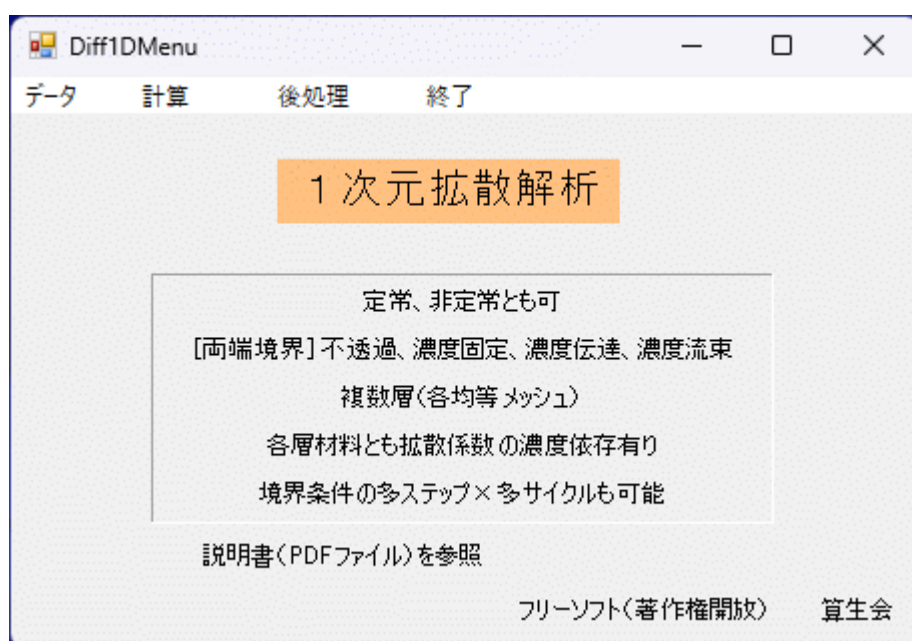


図2-1 「Diffusion1D」ソフトのメニュー画面

次に、図2-2にプログラム構成を示します。同図のように、全体を「メニュー」の Diff1DMenuモジュール* で制御し、その下に「データ」、「計算」、「後処理」の3つのプログラム群に分かれています。

注) * モジュール名や各フォーム名は、ファイル名と名前を一致させてあります。

データファイルは、「入力データファイル」と「結果データファイル」の2種類を使用しています。ただし、本図には示していませんが、いくつかのプログラム部分で一時記憶ファイル（ファイル拡張子「.tmp」）も使用しています。これらデータファイルはいずれもテキスト形式であり、エディターや表計算ソフトで閲覧・印刷することができます。

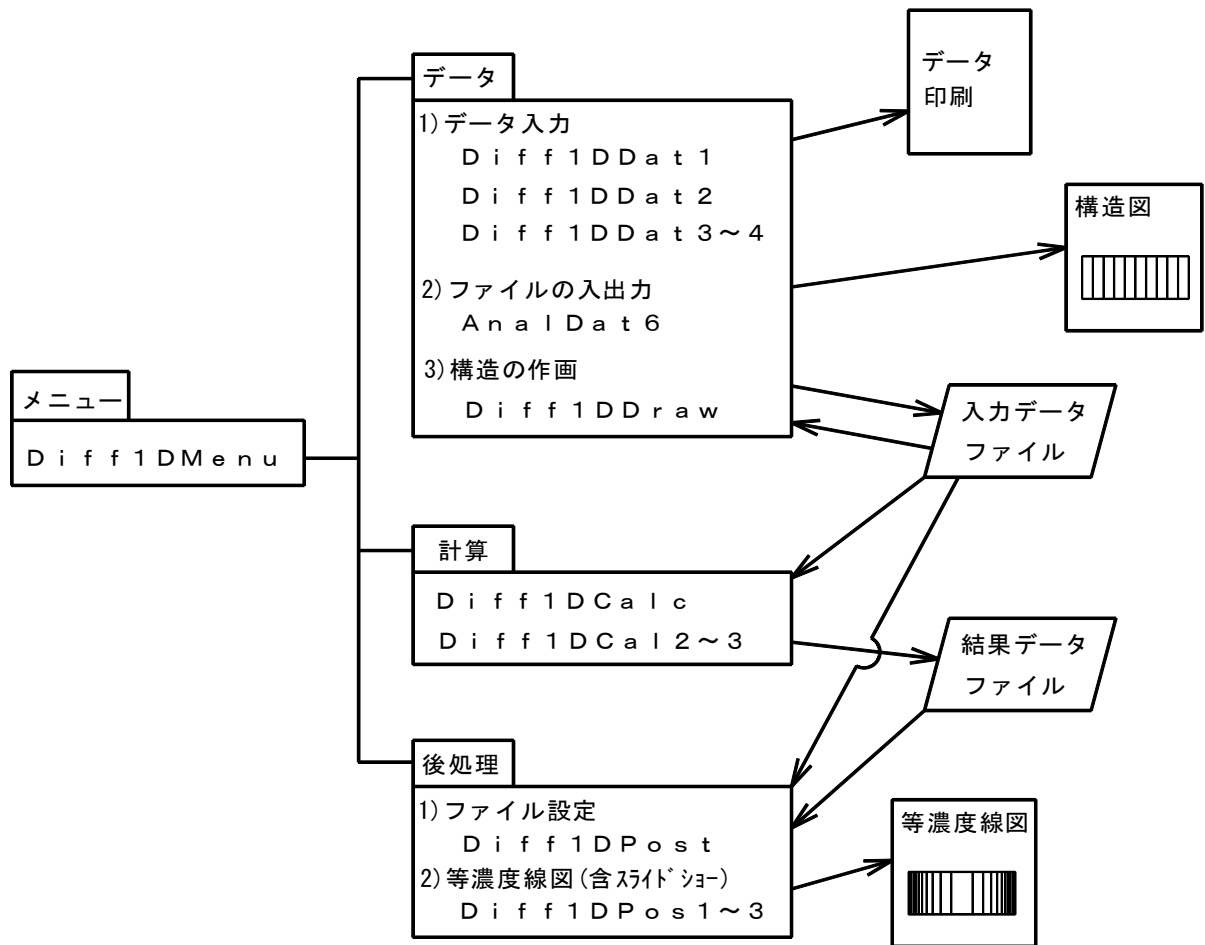


図2-2 「Diffusion1D」ソフトのプログラム構成

表2-1に本ソフトのファイルリストを示します。同表で、[データ]のDiff1DDat1～Diff1DDat4は、各種データを画面入力するためのものです。特に、Diff1DDat2では、1つのフォームモジュールで複数種類のデータをグリッド切替えにより入力できるようにしています。

表2-1 「Diffusion1D」ソフトのファイルリスト

[全般]

ファイル名	内 容
Diff1DCom. vb	共通変数の宣言とサブルーチンの定義
Diff1DMenu. vb	メニューの提示・選択

[データ]

ファイル名	内 容
Diff1DDat1. vb	データ仕様の入力
Diff1DDat2. vb	各データの入力
Diff1DDat3. vb	個別の初期値データの入力
Diff1DDat4. vb	材料データの入力
AnalDat6. vb	データファイルの入出力
Diff1DDraw. vb	構造の作画

[計算]

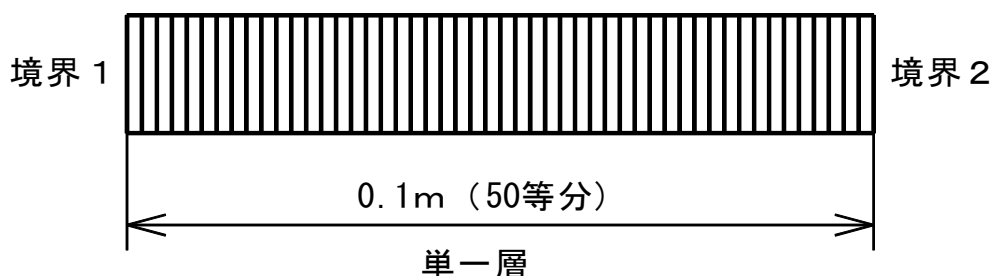
ファイル名	内 容
Diff1DCalc. vb	計算に使用するファイルの設定
Diff1DCal2. vb	計算実行の条件入力
Diff1DCal3. vb	解析計算の実行

[後処理]

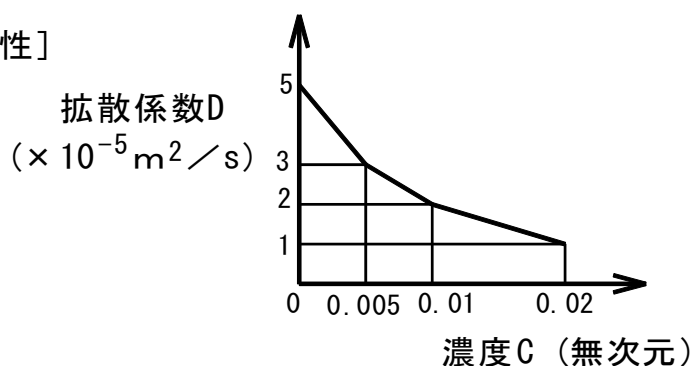
ファイル名	内 容
Diff1DPost. vb	後処理に使用するファイルの設定
Diff1DPos1. vb	等濃度線図の仕様設定
Diff1DPos2. vb	等濃度線図の作画実行
Diff1DPos3. vb	等濃度線図スライドショーの実行

第3章 構造データの作り方

1次元構造ですので、構造データは容易に作成できます。一般的な構造モデルは、図1-1に示した通りです。以降では、図3-1に示す簡単なテストモデルを例に取り、構造データ作成について説明します。



[材料物性]



[境界 1] 濃度固定

固定濃度0.01

[境界 2] 濃度伝達

外部濃度0.0001、濃度伝達係数 2m/s

[初期濃度] 0.001 一様

図3-1 1次元拡散のテストモデル

1) 先ず拡散対象について、層の数と寸法を決めます。

層の数は、通常は材料種類毎に区分けした数としますが、同一材料部分でも細かなメッシュと粗いメッシュとに分けたい場合にはその分だけ増やせばよいです。図3-1の場合は、単一層を示しています。

また、層の寸法は1次元方向の長さのみ決めればよいです。ただし、層全体の幅（1次元方向とは直角方向）も作画用に入力します。

2) 各層のメッシュ数を決めます。

差分メッシュは、各層毎に均等分割です。従って、各層毎にメッシュ数を決めればよいです。メッシュ数は多いほど計算精度が向上しますので、必要に応じたメッシュ数を設定します。

3) 材料物性データを用意します。

材料物性は、拡散係数ですが、濃度との関係を図3-2のような折れ線で設定できます。図3-2では、濃度を m 区分とし、各区分の線分を結んだ折れ線としています。ただし、1つの折れ線区間の濃度範囲幅は、後述の計算条件の「計算1回当たりの濃度変化許容値」に対して、十分大きく（約10倍以上）しておく必要があります。

◇折れ線設定の濃度範囲を外れた場合は、下側は最下限の拡散係数が、上側は最上限の拡散係数が適用されます。

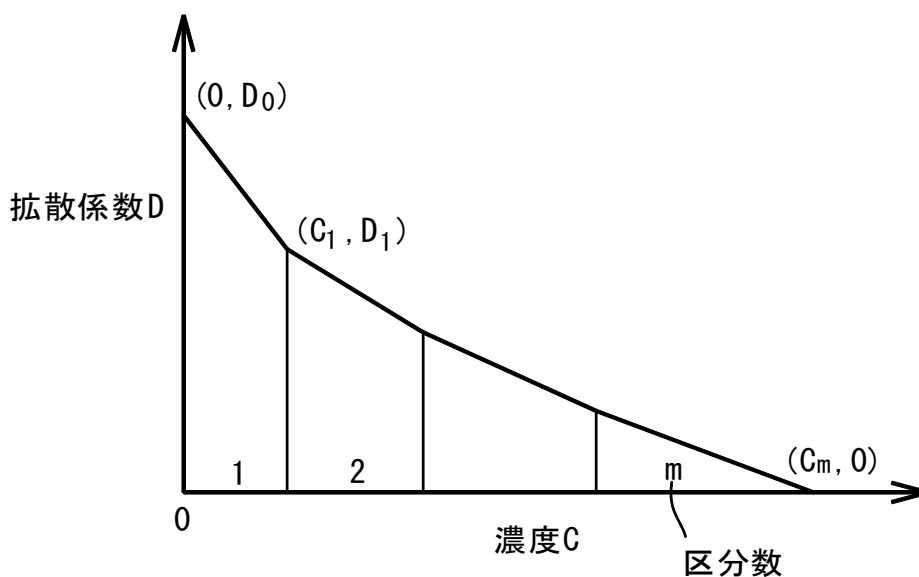


図3-2 濃度区分による拡散係数の与え方

なお、図3-1の例では、濃度区分数を3にしています。

注) 区分数1以上は非定常解析でのみ可能です。定常解析では区分数0のみで、区分数1以上はエラーとなります。

4) 両端の境界条件を決めます。

本ソフトに組み込んである境界条件を表3-1に示します。各境界の詳細は、第1章の1.3節を参照してください。

注) 両端境界と直角方向の幅両側は、濃度の出入りがなく、不透過境界と同じです。

表3-1 境界条件一覧

境界種類	内 容
a) 不透過	物質の出入りなし
b) 濃度固定	一定濃度となるもの
c) 濃度伝達	外部の一定濃度体と濃度伝達するもの
d) 濃度流束	一定の濃度物質が流出入するもの

また、下記のように境界条件を多ステップに設定し、多ステップ×多サイクルの解析を行なうことができます。

注) 多ステップは非定常解析でのみ可能です。定常解析では多ステップはエラーとなります。

[境界条件の多ステップ設定]

両端境界において、境界条件を時間的に多ステップに設定できます。そのステップ数および各ステップ時間は、両端で共通です。

注) 各ステップで異なる境界種類へ変更することもできます。

さらに、濃度の初期値を結果データファイルから読み込んで設定し、境界条件を任意に変更することも可能です。

5) データの単位系

本ソフトでは、データの単位系は何でもよいですが、入力データ全体の単位系は統一しておかねばなりません。表3-2にS I 単位系を示しておきます。ただし、濃度はどのように定義するかによって、単位なしの無次元の場合と単位有りの場合があります。

下記に濃度定義の例を示します。

<濃度定義の例>

a) 全密度に対する拡散物質の質量比（無次元）

$$\text{濃度} C = \rho_1 / \rho \quad (3-1)$$

ただし、 ρ_1 : 単位体積中の拡散物質の質量

ρ : 全密度（単位体積の質量に相当）。

単位体積中の媒体の質量を ρ_2 とすると

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 \quad (3-2)$$

b) 単位体積中の拡散物質のモル数

単位例は、 mol / m^3

表3-2 S I 単位系

データ項目	単位
長さ	m
拡散係数	m^2 / s
濃度伝達係数	m / s

データ項目	単位
濃度（比率）	なし
濃度流束	m / s

濃度（mol）	mol / m^3
濃度流束	$\text{mol} / \text{m}^2 \text{s}$

第4章 「データ」処理プログラム

4.1 サブメニュー画面

「メニュー」プログラムにおける「データ」のサブメニュー選択画面を図4-1に示します。同図に示すように6つのサブメニューがあります。全く新たにデータを作成する場合は「データ入力・修正」を選択しますが、既存ファイルを修正して新たなファイルを作成する場合は先に「ファイル読み込み」を行ないます。

また、「オプション」→「バックアップファイル作成」にチェックを入れると、データ読み込み時にバックアップファイル（.bak）が自動作成されます。チェックを外すと作成されなくなります。

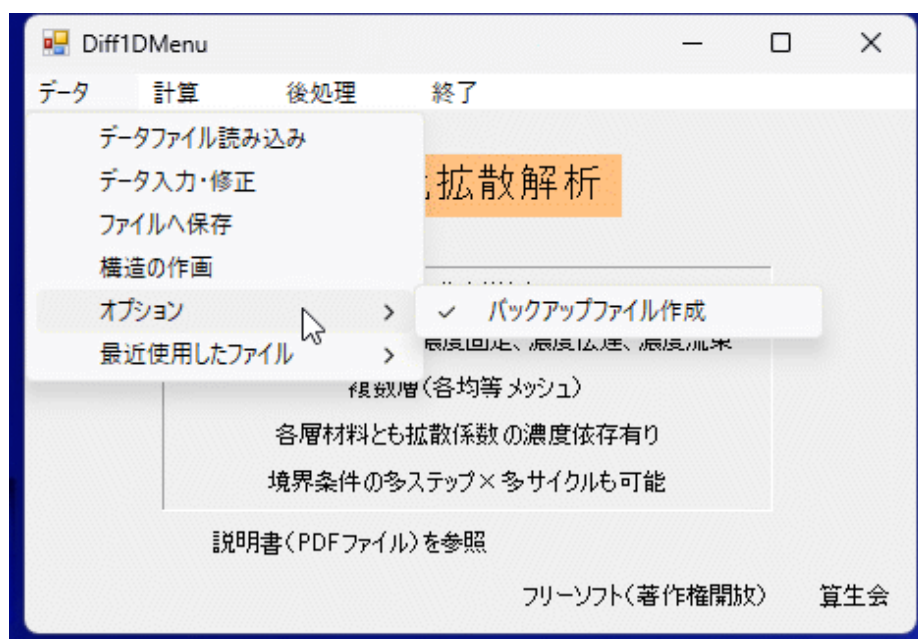


図4-1 「データ」サブメニュー画面

4.2 ファイル読み込み

サブメニューの「ファイル読み込み」を選択すると、コモンダイアログでファイルを開く画面となり、入力データファイルを選定して読み込みます。なお、入力データファイルのデフォルトの拡張子は、「.dat」です。

4.3 データ入力・修正

サブメニューの「データ入力・修正」を選択すると、図4-2のデータ仕様入力画面となります。本画面の入力について、以下に補足説明します。

- ①タイトルは、任意の題名を入力します。
- ②層の数、材料データの数、各構造モデルに応じて入力します。なお、層の数と材料の数は全く別個ですので、1つの材料を複数の層で使用しても構いません。
- ③構造の幅（作画用）は、構造図を作画するために使用するもので、画面に作画する際の寸法バランスを考慮して、構造全長に対する長さを入力します。
- ④境界条件のステップ数を任意に設定できます。このステップ数は両端境界に共通で、

ステップ数を2以上にすると、後の画面で各ステップの時間を設定し、さらに両端境界の数値をステップ数分設定できます。

- ⑤初期値の入力方法は、「なし」、「各層で一括」、「各点個別」、「結果ファイル読み込み」のいずれかを選択します。
- a. 定常解析では「なし」とします。もし初期値を設定してあっても無視されます。他方、非定常解析では初期値の設定が必須です。
 - b. 初期濃度が各層それぞれ一様である場合は、「各層で一括」を選択して1回の初期値入力でメッシュ点全部の初期濃度を設定できます。
 - c. 初期濃度が各層それぞれ一様でない場合は、「各点個別」を選択して、各メッシュ点毎に初期値を入力します。
 - d. 計算済みの結果を初期値に設定する場合は、「結果ファイル読み込み」を選択します。「結果ファイル読み込み」によりファイル読み込みが実行されると、その後は自動的に「各点個別」に移行します。
 - e. 既存データファイルが読み込まれた場合は、「各点個別」選択が初期表示されます。
- ⑥本画面の「設定」ボタンをクリックすると、各データの入力画面に移ります。
- ⑦各データ入力終了すると、本画面に戻るので、そこで「すべて確定」ボタンをクリックすると入力データが確定します。

図4-2 データ仕様入力画面

4.4 層データ入力画面

図4-3に層データ入力画面を示します。

- ①材料番号は、材料データ数に応じた番号を入力します。
- ②層の長さでメッシュ数を入力します。
 - ◇層の長さをメッシュ数で割った値が、1つの差分要素の長さとなります。
 - ◇1つの差分要素の長さは、各構造モデルに応じて、大きくなりすぎないようにし

ます。拡散係数の大きいものは差分要素の長さを大きくできますが、拡散係数が小さいものは要素長さを小さくする必要があります。

- ③「コピー」、「貼り付け」ボタンにより、通常のクリップボード利用ができます。
これは以降の画面でも同様です。

◇「取り消し」ボタンを押すと直前の貼り付けを取り消せます。

- ④すべての層データを入力し終ったなら、「設定」ボタンをクリックして次の材料物性区分数の入力画面に移ります。

図4-3 層データ入力画面

4.5 材料物性区分数の入力画面

図4-4に材料物性区分数の入力画面を示します。

- ①各材料毎に物性区分数を入力します。

◇物性区分数は、濃度区分によって材料物性値を変える場合の区分数です。材料物性値を変えない場合は、材料区分数を0とします。

◇定常解析の場合は、材料区分数は0でなければなりません。

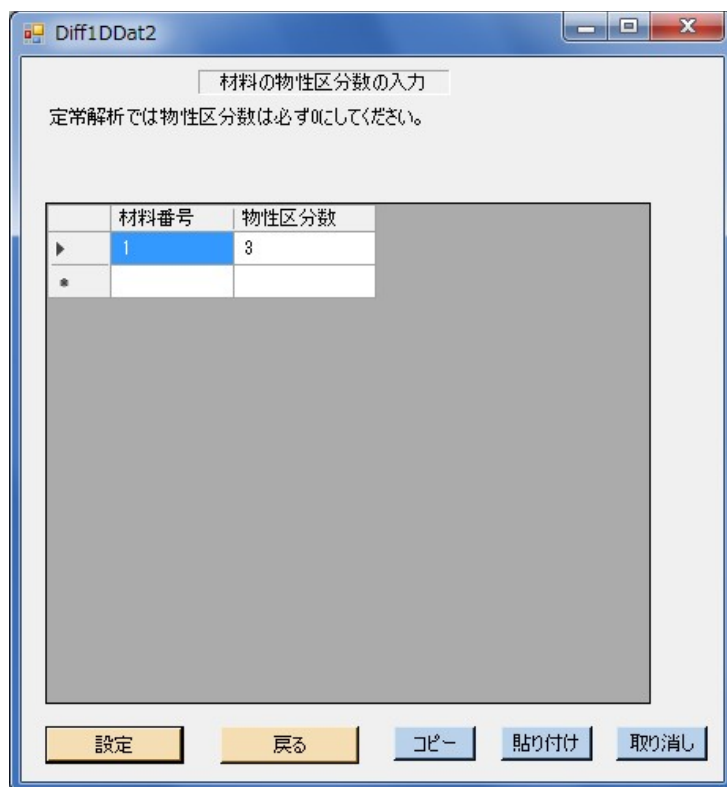
- ②物性区分数を入力し終ったなら、「設定」ボタンをクリックして次の画面に移ります。

4.6 ステップ時間の入力画面

図4-5にステップ時間の入力画面を示します。本画面は、境界条件のステップ数が2以上の場合に表示されます。

- ①各ステップの時間を入力します。なお、全ステップを1サイクルとして、それを何サイクル行なうかは、解析計算実行時に設定できます。

- ②すべてのステップ時間を入力し終ったなら、「設定」ボタンをクリックして次の画面に移ります。



	材料番号	物性区分数
▶	1	3
*		

図4-4 材料物性区分数の入力画面



	番号	ステップ時間
▶	1	6
	2	4
	3	2
*		

図4-5 ステップ時間の入力画面

4.7 左端境界のデータ入力画面

図4-6、4-7に左端境界のデータ入力画面を示します。図4-6はステップ数が1の場合、図4-7はステップ数が3の場合です。

①ステップ番号の順に境界条件を入力します。

◇境界種類は、次の4種類から対応の番号0～3を入力します。

0：不透過、 1：濃度固定、 2：濃度伝達、 3：濃度流束

◇データ1，2には、各境界種類に応じて下記のデータを入力します。ただし、データが1個だけの場合は、データ2は無視されます。

〔不透過〕 なし 〔濃度固定〕 濃度

〔濃度伝達〕 外部濃度、濃度伝達率 〔濃度流束〕 濃度流出量

②ステップ数が2以上の場合、各ステップ番号における境界種類が異なっても構いません。

③すべての左端境界データを入力し終ったなら、「設定」ボタンをクリックして次の画面に移ります。

	ステップ番号	境界種類	データ1	データ2
▶	1	1	.01	0
*				

図4-6 左端境界のデータ入力画面（ステップ数1の場合）

境界1のデータ入力

[境界種類] 0:断熱、1:濃度固定、2:濃度伝達、3:濃度流束
 <各データ> [断熱] なし [濃度固定] 濃度
 [濃度伝達] 外部濃度、濃度伝達率 [濃度流束] 流出濃度

ステップ番号	境界種類	データ1	データ2
1	1	.01	0
2	1	.006	0
3	2	.001	2
*			

設定 戻る コピー 貼り付け 取り消し

図4-7 左端境界条件データ入力画面（ステップ数3の場合）

4.8 右端境界のデータ入力画面

図4-8に左端境界のデータ入力画面を示します。本図はステップ数が1の場合で、他は4.7節と全く同様です。

境界2のデータ入力

[境界種類] 0:断熱、1:濃度固定、2:濃度伝達、3:濃度流束
 <各データ> [断熱] なし [濃度固定] 濃度
 [濃度伝達] 外部濃度、濃度伝達率 [濃度流束] 流出濃度

ステップ番号	境界種類	データ1	データ2
1	2	.0001	2
*			

設定 戻る コピー 貼り付け 取り消し

図4-8 右端境界のデータ入力画面（ステップ数1の場合）

4.9 初期値データ入力画面

本入力は、初期値データがある場合にのみ実施します。初期値は非定常解析の場合に必要となりますが、入力データにおいては、定常・非定常の区別はありません。

1) 「各層で一括」の場合

図4-9に一括設定の初期値データ入力画面を示します。

①一括設定する初期濃度を入力します。

②初期濃度を入力し終ったなら、「設定」ボタンをクリックして3)の「各点個別」に移行します。

図4-9 初期値データの一括入力画面

2) 「結果ファイル読み込み」の場合

図4-10のコモンダイアログ画面となりますので、Diffusion1D結果データファイルを選定して開きます。もし非定常解析の結果データであれば、図4-11または図4-12の入力画面が出ます。

図4-11は境界条件のステップ数1の解析結果に対応するもので、同画面で採用する時間メッシュ番号を入力して「OK」ボタンをクリックします。

他方、図4-12はステップ数2以上の解析結果に対応するもので、同画面で採用するサイクル番号を入力して「OK」ボタンをクリックします。そうすると図4-13の入力画面となるので、同画面で採用するステップ番号を入力して「OK」ボタンをクリックします。

結果ファイルにより初期値が設定された後は、次項の「各点個別」に移行します。

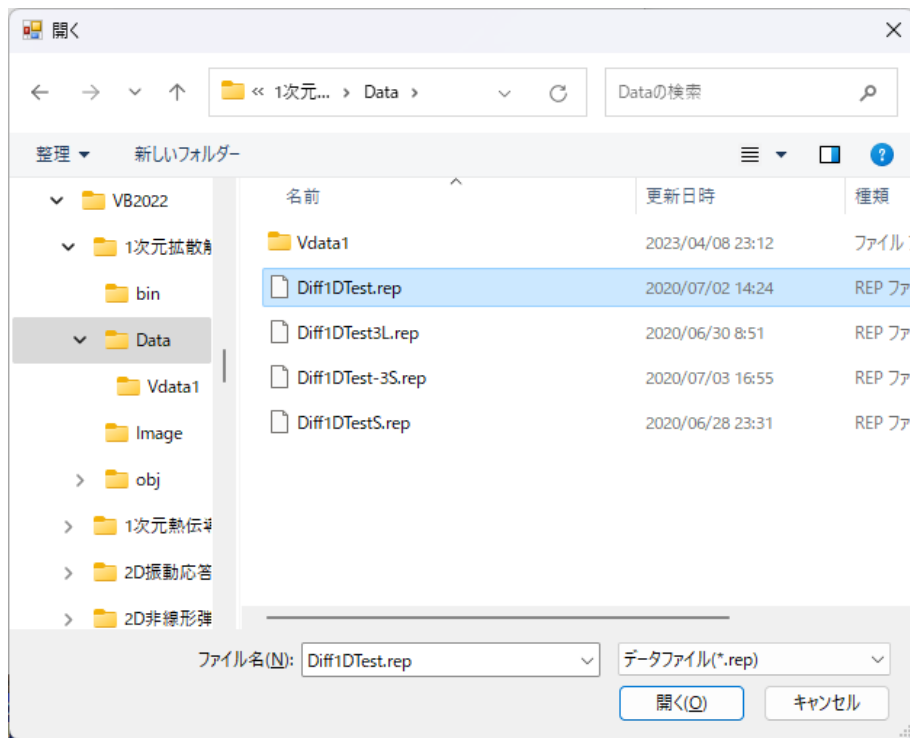


図4-10 Diffusion1D結果ファイル選択のコモンダイログ画面

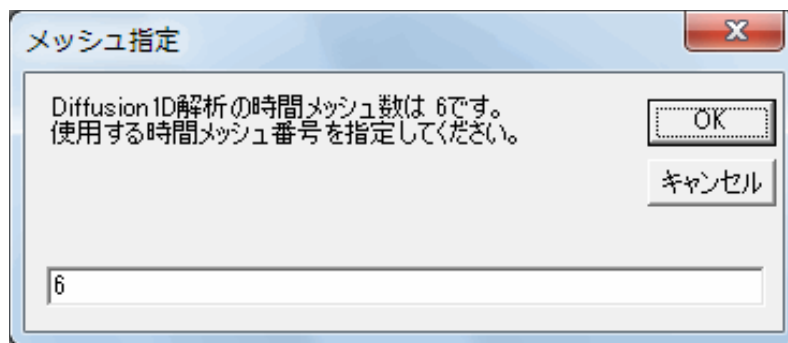


図4-11 解析結果の時間メッシュ指定画面（ステップ数1の場合）

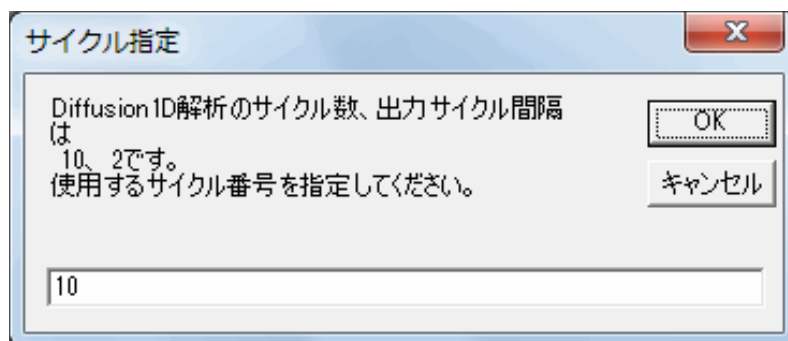


図4-12 解析結果のサイクル番号指定画面（ステップ数2以上の場合）

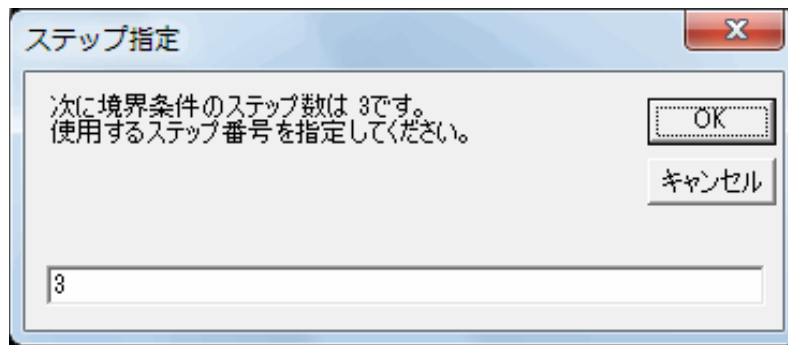


図4-13 解析結果のステップ番号指定画面（ステップ数2以上の場合）

3) 「各点個別」の場合

また、図4-14に個別設定の初期値データ入力画面を示します。

- ①本画面では各メッシュ点毎の初期濃度を入力します。
- ②「コピー」、「貼り付け」ボタンにより、通常のクリップボード利用ができます。
◇「取り消し」ボタンを押すと直前の貼り付けを取り消せます。
- ③データを入力し終ったなら、「設定」ボタンをクリックします。層の数が複数の場合は、順次、次の層番号のデータ入力画面に移ります。すべての層番号について終了すると、次の材料データ入力画面に移ります。

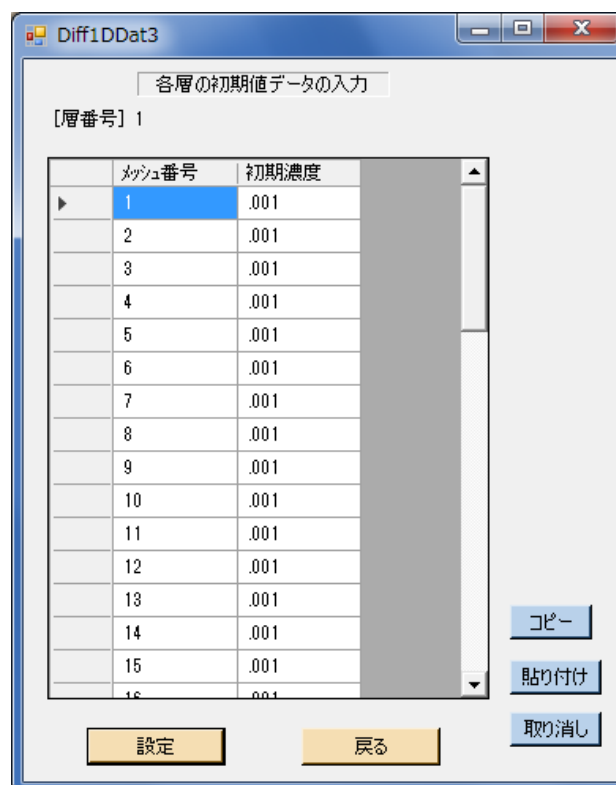


図4-14 初期値データの個別入力画面

4. 10 材料データ入力画面

図4-15に材料データ入力画面を示します。

- ①区分番号の順に、濃度と拡散係数の組を入力します。

◇区分番号0は第1区分の下限です。以降、区分番号は各区分の上限を表わします。
◇物性区分数が0の場合は、任意の濃度と一定の拡散係数を入力します。この場合、任意の濃度は計算に使用しません。

◇入力した濃度の下限を下回る濃度に対しては、下限の拡散係数が適用されます。
同様に、濃度の上限を上回る濃度に対しては、上限の拡散係数が適用されます。

②「コピー」、「貼り付け」ボタンにより、通常のクリップボード利用ができます。

◇「取り消し」ボタンを押すと直前の貼り付けを取り消せます。

③材料データを入力し終ったなら、「設定」ボタンをクリックします。材料の数が複数の場合は、順次、次の材料番号のデータ入力画面に移ります。すべての材料番号について終了すると、図4-2のデータ仕様入力画面に戻ります。

図4-15 材料データ入力画面

4.11 ファイルへの保存

サブメニューの「ファイルへの保存」を選択すると、コモンダイアログでファイルを保存する画面となり、入力データファイルを設定すると、データが書き出されます。新たなファイル名を入力すると新ファイルが作成されます。先に入力データファイルを読み込んである場合に、同ファイルを選定すると上書きとなります。

◇保存ファイルの文字コードはUTF-8です。

◇1行内の複数データは、「,」（コンマ）で区切られます。

図4-16に入力データファイル例を示します。

```

プログラム名, Diffusion1D
1次元拡散解析テスト
層の数, 1
材料データ数, 1
境界条件のステップ数, 1
構造の幅（作画用）, .025
初期値データの有無, 1
各層の形状データ（層番号、材料番号、長さ、分割メッシュ数）
    1,    1,    .1,    50
各材料の物性区分数（材料番号、区分数）
    1,    3
各材料の物性データ
材料番号, 1
    区分番号、濃度、拡散係数
        0,    0,    5E-05
        1,    .05,    3E-05
        2,    .1,    2E-05
        3,    .2,    1E-05
両端境界のデータ
境界番号, 1
    ステップ番号、境界種類（0:不透過、1:濃度固定、2:濃度伝達、3:濃度流束）、各データ
    1,    1,    .01,    0
境界番号, 2
    ステップ番号、境界種類（0:不透過、1:濃度固定、2:濃度伝達、3:濃度流束）、各データ
    1,    2,    .0001,    2
初期濃度データ（メッシュ番号、濃度）
層番号, 1
    1,    .001
    2,    .001
    3,    .001
    4,    .001
    5,    .001
    . . . . .
    . . . . .
    46,    .001
    47,    .001
    48,    .001
    49,    .001
    50,    .001

```

図4-16 入力データファイル例

4.12 構造の作画

サブメニューの「構造の作画」を選択すると、要素分割した構造図が画面に作画されます。図4-17に構造作画の画面例を示します。

①複数材料の場合は、材料別に色分けして表示されます。

②本画面左側のテキストボックスで、作画の層番号を指定できます。

◇層番号を入力してから、「再描画」ボタンをクリックすると、指定した層だけの構造図が作画されます。

注) 本例の場合は層の数が1つだけですので、層番号の指定は関係ありません。

◇指定した層の構造図を作画した後、再び全層を作画させるには、「全層作画」ボタンをクリックします。

③「標準・全画面切換」ボタンをクリックすると、標準画面と全画面を切り換えることができます。また、画面Formの右下コーナー等をマウスドラッグすることにより、標準画面と全画面の間で自由に拡大・縮小できます。

④マウス中ボタン、ホイールにより移動、拡大・縮小を行なうことができます。中ボタンを押したまま動かせば図形を移動できます。また、ホイールの回転により拡大・縮小ができます。

④本画面で「コピー印刷」ボタンをクリックすると、プリンターで画面コピーを印刷できます。

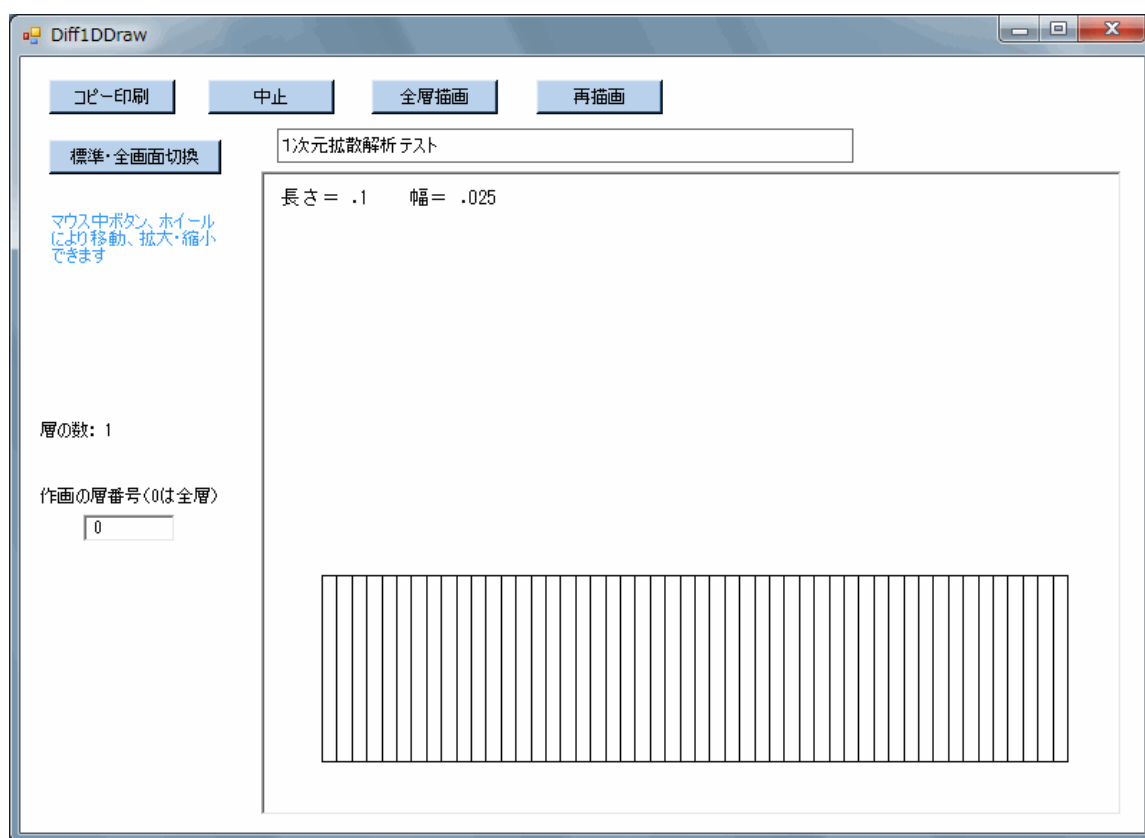


図4-17 構造作画の画面例

4.13 最近使用したファイルの選択

サブメニュー「最近使用したファイル」のポップアップで、ファイルリストから選択できます。

注) 新版ソフトでファイルが使用されないとリスト表示されません。

第5章 「計算」プログラム

5.1 サブメニュー画面

「メニュー」プログラムにおける「計算」のサブメニュー画面を図5-1に示します。同図のように定常解析と非定常解析の2つのサブメニューがあります。いずれかをクリックすると、次の「計算」ファイル設定画面に移ります。

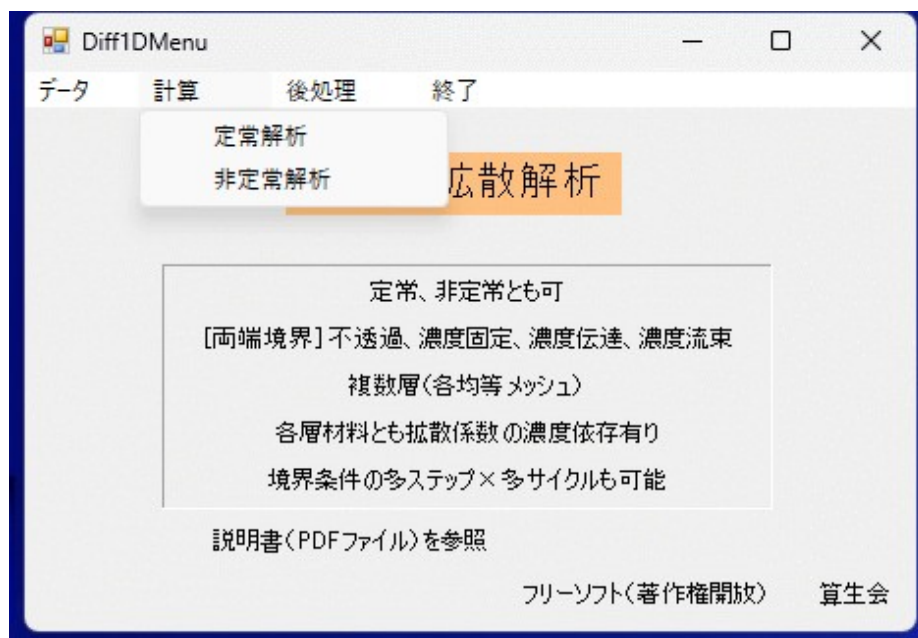


図5-1 「計算」サブメニュー画面

5.2 「計算」ファイル設定

図5-2に「計算」ファイル設定画面を示します。同画面で、「入力ファイル指定」ボタンをクリックすると、コモンダイアログで入力データファイルを選定できます。そして、再び「計算」ファイル設定画面に戻ると、「入力ファイル指定」のテキストボックスには選定済み入力ファイル名が、また「出力ファイル指定」の方には入力ファイル名の拡張子を「.rep」に変更したファイル名が表示されます。もし、他のファイル名に変更したい場合は、テキストボックスで修正できます。

本画面で「設定」ボタンをクリックすると、「定常解析」ではすぐに計算が開始され、「非定常解析」では次の条件入力画面に移ります。

5.2 非定常計算の条件入力画面

図5-3、図5-4に条件入力画面を示します。図5-3は境界条件のステップ数が1の場合、図5-4はステップ数が2以上の場合の画面です。先ず図5-3について説明します。

①先ず、計算打ち切り時間と出力時間メッシュ数を入力します。

◇計算打ち切り時間は、拡散の経過時間上限を意味し、本時間まで計算を実行します。もし計算打ち切り時間がはっきりわからなければ、少し短めで任意の時間を設定し、計算結果を見て再計算すればよいです。

◇出力時間メッシュ数は、計算打ち切り時間を何分割して結果出力を行なうかの値

です。本メッシュ間隔毎に、その時点の計算結果をファイル出力します。

②次に、計算時間間隔の初期値と計算1回当たりの濃度変化許容値を入力します。

◇計算時間間隔の初期値とは、最初に計算試行する経過時間長さのことで、かなり小さ目の値を入れておきます。

◇計算1回当たりの濃度変化許容値は、各時間ステップにおいて許容する濃度変化量の上限値です。各時間ステップにおける各節点の濃度変化量が本許容値を超えないように、各ステップの時間を自動設定しています。

③また、計算時間間隔の上限制約は、「なし」か「有り」を選択します。通常は「なし」でよいですが、もし発散を生じる場合は「有り」を選択して再計算してください。

④本画面で「設定」ボタンをクリックすると、計算が開始されます。

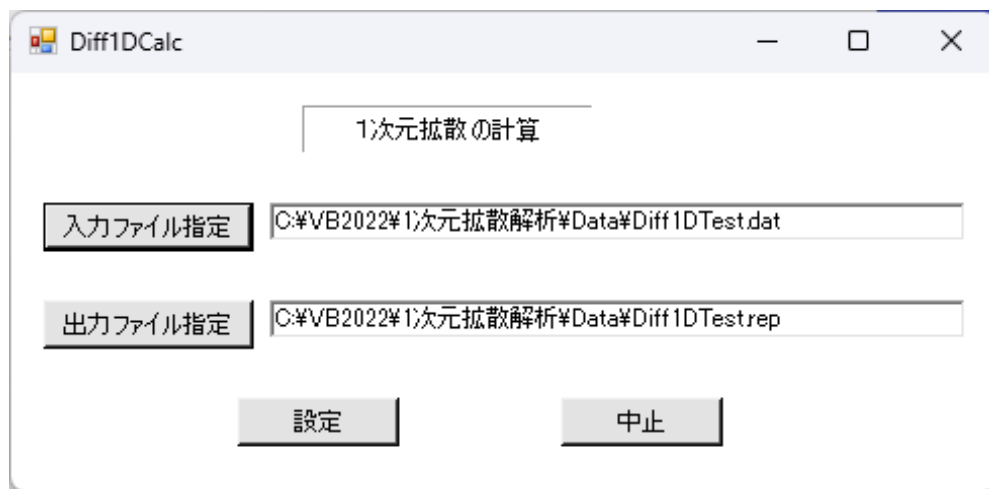


図5-2 「計算」ファイル設定画面

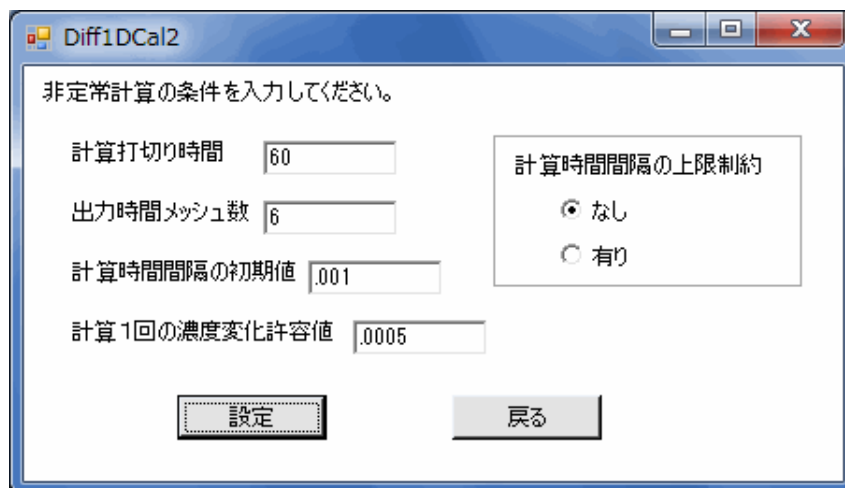


図5-3 非定常計算の条件入力画面（ステップ数1の場合）

他方の図5-4では、上記の①の替わりに計算サイクル数と出力サイクル間隔を入力します。それ以外は上記と同じです。

◇計算サイクル数は、境界条件の全ステップを1サイクルとして、何サイクル計算

するかの回数です。

◇出力サイクル間隔は、計算結果をファイル出力するサイクル間隔のことで、出力サイクルにおいては各ステップの終了時の結果が出力されます。また、最終サイクルについては、出力サイクル間隔と一致していなくても、自動的に出力されます。

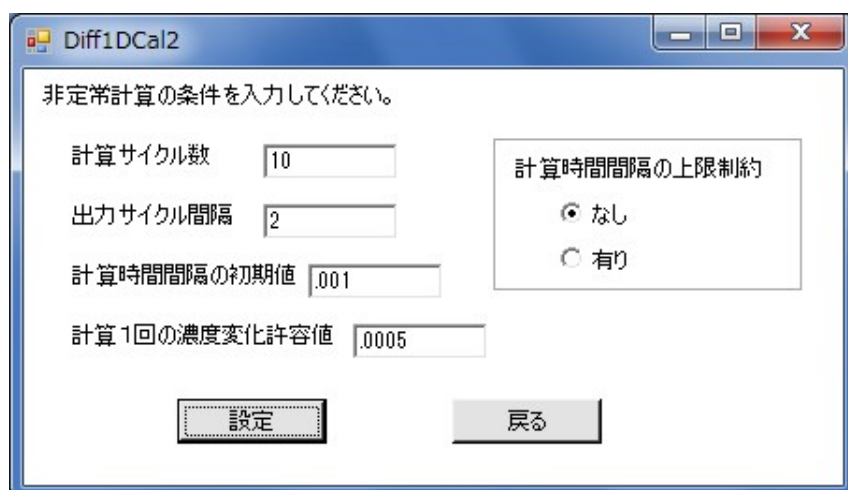


図5-4 非定常計算の条件入力画面（ステップ数2以上の場合）

5.3 計算終了

図5-5に計算終了画面を示します。同図では、かかった計算時間も表示されますが、本例では0sとなっており、1s未満で終了しています。また、計算確認ダイアログ画面では最低・最高濃度も表示されます。本画面で「OK」ボタンをクリックすると、立ち上げ時のメニュー画面に戻ります。

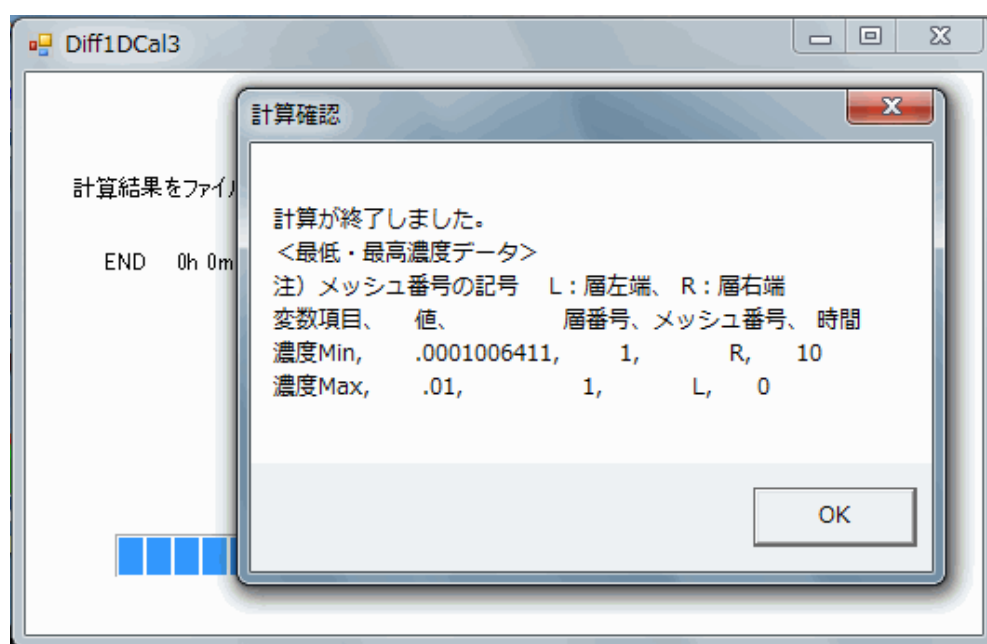


図5-5 計算終了画面

5.4 計算結果

上記5.1節で指定した出力ファイルに計算結果が書き出されます。図5-6～8に結果ファイルへの出力例を示します。図5-6は定常解析の場合、図5-7はステップ数1の非定常解析の場合、図5-8はステップ数2以上の場合です。

先ず、図5-6の定常解析の場合について、同図で○印を付した数字の部分について補足説明します。

- ①境界1側（本例では温度固定）の表面濃度が0.01と出力されています。
- ②各層の順番に出力されます。
- ③全メッシュ点の番号と濃度が出力されています。
- ④境界2側（本例では濃度伝達境界）の表面濃度が0.0001025と出力されています。
- ⑤最低・最高濃度データとして、それらの値、層番号、メッシュ番号が出力されています。
- ⑥最後に計算時間も出力されます（本例では0s）。

次に、図5-7の非定常解析（ステップ数1）の場合について、同図で○印を付した数字の部分について補足説明します。その他は上記の定常解析と同様です。

- ①計算時間間隔の初期値0.001と、計算1回の濃度変化許容値0.0005が出力されています。
- ②各出力メッシュ毎に、時間メッシュ番号と時間が示された後、その時点の計算結果が出力されます。時間メッシュ番号0、時間0は初期を意味します。
- ③時間メッシュ1、時間10において、境界および全メッシュ点について濃度が出力されています。
- ④時間メッシュ2、時間20以下、同様に計算結果の濃度が出力されます。
- ⑤最低・最高濃度データとして、それらの値、層番号、メッシュ番号、時間が出力されています。
- ⑥最後に計算時間も出力されています（本例では0s）。

また、図5-8の非定常解析（ステップ数2以上）の場合について、同図で○印を付した数字の部分について補足説明します。その他は上記の定常解析と同様です。

- ①各出力サイクルの各ステップ毎（終了時点）に、サイクル番号、ステップ番号、時間が示された後、その時点の計算結果が出力されます。サイクル番号0、ステップ番号0、時間0は初期を意味します。
- ②サイクル番号2、ステップ番号1、時間21において、境界1側、各層、境界2側の順に濃度が出力されています。
- ③サイクル番号2、ステップ番号2、時間25以下、同様に計算結果の濃度が出力されます。
- ④最低・最高濃度データとして、それらの値、層番号、メッシュ番号、時間が出力されています。
- ⑤最後に計算時間も出力されています（本例では1s）。

```

<< 1次元拡散解析の計算結果>>
1次元拡散解析テスト・・・定常解析
[入力データファイル] , C:\¥VB2022¥1次元拡散Test¥Data¥Diff1DTestS. dat
解析種類 (0:定常、1:非定常) , 0
-----
<境界番号、表面濃度> , 1, .01
<層番号> , 1
(メッシュ番号、濃度)
1, .009901024
2, .009703074
3, .009505124
4, .009307173
5, .009109222
6, .008911272
7, .008713322
8, .008515371
9, .00831742
10, .00811947
11, .00792152
12, .007723569
13, .007525619
14, .007327668
15, .007129718
. . . . .
. . . . .
36, .002972757
37, .002774806
38, .002576856
39, .002378905
40, .002180955
41, .001983004
42, .001785054
43, .001587103
44, .001389153
45, .001191202
46, .0009932517
47, .0007953012
48, .0005973506
49, .0003994001
50, .0002014496
<境界番号、表面濃度> , 2, .0001024744
-----
<最低・最高濃度データ>
注) メッシュ番号の記号 L:層左端、R:層右端
変数項目、 値、 層番号、メッシュ番号
濃度Min, .0001024744, 1, R
濃度Max, .01, 1, L
END 0h 0min 0s

```

①

②

③

④

⑤

⑥

図5-6 結果ファイルへの出力例（定常解析）

```

<< 1次元拡散解析の計算結果>>
1次元拡散解析テスト
[入力データファイル], C:\¥VB2022¥1次元拡散Test¥Data¥Diff1DTest.dat
解析種類 (0:定常、1:非定常), 1
計算打ち切り時間, 60, 出力時間メッシュ数, 6
計算時間間隔の初期値, .001, 計算1回の濃度変化許容値, .0005
計算時間間隔の上限制約 (0:なし、1:有り), 0
-----
<時間メッシュ番号、時間>, 0, 0
<境界番号、表面濃度>, 1, .01
<層番号>, 1
(メッシュ番号、濃度)
1, .001
2, .001
3, .001
. . . . .
48, .001
49, .001
50, .001
<境界番号、表面濃度>, 2, .0001217799
"-----"
<時間メッシュ番号、時間>, 1, 10
<境界番号、表面濃度>, 1, .01
<層番号>, 1
(メッシュ番号、濃度)
1, .009768708
2, .009307111
3, .00884845
4, .008394623
5, .007947449
. . . . .
47, .0002805444
48, .0002290612
49, .0001776634
50, .0001263105
<境界番号、表面濃度>, 2, .0001006411
"-----"
<時間メッシュ番号、時間>, 2, 20
. . . . .
<最低・最高濃度データ>
注) メッシュ番号の記号 L:層左端、R:層右端
変数項目、 値、 層番号、メッシュ番号、 時間
濃度Min, .0001006411, 1, R, 10
濃度Max, .01, 1, L, 0
END 0h 0min 0s

```

図5-7 結果ファイルへの出力例（非定常解析、ステップ数1の場合）

```

<< 1次元拡散解析の計算結果>>
1次元拡散解析テスト（ステップ数3）
[入力データファイル] , C:\¥VB2022¥1次元拡散Test¥Data¥Diff1DTest-3S. dat
解析種類（0:定常、1:非定常）, 1
計算サイクル数, 10, 出力サイクル間隔, 2
境界条件のステップ数, 3
計算時間間隔の初期値, .001, 計算1回の濃度変化許容値, .0005
計算時間間隔の上限制約（0:なし、1:有り）, 0

-----
<サイクル番号、ステップ番号、時間>, 0, 0, 0 ①
<境界番号、表面濃度>, 1, .01
<層番号>, 1
(メッシュ番号、濃度)
1, .001
2, .001
3, .001
. . . . .
. . . . .
48, .001
49, .001
50, .001
<境界番号、表面濃度>, 2, .0002788462
"-----"
<サイクル番号、ステップ番号、時間>, 2, 1, 21 ②
<境界番号、表面濃度>, 1, .01
<層番号>, 1
(メッシュ番号、濃度)
1, .009901228
2, .009703688
3, .009506146
4, .009308606
. . . . .
. . . . .
47, .0008157981
48, .0006183243
49, .0004208501
50, .0002233769
<境界番号、表面濃度>, 2, .0001246401
"-----"
<サイクル番号、ステップ番号、時間>, 2, 2, 22 ③
. . . . .
. . . . .
<最低・最高濃度データ>
注) メッシュ番号の記号 L: 層左端、R: 層右端
変数項目、 値、 層番号、メッシュ番号、 時間
濃度Min, 7.955202E-05, 1, R, 22
濃度Max, .01, 1, L, 0
END 0h 0min 1s

```

図5-8 結果ファイルへの出力例（非定常解析、ステップ数2以上の場合）

第6章 「後処理」プログラム

6.1 サブメニュー画面

「メニュー」プログラムにおける「後処理」のサブメニュー画面を図6-1に示します。同図のように4個のサブメニューがあります。いずれのサブメニューをクリックしても次の使用ファイル設定画面になります。ただし、「等濃度線図スライドショー」は非定常解析結果についてのみ実施可能です。

「解析結果の端数処理」とは、解析結果ファイルのデータに対して、微小な端数を丸めた実用的な数値に変更してファイル出力するものです。これは必要があれば実施してください。

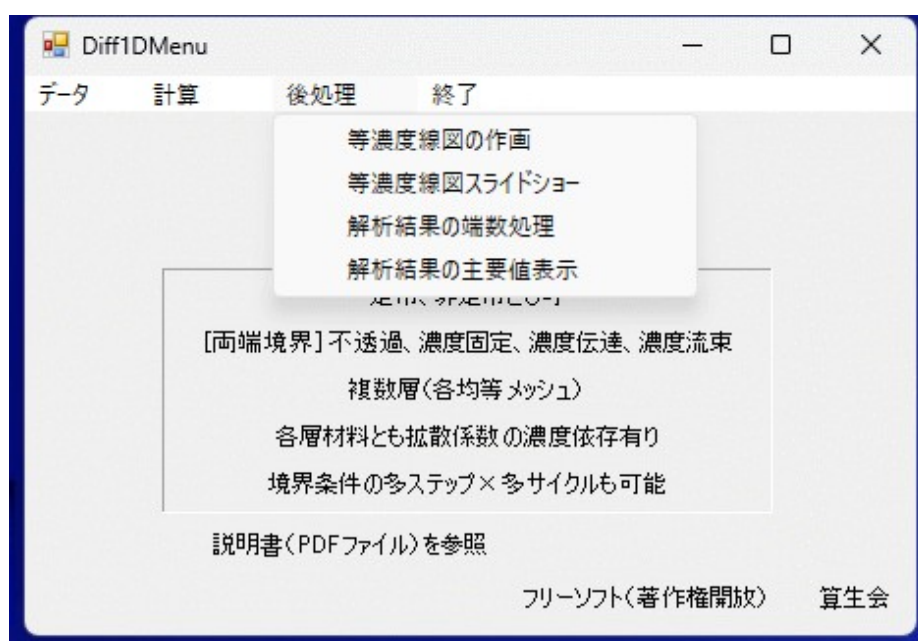


図6-1 「後処理」サブメニュー画面

6.2 使用ファイルの設定

図6-2に使用ファイル設定画面を示します。同画面で、表題が「等濃度線図の作成」になっていますが、他のサブメニューの場合は表題が入れ替わります。

本画面で、「入力データファイル指定」ボタンをクリックすると、コモンダイアログで入力データファイルを選定できます。そして、再び使用ファイル設定画面に戻ると、「入力データファイル指定」のテキストボックスには選定済み入力ファイル名が、また「解析結果ファイル指定」の方には入力ファイル名の拡張子を「.rep」に変更したファイル名が表示されます。もし、ファイル名が他の名前であった場合は、テキストボックスで修正できます。

本画面で、「設定」ボタンをクリックすると、等濃度線図の作画やスライドショーの場合は等濃度線図の仕様設定画面に移ります。また、解析結果の端数処理の場合は、コモンダイアログで保存ファイル名を設定した後、端数処理が実行されます。さらに、解析結果の主要値表示の場合は、すぐに表示が実行されます。



図6-2 使用ファイル設定画面

6.3 等濃度線図の仕様設定画面

図6-3～6に等濃度線図の仕様設定画面を示します。図6-3は「等濃度線図の作画」で定常解析の場合、図6-4は同じくステップ数1の非定常解析の場合、図6-5は同じくステップ数2以上の非定常解析の場合、図6-6は「等濃度線図スライドショー」の場合です。これらの画面の入力について、以下に補足説明します。

- ①まず、等濃度線の表示MIN、MAX、分割数を入力します。その際、入力の便のため、解析結果データの濃度範囲を画面表示しています。
 - ◇分割数を21以上にすると、自動的にグラデーションとなります。グラデーションはカラー128階調で作画されます。なお、グラデーションの作画は処理時間が1桁増加しますので注意してください。
- ②また、層の数が複数の場合は、画面表示する層番号の範囲も入力します。通常は全層範囲となることが多いので、要素番号に0を入れれば全層指定としています。
- ③図6-4では、さらに出力する時間メッシュ番号も入力します。
 - ◇時間メッシュ番号を入力後、Returnキーを押すと、その右側に相当時間が表示されます。
- ③他方、図6-5のステップ数2以上の場合は、出力するサイクル番号とステップ番号を入力します。
 - ◇サイクル番号やステップ番号を入力後、Returnキーを押すと、ステップ番号入力部の右側に相当時間が表示されます。
- ④また、等濃度線図のカラーフィルについて、なしか有りかを選択します。
 - ◇カラーフィル有りの場合は、各等濃度線の間が色塗りされ、全面カラー図となります。デフォルトではカラーフィル有りとしています。
 - ◇グラデーションの場合は、カラーフィル有無の選択には無関係です。
- ⑤本画面で、「最低・最高濃度データ」のボタンをクリックすると、最低・最高濃度データが表示されます。
 - ◇図6-7に最低・最高濃度データの表示例を示します。
- ⑥本画面で、「設定」ボタンをクリックすると、次の等濃度線図作画画面に移ります。

Diff1DPos1

等濃度線図の仕様設定

濃度メッシュを設定してください。

濃度範囲は .0001024744 ~ .01

表示濃度 MIN

表示濃度 MAX

表示分割数

分割数21以上はグラデーション

等濃度線図のカラーフィル

☐ なし

☒ 有り

最低・最高濃度データ

設定 中止

図6-3 等濃度線図の仕様設定画面（定常解析）

Diff1DPos1

等濃度線図の仕様設定

濃度メッシュと層の範囲を設定してください。

濃度範囲は 0 ~ .01 層番号範囲は 1 ~ 3

表示濃度 MIN

表示濃度 MAX

表示分割数

開始の層番号

終了の層番号

0を入れると全層

分割数21以上はグラデーション

出力時間メッシュ数は 10 計算打ち切り時間は 100

時間メッシュ番号

左記指定時の時間は 100

等濃度線図のカラーフィル

☐ なし

☒ 有り

最低・最高濃度データ

設定 中止

図6-4 等濃度線図の仕様設定画面（非定常解析、ステップ数1の場合、複数層）

Diff1DPos1

等濃度線図の仕様設定

濃度メッシュを設定してください。

濃度範囲は 7.955202E-05 ~ .01

表示濃度 MIN

表示濃度 MAX

表示分割数

分割数21以上はグラデーション

計算サイクル数は 10 境界条件のステップ数は 3

サイクル番号 出力サイクル間隔は 2

ステップ番号 左記終了の時間は 118

等濃度線図のカラーフィル

☐ なし

☒ 有り

最低・最高濃度データ

設定 中止

図6-5 等濃度線図の仕様設定画面（非定常解析、ステップ数2以上の場合）

Diff1DPos1

等濃度線図の仕様設定

濃度メッシュを設定してください。

濃度範囲は .0001006411 ~ .01

表示濃度 MIN

表示濃度 MAX

表示分割数

分割数21以上はグラデーション

等濃度線図のカラーフィル

☐ なし

☒ 有り

最低・最高濃度データ

設定 中止

図6-6 等濃度線図の仕様設定画面（非定常解析、スライドショーの場合）

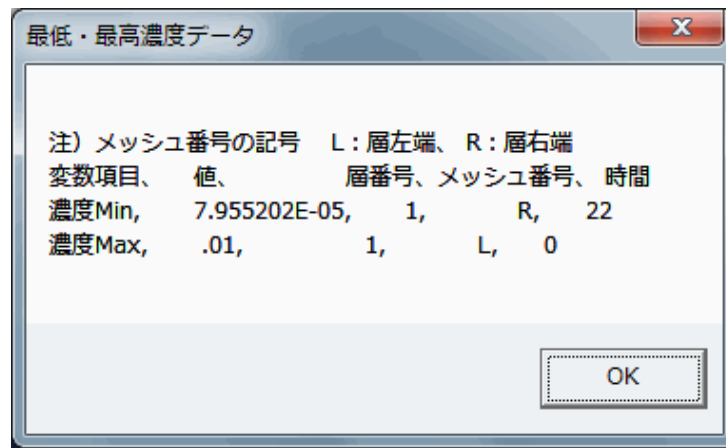


図6-7 最低・最高濃度データの表示例

6.4 等濃度線図の作画画面

図6-8～11に等濃度線図の作画画面を示します。図6-8は定常解析の場合、図6-9は境界条件のステップ数1の非定常解析の場合、図6-10はそのグラデーションです。また、図6-11はステップ数2以上の非手錠解析の場合で、右最上部にサイクル番号とステップ番号が表示されます。

- ①それらの図のように、等濃度線がカラー表示され、右欄には各等濃度線における変数値も明示してあります。

◇図6-10のグラデーションの場合は、4等分した5つの変数値が示されます。

- ②「標準・全画面切換」ボタンをクリックすると、標準画面と全画面を切り換えることができます。また、画面Formの右下コーナー等をマウสดラッグすることにより、標準画面と全画面の間で自由に拡大・縮小できます。
- ③マウス中ボタン、ホイールにより移動、拡大・縮小を行なうことができます。中ボタンを押したまま動かせば図形を移動できます。また、ホイールの回転により拡大・縮小ができます。
- ④本画面で「コピー印刷」ボタンをクリックすると、プリンターで画面コピーを印刷できます。
- ⑤本画面を終了するには、「戻る」ボタンをクリックして、仕様設定画面に戻ります。また、もし等濃度線図の出来栄えに不満があれば、「戻る」ボタンで仕様設定画面に戻って仕様変更し、再度、等濃度線図を作画することができます。

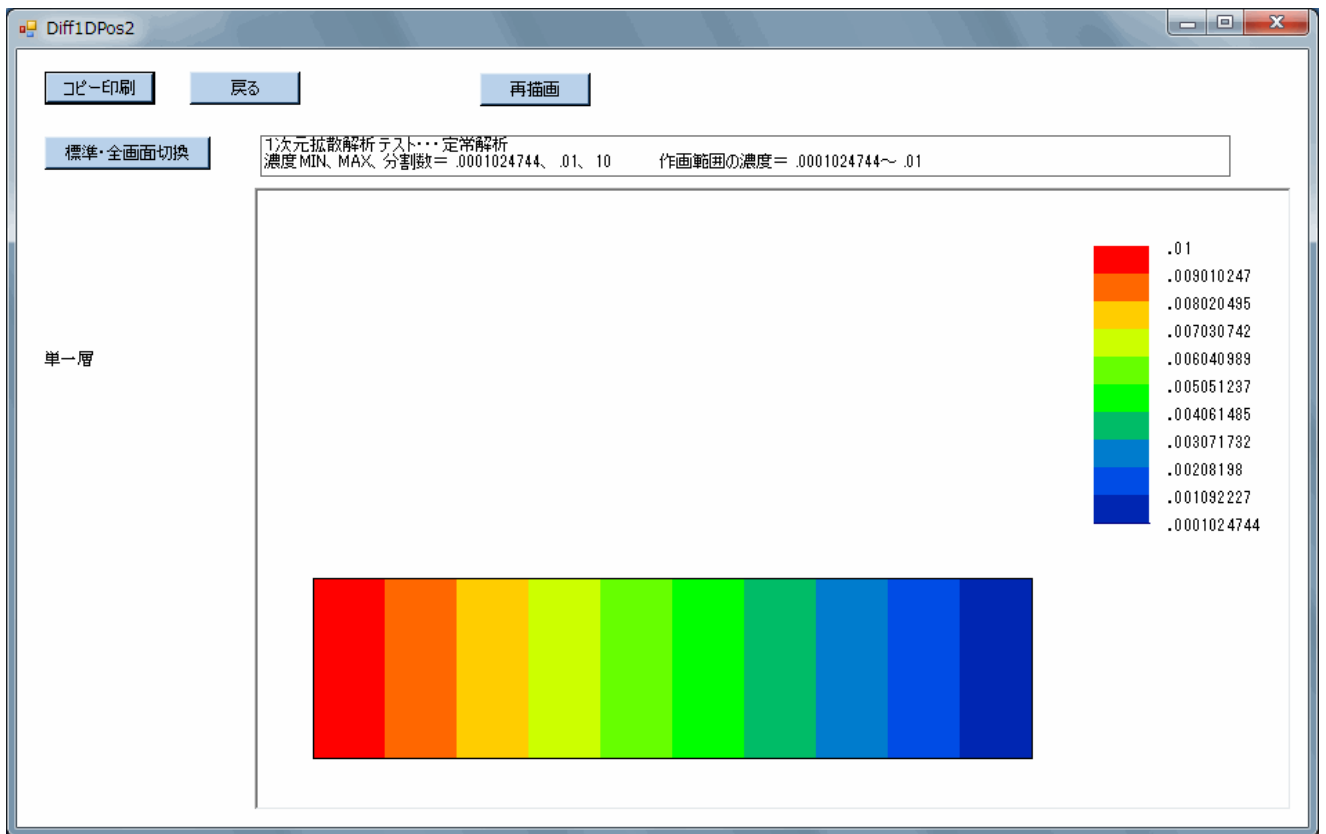


図6-8 等濃度線図の作画画面（定常解析）

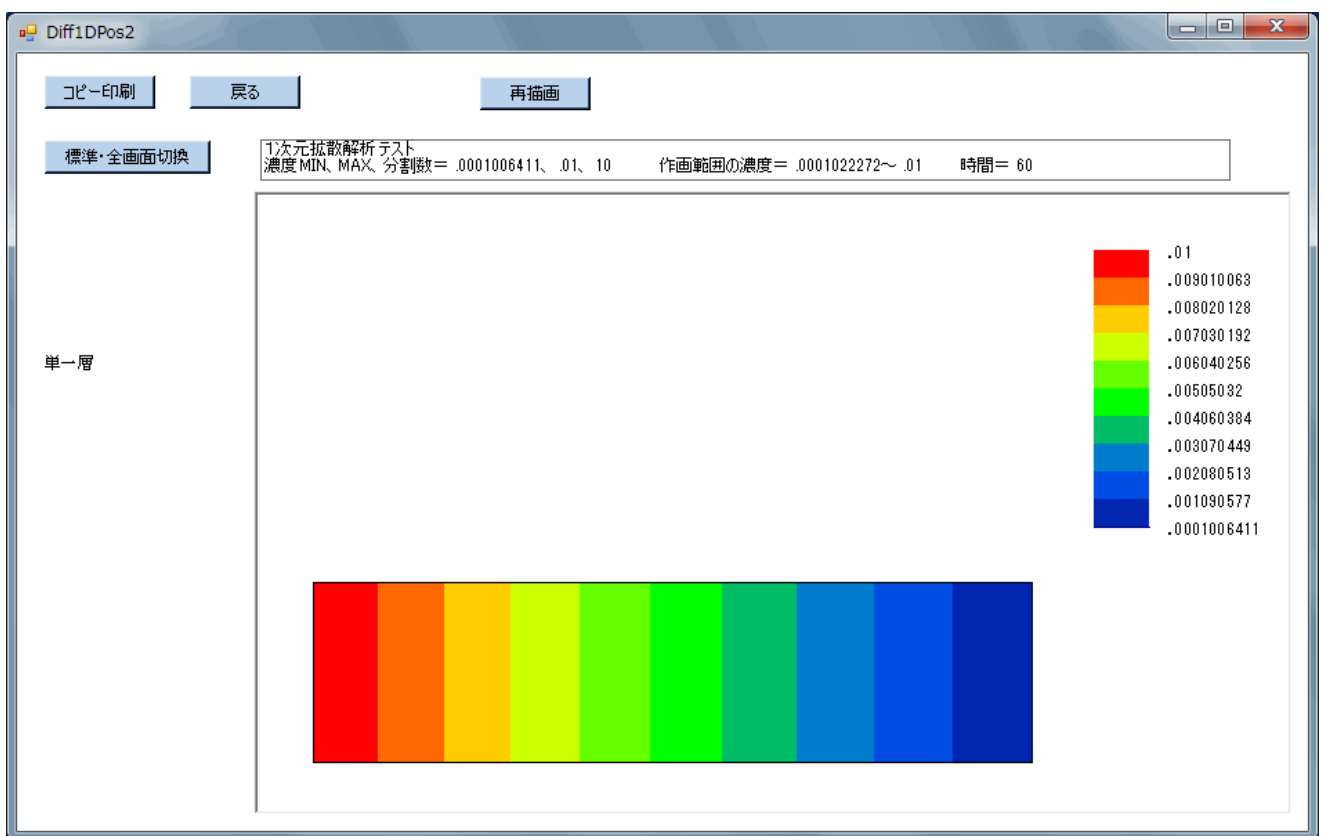


図6-9 等濃度線図の作画画面（非定常解析、ステップ数1の場合）

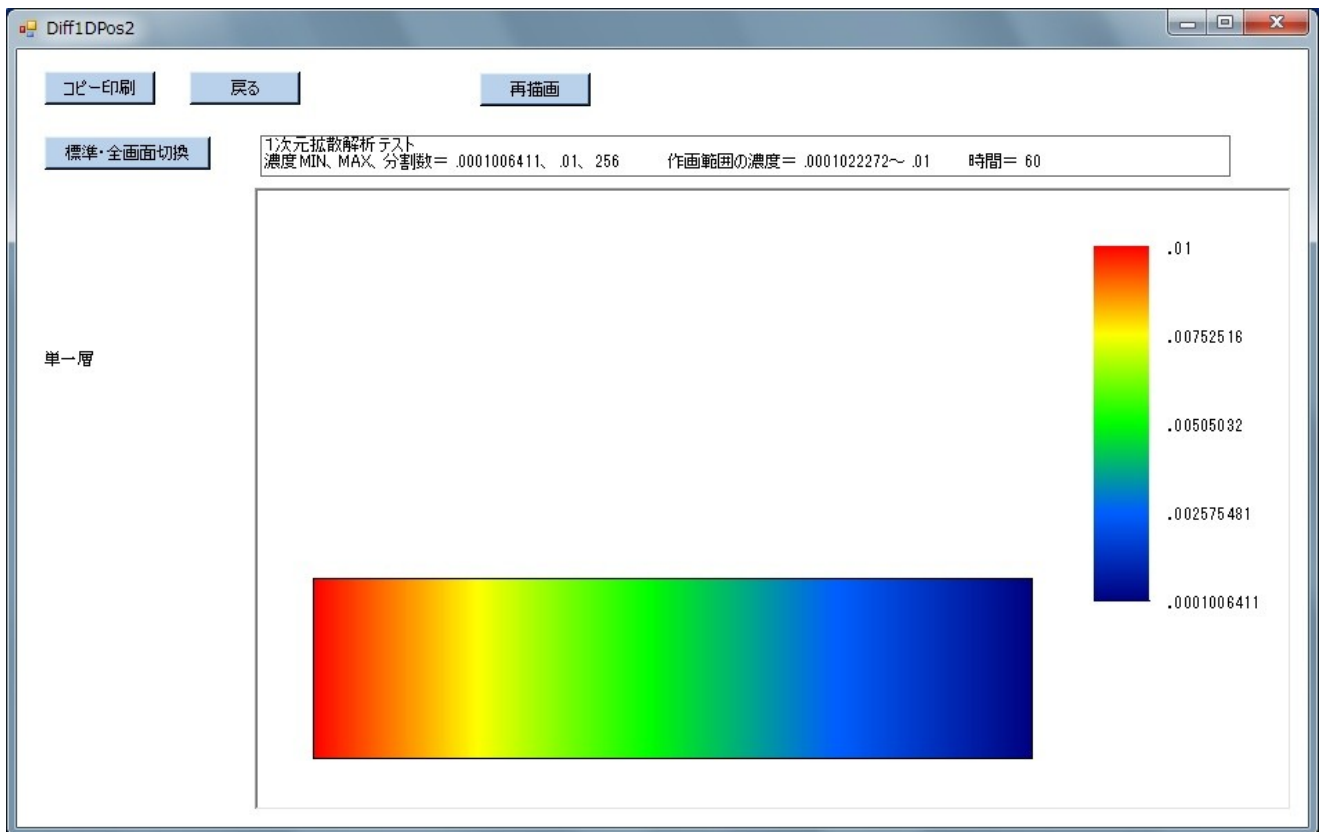


図6-10 等濃度線図の作画画面（グラデーション、非定常解析、ステップ数1の場合）

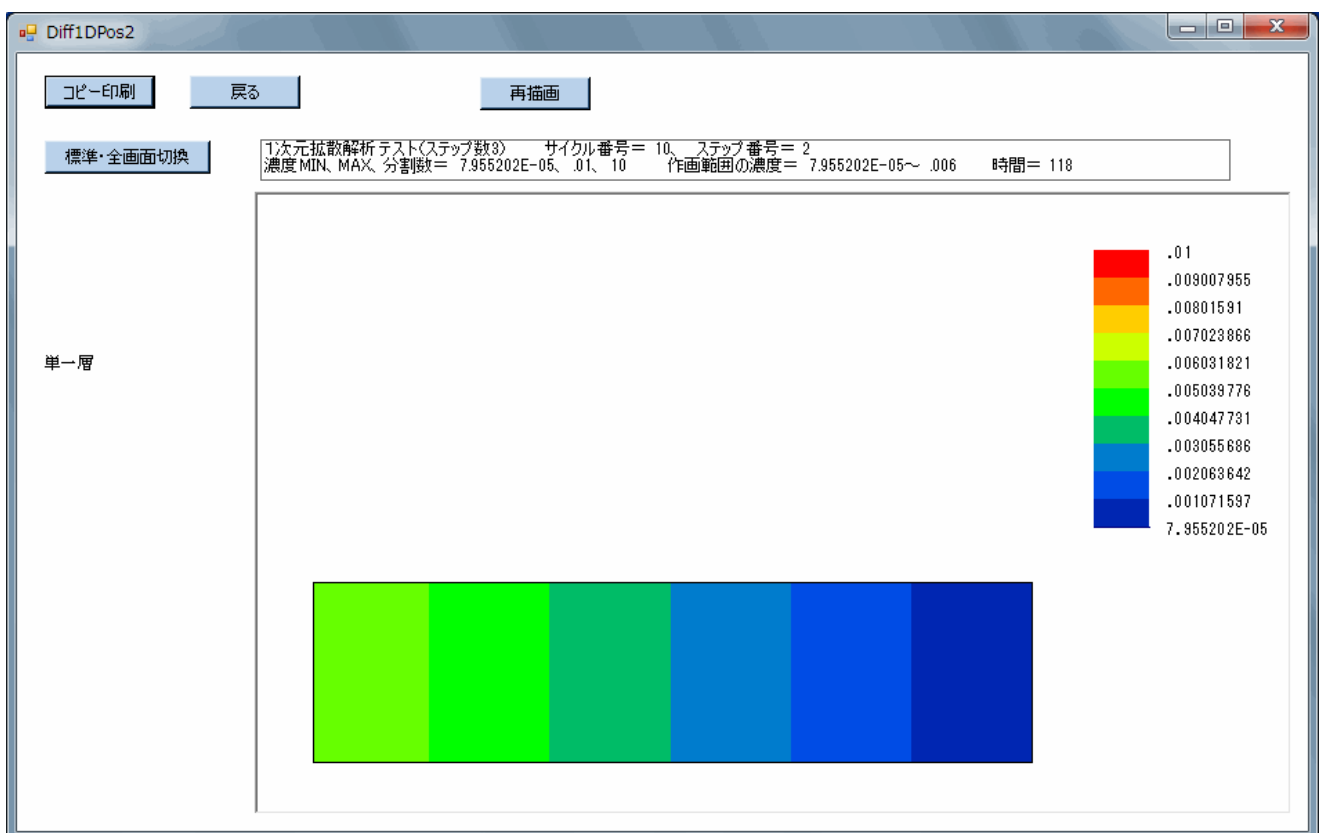


図6-11 等濃度線図の作画画面（非定常解析、ステップ数2以上の場合）

6.5 等濃度線図スライドショーの画面

図6-12にスライドショーの初期画面を示します。

- ①「スライド間の待ち時間」は、自動スライドの場合に、各スライド間の待ち時間を秒数で設定するものです。待ち時間を調整する必要がある場合は、適宜変更してください。

◇デフォルトの待ち時間は1秒となっています。

- ②「自動スタート」ボタンをクリックすると、自動スライドとなり、スライドショーが実演されます。

◇スライドショーが終了すると、図6-13の終了画面となります。同画面の終了確認ダイアログの「OK」ボタンをクリックすると自動スライドの完了となります。

- ③「次スライド」ボタンまたは「前スライド」ボタンをクリックすると、次または前の時間メッシュの等濃度線図が作画されます。

- ④「標準・全画面切換」ボタンをクリックすると、標準画面と全画面を切り換えることができます。また、画面Formの右下コーナー等をマウสดラッグすることにより、標準画面と全画面の間で自由に拡大・縮小できます。

- ⑤本画面で「コピー印刷」ボタンをクリックすると、プリンターで画面コピーを印刷できます。

- ⑥等濃度線図スライドを一括ファイル保存できます。まず、「保存ファイル設定」ボタンをクリックすると、図6-14のファイル保存コモンダイアログ画面が表示されます。同画面で任意のディレクトリーにjpgファイル名を設定してください。

◇上記の設定ファイル名は初期の等濃度線図に適用され、それ以降はベースファイル名に「_0001～」が順に自動付加されたファイル名になります。

- ⑦次に、「保存開始」ボタンをクリックすると、ファイル保存が実行されます。

- ⑧本画面を終了するには、「戻る」ボタンをクリックして、仕様設定画面に戻ります。また、もし等濃度線図の出来栄えに不満があれば、「戻る」ボタンで仕様設定画面に戻って仕様変更し、再度、等濃度線図スライドショーを実行できます。

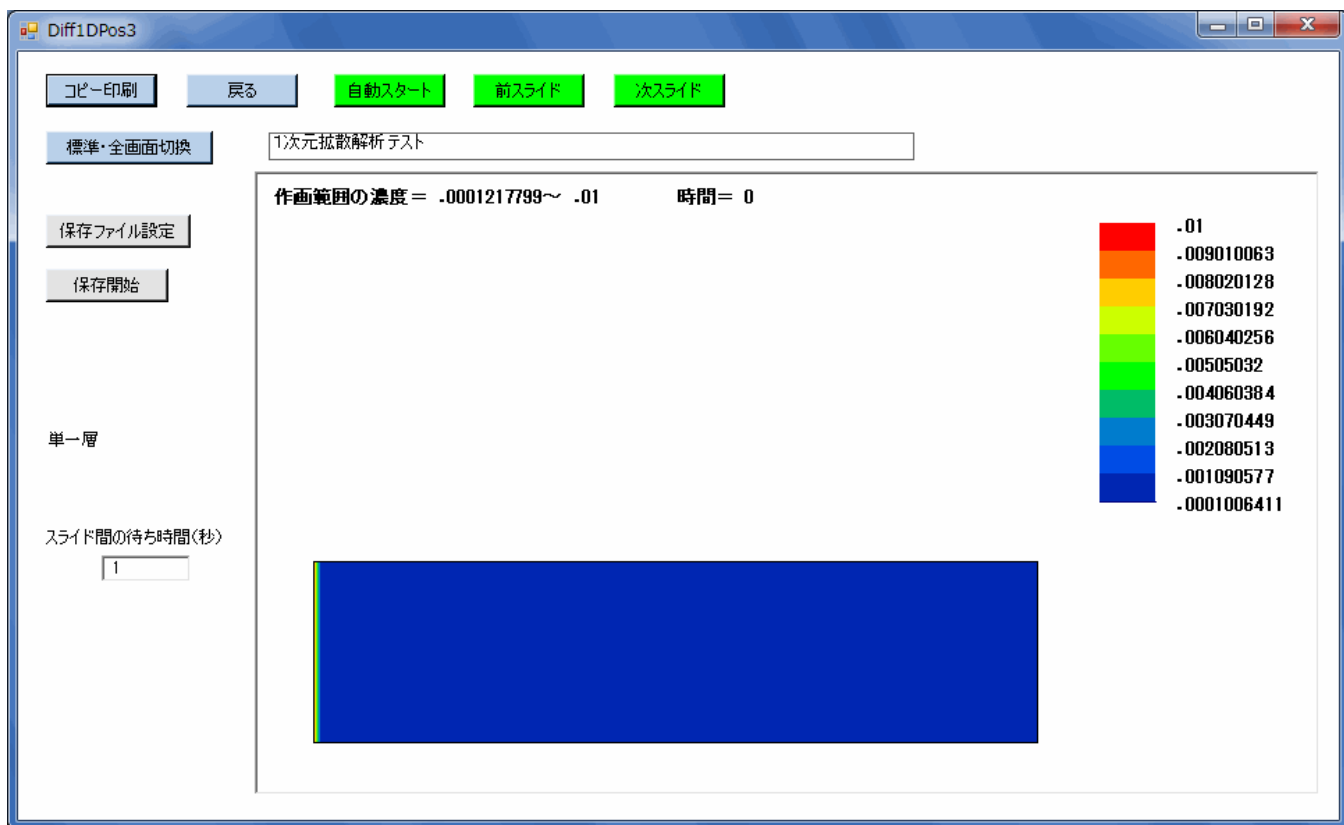


図6-12 等濃度線図スライドショーの初期画面

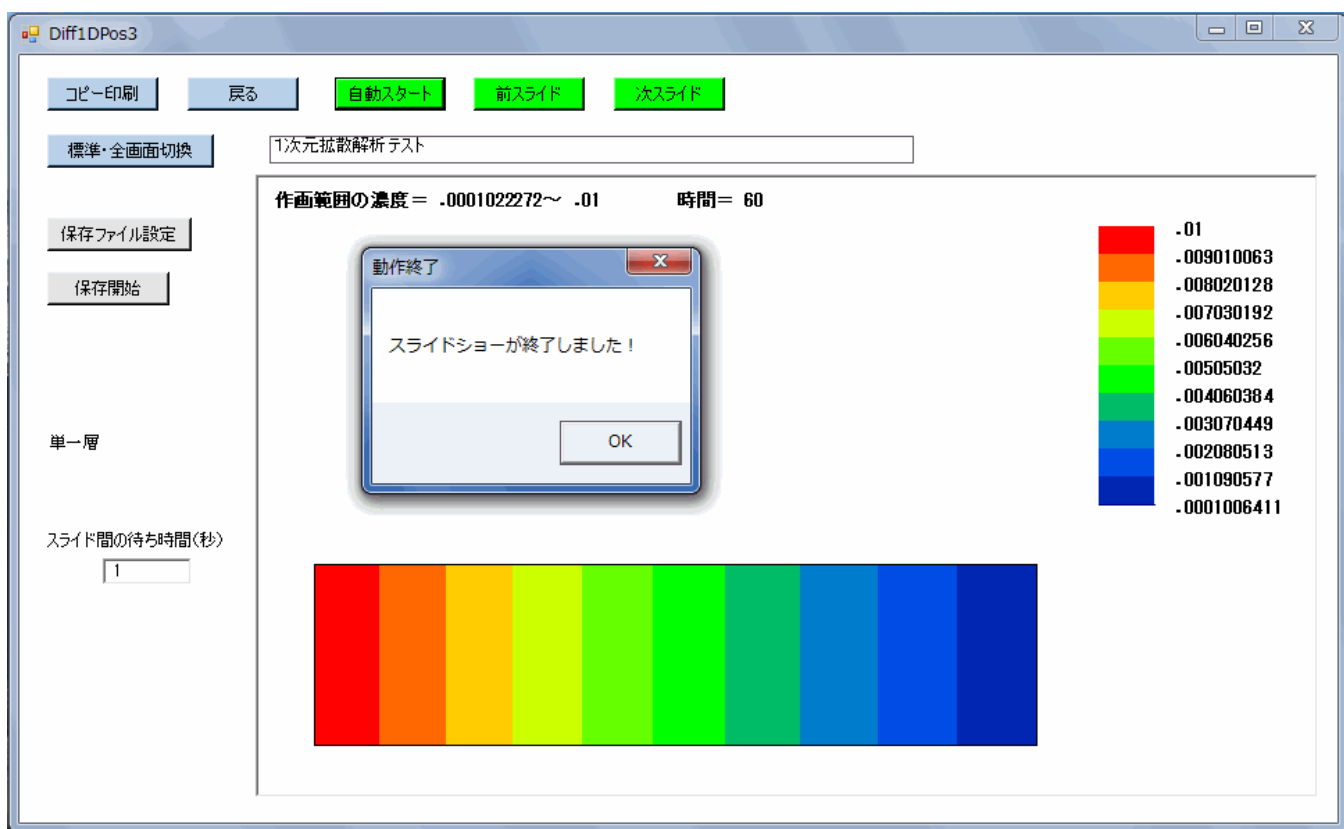


図6-13 等濃度線図スライドショーの終了画面

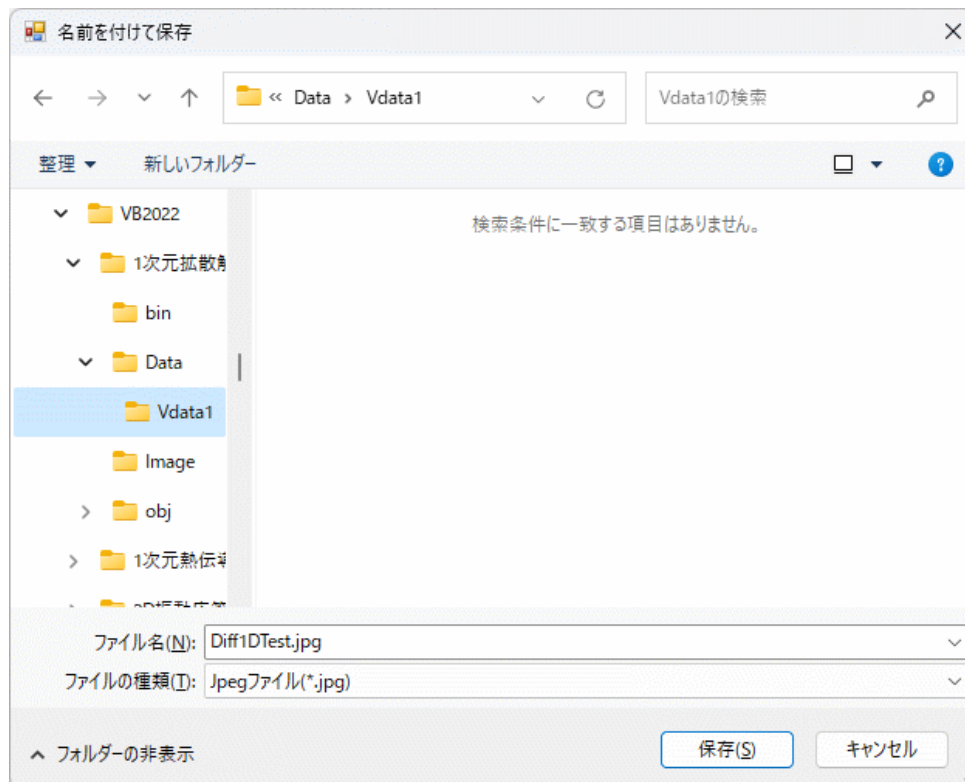


図6-14 ファイル保存コンモンダイアログ画面

6.6 解析結果の主要値表示

図6-15に主要値表示の画面を示します。主要値データをクリップボードにコピーするかどうかは、「はい」または「いいえ」をクリックします。その後は立ち上げ時のメニュー画面に戻ります。

◇クリップボードにコピーされたデータは、他のソフトで貼り付け利用できます。

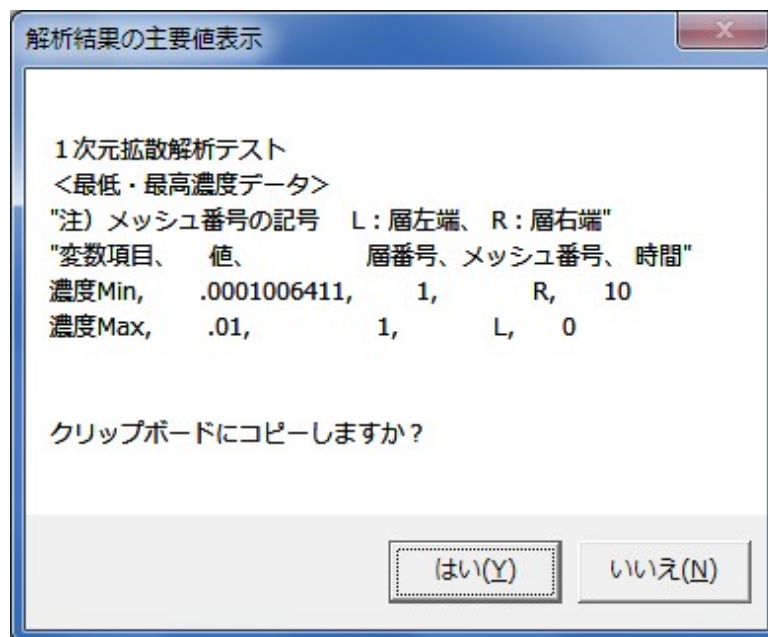


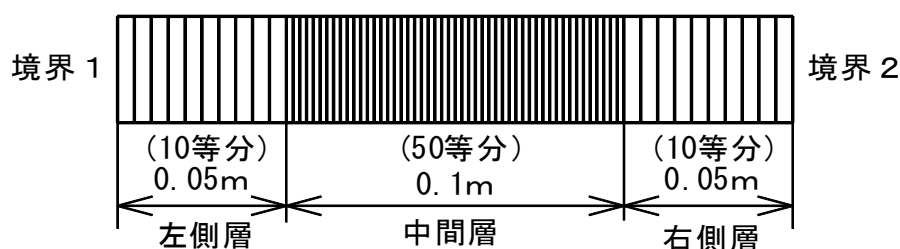
図6-15 解析結果の主要値表示の画面

第7章 多層拡散の計算例

多層拡散の一例として、3層構造の1次元拡散解析の計算例を紹介します。

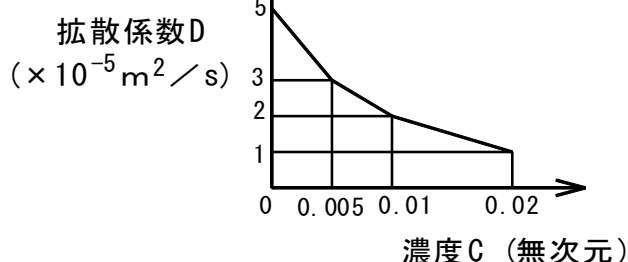
7.1 構造モデル

図7-1にモデル図を示します。同図のように、対象構造は3つの層から成ります。中間層は拡散係数が濃度依存の折れ線で与えられています。左側層と右側層は一定の拡散係数になっています。そして、両端境界は濃度伝達で異なる条件になっています。初期濃度は中間層のみが0.01です。さらに、同図のように、層の分割メッシュ数は、中間層層が50、両側の層がそれぞれ10とします。



[材料物性]

1) 中間層



2) 左側層 拡散係数 $1 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$

3) 右側層 拡散係数 $0.7 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$

[境界条件] 境界 1、境界 2 と同じ

外部濃度 0.0001、濃度伝達係数 2 m/s

[初期濃度]

中間層 0.01

左側層 0、右側層 0

図7-1 3層拡散の構造モデル

7.2 入力データ

図7-2に入力データファイルの内容を示します。

```

プログラム名, Diffusion1D
1次元3層の拡散解析テスト
層の数, 3
材料データ数, 3
境界条件のステップ数, 1
構造の幅（作画用）, .05
初期値データの有無, 1
各層の形状データ（層番号、材料番号、長さ、分割メッシュ数）
    1, 2, .05, 10
    2, 1, .1, 50
    3, 3, .05, 10
各材料の物性区分数（材料番号、区分数）
    1, 3
    2, 0
    3, 0
各材料の物性データ
材料番号, 1
    区分番号、濃度、拡散係数
    0, 0, 5E-05
    1, .05, 3E-05
    2, .1, 2E-05
    3, .2, 1E-05
材料番号, 2
    区分番号、濃度、拡散係数
    0, 0, .0001
材料番号, 3
    区分番号、濃度、拡散係数
    0, 0, 7E-05
両端境界のデータ
境界番号, 1
    ステップ番号、境界種類（0:不透過、1:濃度固定、2:濃度伝達、3:濃度流束）、各データ
    1, 2, .0001, 2
境界番号, 2
    ステップ番号、境界種類（0:不透過、1:濃度固定、2:濃度伝達、3:濃度流束）、各データ
    1, 2, .0001, 2

```

図7-2（1/2） 3層拡散構造の入力データファイル

初期濃度データ（メッシュ番号、濃度）

層番号, 1

1, 0
2, 0
3, 0
4, 0
5, 0
6, 0
7, 0
8, 0
9, 0
10, 0

層番号, 2

1, .01
2, .01
3, .01
4, .01
5, .01
6, .01
7, .01

.....

.....

44, .01
45, .01
46, .01
47, .01
48, .01
49, .01
50, .01

層番号, 3

1, 0
2, 0
3, 0
4, 0
5, 0
6, 0
7, 0
8, 0
9, 0
10, 0

図7-2（2/2）

3層拡散構造の入力データファイル

7.3 計算結果データ

図7-3に計算結果データファイルの内容を示します。同図で○印を付した数字の部分について補足説明します。

- ①計算打ち切り時間100s、出力時間メッシュ数10で計算しています。
- ②初期値が以下に出力されています。
- ③境界 1 の表面濃度は0.0000980です。
- ④層1の濃度が以下に出力されています。
- ⑤層1では初期濃度はすべて0となっています。

- ⑥層2の濃度が以下に出力されています。
- ⑦層2では初期濃度はすべて0.01となっています。
- ⑧層3の濃度が以下に出力されています。
- ⑨層3の初期濃度はすべて0となっています。
- ⑩境界 2 の表面濃度は0.0000986で、上記の境界 1 よりやや高いです。

- ⑪層間濃度が以下に出力されています。層1・2の間の方が層2・3の間よりも0.000867だけ低くなっています。
- ⑫途中出力は省略し、最終の時間100sの結果が以下に出力されています。
- ⑬境界 1 の表面濃度は0.000101で、外部濃度にほぼ等しいです。
- ⑭層1の濃度が以下に出力されています。各メッシュ点の濃度は0.000144～0.000870で初期の0.01より0.000986～0.000913低下しています。
- ⑮層2の濃度が以下に出力されています。メッシュ点の濃度は0.000932～0.001740です。

- ⑯層3の濃度が以下に出力されています。各メッシュ点の濃度は0.000161～0.001134で、上記層1に比べて最高濃度が0.000264高くなっています。
- ⑰境界 2 の表面濃度は0.000101で、上記層1と同じです。
- ⑱層間濃度が以下に出力されています。層1・2の間の方が層2・3の間より低いのは、初期値の場合と同じで、それら層間濃度の差は0.000272です。
- ⑲最低・最高濃度データが出力されています。
- ⑳所要計算時間は0 s でした。

```

<< 1次元拡散解析の計算結果>>
1次元3層の拡散解析テスト
[入力データファイル], C:\¥VB2022¥1次元拡散解析¥Data¥Diff1DTest3L.dat
解析種類 (0:定常、1:非定常), 1
計算打ち切り時間, 100, 出力時間メッシュ数, 10 ①
計算時間間隔の初期値, .001, 計算1回の濃度変化許容値, .0005
計算時間間隔の上限制約 (0:なし、1:有り), 0

-----
<時間メッシュ番号、時間>, 0, 0 ②
<境界番号、表面濃度>, 1, 9.803921E-05 ③
<層番号>, 1 ④
(メッシュ番号、濃度)
1, 0 ⑤
2, 0
3, 0
. . . . .
. . . . .
8, 0
9, 0
10, 0
<層番号>, 2 ⑥
(メッシュ番号、濃度)
1, .01 ⑦
2, .01
3, .01
. . . . .
. . . . .
48, .01
49, .01
50, .01
<層番号>, 3 ⑧
(メッシュ番号、濃度)
1, 0 ⑨
2, 0
3, 0
. . . . .
. . . . .
8, 0
9, 0
10, 0
<境界番号、表面濃度>, 2, 9.861933E-05 ⑩
<層間濃度> ⑪
層 1・2, .005348837
層 2・3, .006216216
. . . . .
. . . . .

```

図7-3 (1/3) 3層拡散構造の計算結果データファイル

<時間メッシュ番号、時間>, 10, 100	⑫
<境界番号、表面濃度>, 1, .0001008678	⑬
<層番号>, 1	⑭
(メッシュ番号、濃度)	
1, .0001442577	
2, .0002308376	
3, .0003168262	
4, .0004018352	
5, .0004854802	
6, .0005673834	
7, .0006471751	
8, .0007244942	
9, .0007989922	
10, .0008703319	
<層番号>, 2	⑮
(メッシュ番号、濃度)	
1, .0009316094	
2, .000985094	
3, .001037288	
4, .001088114	
5, .001137498	
6, .001185366	
7, .001231648	
8, .001276274	
9, .00131918	
10, .001360302	
11, .001399577	
12, .001436949	
13, .001472362	
14, .001505763	
15, .001537103	
16, .001566335	
17, .001593417	
18, .001618308	
19, .001640971	
20, .001661372	
21, .001679483	
22, .001695276	
23, .001708727	
24, .001719818	
25, .001728531	

図7-3 (2/3) 3層拡散構造の計算結果データファイル

26,	.001734856			
27,	.001738782			
28,	.001740304			
29,	.001739422			
30,	.001736135			
.				
.				
38,	.001624718			
39,	.00160047			
40,	.001574033			
41,	.001545444			
42,	.001514748			
43,	.001481989			
44,	.00144722			
45,	.001410488			
46,	.001371852			
47,	.001331368			
48,	.001289096			
49,	.0012451			
50,	.001199445			
<層番号>, 3				⑬
(メッシュ番号、濃度)				
1,	.001134042			
2,	.001043868			
3,	.0009476596			
4,	.0008460336			
5,	.0007396414			
6,	.0006291636			
7,	.000515307			
8,	.000398799			
9,	.0002803837			
10,	.0001608171			
<境界番号、表面濃度>, 2, .0001008397				⑭
<層間濃度>				⑮
層 1・2, .0009042617				
層 2・3, .001175822				

<最低・最高濃度データ>				⑯
注) メッシュ番号の記号 L: 層左端、R: 層右端				
変数項目、	値、	層番号、	メッシュ番号、	時間
濃度Min,	0,	1,	1,	0
濃度Max,	.01,	2,	1,	0
END	0h 0min 0s			⑰

図7-3 (3/3) 3層拡散構造の計算結果データファイル

7.4 等濃度線図

図7-4、7-5に等濃度線図を示します。図7-4は拡散時間10、図7-5は拡散時間50におけるもので、濃度の分割は0～0.01の10等分になっています。

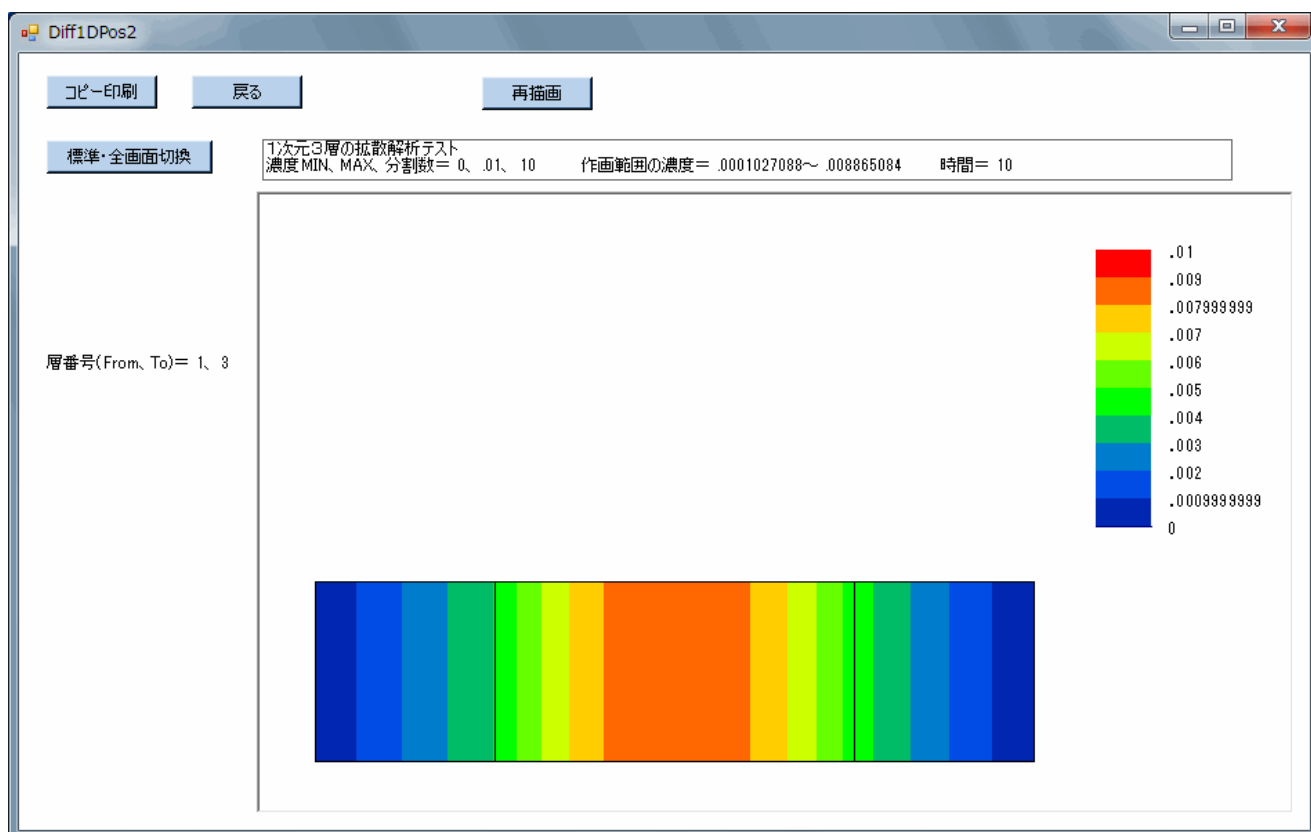


図7-4 3層拡散構造の等濃度線図（拡散時間10）

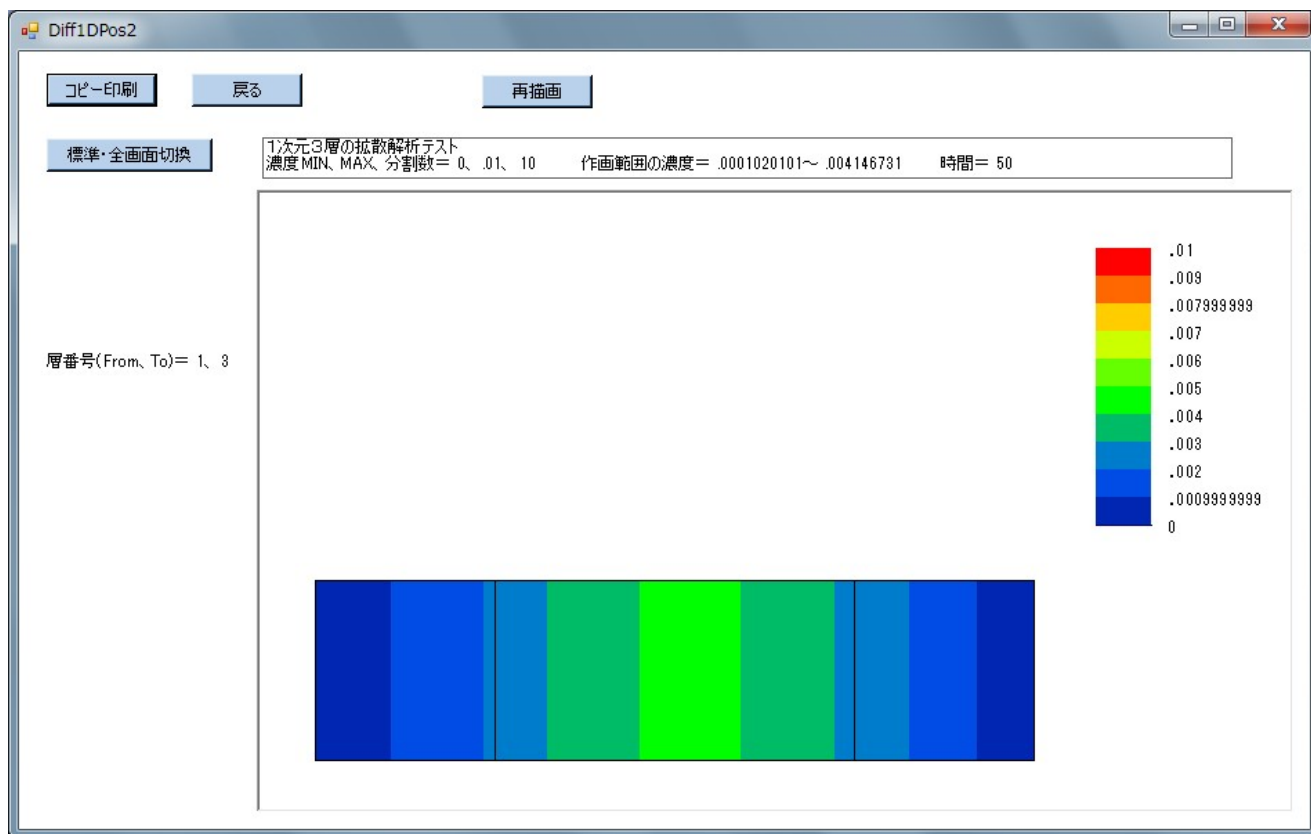


図7-5 3層拡散構造の等濃度線図（拡散時間50）

[参考文献]

<A> BASIC言語

- A1) 「Microsoft Visual Basic プログラミング ガイド」、
マイクロソフト (株)、1997
- A2) 「実力アップ Visual Basic.NET 基礎編」、川口 輝久、
(株) 技術評論社、2003
- A3) 「Visual Basic 応用プログラミング」、林 晴比古、
ソフトバンク (株)、1997
- A4) 「Visual Basic for Windows プログラミング・パーツ」、河西 朝雄、
(株) ナツメ社、1994
- A5) 「かんたんプログラミング Visual Basic.NET 応用編」、田中 亨、
(株) オーム社、2002
- A6) 「Visual Basic リファレンス・ブック」、相沢 文雄、
(株) ナツメ社、1994
- A7) 「プログラミング Visual Basic.Net Vol.2 活用編」、Francesco Balena、
(株) ドキュメントシステム 訳、日経BPソフトプレス、2002
- A8) 「Visual Basic 2005 [実践] プログラミングテクニック」、谷尻 かおり、
技術評論社、2007

 数値計算・統計解析・グラフィックス

- B1) 「数値計算プログラム BASIC」、J. ハイムーン 編、大矢 建正 訳、
(株) マグロウヒル好学社、1982
- B2) 「応用・BASIC (数値解析とその手法)」、対馬 勝英 他、
(株) パワー社、1981
- B3) 「パソコン BASIC 数値計算Ⅱ」、町田 東一 他、
東海大学出版会、1984
- B4) 「数学公式・数表ハンドブック」、スピーゲル 著、氏家 勝巳 訳、
マグロウヒル ブック (株)、1984
- B5) 「数値解析とその応用」、名取 亮、
コロナ社、1992
- B6) 「線形計算」、名取 亮、
朝倉書店、1993
- B7) 「Visual Basicによる工学計算プログラム」、黒田 英夫、
CQ出版社、2001
- B8) 「Visual Basicによる数値解析プログラム」、黒田 英夫、
CQ出版社、2002

<C> 有限要素法・差分法・工学一般

- C1) 「流体解析への有限要素法の応用」、J. J. Connor 他、奥村 敏恵 監訳、
サイエンス社、1981
- C2) 「コンピュータ 伝熱・凝固解析入門」、大中 逸雄、
丸善 (株)、1985
- C3) 「拡散と移動現象」、宝沢光紀他、化学工学会監修、
培風館、2010