製錬工学への連続体力学の応用

佐久田 博 司* 吉 沢 昭 宣**

1. 緒 言

近年, 実際の実験から得られた情報を意味づけるために, 統計パッケージによる因子分析, 回帰分析等, 計算機にたよる手法が一般的になってきている。

一方, これとは逆の方向からの計算機による数値解析, 特に数値計算による自然現象のシミュレーション(これを以下, 数値実験と呼ぶこととする)が, 各工学分野において市民権を得つつある。流れを含む系についても研究は数多く発表されている⁽⁴³⁾が, 計算機の中に実験装置を作るのに等しいともいえる数値実験を行なう理由は何であろうか。第1に, 対象となる系の解明がモデル実験では困難な場合—冶金プロセスは, 高温多相での反応も含まれる場合が多いのでこれにあたろう。第2に, 微視的な法則だけから系の挙動を組上げてみたい場合—理論の検証等に有効である。第3に, 異なった環境下の系の挙動を知りたい場合—無重力宇宙空間における現象の解析が可能になる, などの理由が主なものであろう。

製錬工学における連続体力学の占める役割もこの理由と切離すことはできない。つまり, 素過程として知られている, あるいは, 定式化されている事がらを実際の現象に適用する上で障害となっているのは, 一重に人間が到底扱い得ない現象の複雑さにあるからであり, 計算機の出現は, この障害を取除く(少なくとも軽減する)働きを持っているからである。

本資料では, まず, 製錬工学を対象とした連続体力学の基礎方程式系とその簡化を述べ, 3節で, 実際に製錬工学の分野に応用されている例を挙げ, 4節において数値計算における既往の手法, 特に製錬工学に適用可能と思われるものをいくつか提示したい。

2. 製錬を対象とした連続体力学の基礎方程式系

(1) 単相, 多成分系の場合

(i) 変化の方程式と状態方程式

単相, N 成分系で, 質量, 運動量, エネルギの収支を取って得られる微分方程式は, 変化の方程式と呼ばれており, おおのこの場の変化を表現したものである。この3本の方程式は,

(a) 質量変化の方程式(1成分では連続の式, 多成分では拡散方程式)

$$\partial \rho_i / \partial t = -\nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{J}_i + r_i \quad i=1, 2 \dots N \quad (1)$$

(b) 運動量変化の方程式(Navier-Stokes Equation)

$$\partial (\rho \mathbf{v}) / \partial t = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{F}$$

(c) エネルギ変化の方程式

$$\partial (\rho E) / \partial t = -\nabla \cdot (\rho E \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot (p \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}$$

ここで, 方程式の数は, $N+3+1=N+4$ 本で, 流束 $\mathbf{J}_i$, $\boldsymbol{\tau}$, $\mathbf{q}$, 外力場 $\mathbf{F}$, 反応速度 r_i が別に記述されるとすれば, 独立変数は $\rho_i (i=1, 2 \dots N)$ が N , $\mathbf{v}$ が 3, p , E で $N+5$ となり, 方程式が1本不足していることがわかる。ここで必要な残された方程式は状態方程式で, たとえば N 成分の理想気体では次のようになる。

$$p - RT \sum_{i=1}^N (\rho_i / M_i) = 0 \quad (2)$$

ただし

$$E = U + \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} / 2 \quad (3)$$

$$U = \rho T \sum_{i=1}^N (c_i \rho_i / M_i) / \sum_{i=1}^N (\rho_i / M_i) \quad (4)$$

(ii) 流束の表式(flux-force 関係式, 構成方程式)

次に流束がどう与えられるかを見よう。

(a) 質量流束

質量流束はその駆動力別に次のように書下せる。

$$\mathbf{J}_i = \mathbf{J}_i^{(c)} + \mathbf{J}_i^{(p)} + \mathbf{J}_i^{(e)} + \mathbf{J}_i^{(T)} \quad (5)$$

$\mathbf{J}_i^{(c)}$: 濃度勾配による流束 - 通常の拡散 (Fick's law)

$\mathbf{J}_i^{(p)}$: 圧力勾配による流束 - 遠心分離で有効

$\mathbf{J}_i^{(e)}$: 外力場による流束 - 電場におけるイオン

$\mathbf{J}_i^{(T)}$: 温度勾配による流束 - Soret effect

ここでは通常の拡散による流束以外は, 一般に値が小

* 東京大学大学院; 工学部金属工学科

** 東京大学助教授; 工学部金属工学科
Application of Continuum Mechanics to Metallurgy;
Hiroshi Sakuta, Akinori Yoshizawa (Faculty of Engineering, University of Tokyo, Tokyo)
1978年12月15日受理

さいので詳細を省略する。詳しくは文献(1)を参照されたい。通常の拡散による流束は便宜的に、

$$\mathbf{J}_i^{(s)} = -\rho \sum_{j=1}^N \mathcal{D}_{ij} \nabla (\rho_j / \rho) \quad (i=1, 2, \dots, N) \quad (6)$$

と書ける。ここで $\mathcal{D}_{ij}$ は、2成分系においては、 $\mathcal{D}_{ij} = \mathcal{D}_{ji}$ となり、実際に測定もされているが、3成分以上では一般に $\mathcal{D}_{ij} \neq \mathcal{D}_{ji}$ で、しかもそれは成分の分率の関数となるため、扱いは便宜的にならざるを得ない。

(b) 運動量流束

運動量流束は、流体の粘性によって生ずるものであり、粘性応力テンソル $\boldsymbol{\tau}$ を決定する方程式を通常、構成方程式と呼ぶ。たとえば、ニュートン流体では次のようになる。ただし、Stokes の近似では $\kappa=0$ である。

$$\boldsymbol{\tau} = -\mu (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) + ((2/3)\mu - \kappa) (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \quad (7)$$

他の非ニュートン流体、たとえば、ビンガム流体や、擬塑性流体については文献(1)を参照されたい。

(c) 熱 流 束

質量流束同様成因別に書けば次の通りである。

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}^{(e)} + \mathbf{q}^{(d)} + \mathbf{q}^{(s)} + \mathbf{q}^{(r)} \quad (8)$$

$\mathbf{q}^{(e)}$ は温度勾配による熱伝導であり、フーリエの法則に従うとすれば、次のように表現できる。

$$\mathbf{q}^{(e)} = -k \nabla T \quad (9)$$

純物質では、この項のみが意味を持つ。

$\mathbf{q}^{(d)}$ は各成分の相互拡散によるものである。

$$\mathbf{q}^{(d)} = \sum_{i=1}^N \bar{H}_i \mathbf{J}_i \quad (10)$$

$\mathbf{q}^{(s)}$ は濃度勾配による流束で、Soret 効果と対をなす Dufour 効果によるものであり、通常 $\mathbf{q}$ に大きな影響を及ぼさない⁽²⁾。

$$\mathbf{q}^{(s)} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, i \neq j}^N \mathcal{D}_{ij}^{(s)} (\mathbf{J}_i - \mathbf{J}_j) \quad (11)$$

輻射エネルギーの流束 $\mathbf{q}^{(r)}$ は、透明な相を通す場合はステファーン・ボルツマン則に従う。それは、反射の効果を考慮すれば Energy 式の境界条件とするだけですむ。不透明な、つまりフォトンの生成消滅のある相では、それが内部エネルギーの増加減少を引起こすため、 $\mathbf{q}^{(r)}$ とエネルギー吸収効率の関係式が必要となる⁽¹⁾。

$$\mathbf{q}^{(r)} = \sigma T^4 \quad (12)$$

(iii) 外 力 場

通常は、重力場のみであるが、電磁力が作用する場合には、電磁場を考慮せねばならない。

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_m \quad (13)$$

$$\mathbf{F}_g = \sum_{i=1}^N \rho_i \mathbf{g}_i \quad (14)$$

電磁場は、次の Maxwell の方程式を場の方程式に加えて解く必要がある。ただし、これらは座標系の相対運動 $\mathbf{v}$ の絶対値が光速より十分小さい場合である。

$$\mathbf{F}_m = i \times \mathbf{B} \quad (15)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t \text{ (Faraday's law)} \quad (16)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{i} + \partial \mathbf{D} / \partial t \text{ (Ampere's law)} \quad (17)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}' - \mathbf{v} \times \mathbf{B}' \quad (18)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}' + \mathbf{v} \times \mathbf{D}' \quad (19)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (20)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_e \quad (21)$$

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (22)$$

$$\mathbf{i} = \kappa_e \mathbf{E} \quad (23)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (24)$$

しかし、通常は、(18) (19) 各右辺第2項は、製錬工学の範囲においては $|\mathbf{v}|$ が比較的小なので無視し

$$\kappa_e \mathbf{E}' \approx \mathbf{i}, \quad \mathbf{E}' \approx \mathbf{E} \quad (25)$$

$$\mathbf{B} \approx \mu_0 \mathbf{H}', \quad \mathbf{H}' \approx \mathbf{H} \quad (26)$$

とし、(1)~(4)の場の方程式と切離し、 $\mathbf{E}, \mathbf{H}$ について独立に解き $\mathbf{F}_m$ を決めて変化の方程式に代入するのが普通である。

(2) 多相, 多成分系

(1)では1相の場合についてのみ記したが、多相系にはどう拡張したらよいかを考えよう。

各相については、(1)の各方程式をそのまま用いてよいが、相間の相互作用が、境界条件として方程式系に導入されなければならない。たとえば、エネルギー方程式における界面での熱伝達、運動方程式における、外圧、界面張力、界面の応力などがそれに相当する。

(3) 方程式の簡単化(運動方程式の実用的変形)

実際には以上の方程式系をそのまま解くのは非常に困難なので、各方程式を対象に応じて扱い易い様に変形して使うのであるが、特に、非圧縮性($\rho = \text{一定}$)の2次元流れにおいては、変数の数を減らすため、常套手段として、流れ関数 Ψ と渦度 w を使って連続の式と運動方程式を変形することが行なわれる。直交座標で書くと、

$$u = \partial \Psi / \partial y, \quad v = -\partial \Psi / \partial x \quad (27)$$

$$w = (\nabla \times \mathbf{v})_z = \partial v / \partial x - \partial u / \partial y \quad (28)$$

となり、したがって Ψ と w の関係は

$$w = -(\partial^2 \Psi / \partial x^2 + \partial^2 \Psi / \partial y^2) \quad (29)$$

となる。連続の式は(27)によって自動的に満足されているので、運動方程式を書きかえると次のようになる。

$$\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial y} = \nu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) \quad (30)$$

ここで流体はニュートン流体(粘度一定)としている。

(29), (30)を連立させて解けば、(1), (2)を直接扱うよりはるかに楽なので報告も多い。圧力 p と外力 $\mathbf{F}$ の扱いは、 $\mathbf{F}$ が時間に依存しないポテンシャル力である限り、 $\mathbf{F} = -\nabla \Phi$ として圧力を一般化し

$$p' = (p/\rho) + \Phi \quad (31)$$

運動方程式の divergence をとって

$$\nabla^2 p' = 2 \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial y} \right)^2 - 2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (32)$$

の p' に関するポアソン方程式をすでに求められた Ψ と、 p' の境界条件から解けばよい。

(4) 境界条件と平均化

以上、(1)から(32)を対象に応じて取捨選択し、無視できる項を落として単純化し、適当な境界条件を付けければ現象の定式化は終了したことになる。後は、解析的に解くか、あるいは数値的に解くかの作業が待つばかりである。

しかし、これはあくまでも「きれい」な系についての話である。微視的に解くことが何の意味もなく、平均的な物理量しか興味、あるいは測定の対象にならないような系、たとえば充填層中の流れ、気泡を大量に含む反応器内の物質の挙動、乱流などについては、局所的瞬間的にすべての場の変数の解が、たとえ得られても、それにはほとんど意味がない。

そのような「きれい」でない系をどう考えたらよいのか。その例として、乱流の問題と、充填層の問題を取上げてみよう。両者は現象としては全く異なったものではあるが、われわれがそれらに対して講じる対策は、見かけは全く異なるが、発想の上では同一のものであるといえよう。

(i) 乱 流

Re 数が数千以上になると、慣性項が粘性項を凌駕し、いわゆる乱流状態になる。生成する渦粒子(eddy)は、最小のものでも数十 μm であり、分子の直径($<1\text{ nm}$)、平均自由行程($<500\text{ nm}$: ガス)よりはるかに大きい。したがって、前述の方程式系は、すべて、局所平衡仮説の上に成り立つはずである。しかし、通常、われわれに興味があるのは、統計量としての時間平均値、空間平均値、である。そこで、各変数を、平均値とそのまわりの変動量の和で表現することを考える。ところが、このように定義した変数を、たとえば運動方程式に代入すると、方程式の非線型性のために、みかけの流束が生じてしまう。Reynolds 応力と呼ばれるものがそれである。そこで、この2次の変動成分に関する方程式を書下すと、その方程式中に3次の項が現れる。3次の項を知るためには4次の項が必要となるという風に、つぎつぎに無限に続く方程式系が生じてしまう。これは Friedman Keller's system と呼ばれ、実際の問題に対しては、どこかで系を閉じなくてはならない(完結問題)。したがって、乱流における特性値を知るためには、何らかの工学的手法によって完結問題を解く必要がある。

現在までのところ、その解決方法が多数報告されているにもかかわらず、未だ十分現象を解明したとはいえないが、一般には、次のような手続きをとっている。

まず、運動方程式において、 $\mathbf{v}$ を平均値 $\bar{\mathbf{v}}$ におきかえる。そこで生じるはずの乱流による2次以上の項をす

べて、粘性応力中の粘性係数に負わせる。つまり μ_e : 有効粘性係数、 μ_m : 分子粘性係数、 μ_t : 乱流粘性係数とすれば次のようになる。

$$\mu_e = \mu_m + \mu_t \quad (33)$$

μ_t を決定する方法が Kolmogorov 以来、数多く提唱されてきた⁽³⁾。特に、計算機の出現、発展と共にこの種の手法の研究が進んだことには大きな意味がある。ここでは Spalding の Two-Equation-Model (TEM) と呼ばれる方法を紹介しよう⁽⁴⁾。これは Prandtl の発想による乱流粘性係数と分子粘性係数のアナロジーによって、平均自由行程に対応する Mixing Length という考え方が基になっている。

μ_t を次のように乱流エネルギー K と乱流特性値 W によって表わす。

$$\mu_t = \rho K / W^{1/2} \quad (34)$$

K, W は次の2式を満足する。

$$\rho DK / Dt = \nabla \cdot [(\mu_t / \sigma_K) \nabla K] + S_K \quad (35)$$

$$\rho DW / Dt = \nabla \cdot [(\mu_t / \sigma_W) \nabla W] + S_W \quad (36)$$

ここで

$$S_K = G - N$$

$$G = \mu_t (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i) \cdot \partial u_j / \partial x_i \quad (37)$$

$$N = C_D \rho K W^{1/2} \quad (38)$$

$$S_W = C_1 \mu_t (\nabla \omega)^2 + C_3 (W/K) G - C_2 \rho W^{3/2} \quad (39)$$

ただし、 ω は各点の渦度の絶対値である。

これらの式に含まれる定数は Spalding によって次のような値が推奨されている⁽³⁾。

$$C_D = 0.09, C_1 = 3.5, C_2 = 0.17, C_3 = 1.04$$

$$\sigma_K = 0.9, \sigma_W = 0.9 \quad (40)$$

また、乱流拡散係数 $\mathcal{D}_i$ は、 K, W によって次式で与えられる⁽⁵⁾。

$$\mathcal{D}_i = K / W^{1/2} \quad (41)$$

(ii) 充 填 層

一般に、多孔質固体中の $\mathbf{v}$ と p とには Darcy 則が成立する。

$$-\nabla p = \mathbf{K} \cdot \mathbf{v} \quad (42)$$

ここで $\mathbf{K}$ は2階のテンソルであり、概念的には透過度を意味している。Ergun には1次元の充填層について具体的な $\mathbf{K}$ の関数形を近似的に与えた⁽¹⁾。

$$K_{xx} = \frac{150\mu}{D_p^2} \cdot \frac{(1-\epsilon)^2}{\epsilon^3} + \frac{1.75\rho|\mathbf{v}|}{D_p} \cdot \frac{(1-\epsilon)}{\epsilon^3} \quad (43)$$

これを3次元に拡張すると、等方的な充填層については非対角要素が0となり(44)の如く表わせる。

$$\mathbf{K} = K_{xx} \mathbf{I} \quad (44)$$

これで、運動量の場に関して(2)にかかわって平均値 $\bar{\mathbf{v}}$ を与える式が得られたことになる。しかし、非等方的な媒体についての一般的な $\mathbf{K}$ の関数形の決定法は未だ知られていない。

3. 製錬工学における連続体力学的应用

冶金プロセスへの連続体力学の適用は、現象の定式化が容易でないことや、相似則が簡単に適用できず、モデル実験が困難であることなどに制約されながらも徐々に進んできた。しかし、全体としては、まだ量的に小さい仕事しか行われていなくて、以下に述べる2方面しか見るべきものが無い現状である。

(1) 電磁場中の熔融金属⁽²¹⁾

電磁場中におかれた熔融金属については、場の方程式が明確に定義できるため、Szekely らによって解析がはじめられている^{(6)~(18)}。Szekely らの扱った冶金プロセスは、ASEA-SKF 炉、ESR 法、連続铸造、誘導炉等であるが、いずれも主に次のような条件のモデルによって行っている。

- (i) 運動方程式は、軸対称円筒座標系(2次元)で非圧縮性とし、自然対流は、熱、密度とも、Boussinesq 近似を用い $\Psi-w$ 系に書き直して使う。
- (ii) 有効粘性係数は、分子粘性係数と、乱流粘性係数の和として定義する。乱流粘性係数は TEM によって決定する。
- (iii) エネルギー方程式は、顕熱のみを考慮し、温度に関する方程式に書きかえる。
- (iv) 電磁場は、流れから独立とし、運動方程式の外力項に、決定済みの電磁力を入れる。

以上によって行った、計算による諸物理量の予測値と、ASEA-SKF 実験炉の測定値との比較がなされており、磁束密度、浴の最大流速、トレーサー濃度等で良い一致が見られる。

熔融金属の流れの問題では、外に、気泡による浴の流動混合について、やはり Szekely らによって、コードモデルと計算予測値との比較の報告がある⁽¹⁹⁾⁽²⁰⁾。

(2) 充填層内流れ⁽³⁶⁾

高炉内通気性の研究は、充填層の問題として興味深い。炉外からの観測、たとえば、炉頂部のガス流れの測定のみで、炉内のガス流通状況を推定することは妥当でないと判断されるので⁽³⁷⁾、数値実験によるその予測は重要である。

多くの研究は、次のような条件で基礎方程式を立て数値計算を行っている。

- (i) 充填層からの反作用を考慮しないため、運動量の保存式(1)が使えない。そこで、2次元 Ergun 式(43)を代用する。
- (ii) 流れ関数を使い、変数を減らす。流れは非圧縮性、圧縮性、両方を考慮する。
- (iii) 熱収支も考慮する場合は、エネルギー式を固体

との熱伝達を含む顕熱に関するものを書きかえる。

実高炉の境界条件で不均一な空間率を持つ場合の計算によると、(ii)は、圧力に関する計算を行う場合のみ圧縮性を考慮せねばならないことが報告されている⁽²⁹⁾。

また、八木らは、反応速度式を上条件と連立させて、熱、流れの同時解析を行っている^{(33)~(35)}。

さらに、以降は、融着性、固体粒子の運動と通気性を組み合わせるなどの方向で、研究が進むことが期待される。

4. 流れの数値解析における既往の研究 (主に製錬工学に应用可能と思われるものを対象として)

(1) MAC 法とその後継プログラム⁽⁴⁸⁾

流れの数値解析は、数々の先駆的な研究の上に、Los Alamos の Harlow と Fromm らが、1963 年以降、流れの数値実験と呼ぶにふさわしい多数の研究(Karman 渦、水門から流出するサージ波、密度流等)^{(45)(50)~(58)}を著わしてから一般的なものとなった。特に彼らの開発した Marker-And-Cell 法(MAC 法)と呼ばれる手法は、必要な記憶容量が莫大であること、したがって計算時間も長くなることを除けば、非圧縮性の自由表面を持つ流れ系の解析に力を発揮した。

非圧縮性であることを利用して運動方程式を圧力 p に関するポアソン型偏微分方程式に変形し、各時刻において、その式を逐次加速緩和法によって解くというのがその原理である。収束の判定は $|\nabla \cdot \mathbf{v}| \leq \epsilon$ によって行なう⁽⁴⁵⁾。

MAC 法ではエネルギー方程式を解いていないので自然対流を扱うことができない。そこで Boussinesq 近似項を運動方程式に加えて解く方法が採られている⁽⁵⁷⁾。したがって自然対流による効果が大きい場合には計算が収束しなくなるが、強制対流支配下ならば拡散方程式を計算された速度場に從属的に解くことで十分実用になる⁽⁴³⁾⁽⁵⁹⁾。

2 相界面の移動は、流体中に散りばめた Marker の運動によって、計算に追従して行われるが、格子の分解能との比較からいっても、気液相界面における物質移動などを定量的に論じるのは無理なようである。

図 1 は Bubble の変形上昇、図 2 は Karman 渦列の生成のシミュレーションである⁽⁴⁵⁾。

Los Alamos グループによる MAC 法以降の一連の研究はシミュレーションの可視化(コンピュータグラフィックス)の手法においても優れたものを残したが⁽⁴⁵⁾、定量的な議論に欠ける点があった。しかし、1974 年、Rivard らによって、反応性流体を扱った RICE プログラムが発表された⁽⁴⁴⁾。

図1 2次元気泡の上昇
(MAC法による)⁽⁴⁵⁾.

図2 自由表面下のカルマン渦列
(MAC法による)⁽⁴⁵⁾.

RICE プログラムは、HF 化学レーザー開発のため作られたものであるが、汎用性に富み、反応を含んだ流れについても数値計算シミュレーションが有効であることを示した初めての研究である。

その中で仮定された条件は、円筒軸対称2次元のニュートン流体で、反応速度はアレニウス型を用い、(1)～(3)を直接連立させて解いている。

連立偏微分方程式を解く一般的な手法は未だ公開されていないが、その萌芽ともいべきものをここにみる事ができる⁽⁶⁰⁾⁽⁶¹⁾。

(2) TOMCAT 法とその改良

流れの問題を扱うときには、境界層に着目する場合が多い。製錬でも、多相の場合が多く、相間の熱物質移動を議論するには、境界層の問題を避けることができない。しかし、差分法の範囲で任意形状の境界を扱うには、MAC 法流の処理しか考えられないし、境界層厚みが、格子の分解能以下であるような場合も通常の差分化手続きでは扱い得ない。これらの問題は、主に空間を等方的に分割し、変数を割り付けたことによるものである。もし仮に、境界にびったり密着し、しかも局所的に分割の密度を変えて格子を切ることができれば理想的である。

NASA において開発された TOMCAT プログラム

は、正にそうした問題を解決するためのものである⁽⁴⁶⁾。図3のような、複雑な形状の障害物のまわりに格子を、任意に切ることを考える。この全領域は、位相同型に、長方形領域に変換されるが、各格子点におけるヤコビアンさえ定義されていればそれは容易である。長方形領域で得られた解を逆写像によって元の領域に戻せば求める解が得られるのである。座標変換は両座標変数のポアソン方程式を数値的に解くことによって行われる。解析的な等角写像に対して、TOMCAT 法は数値的な写像変換であるといえよう。

図3 ルツボ回りの格子
(TOMCAT法による)⁽⁴⁶⁾

また、ポアソン方程式の湧き出し項によって局所的に格子の密度を変えることが可能であることも大きな利点となっている。しかし、翼型の周囲の流れを解くべく開発されたため、格子点の密度が反応器などでは局所的に低くなり過ぎることが欠点であったが、筆者らによる、Hybrid Tomcat 法がそれを解決した⁽⁶²⁾。図4は同方法によって長いチャネル中におかれた円柱のまわりの流れを解いた一例である。

TOMCAT 法は、変形移動する境界をもつ冶金プロセ

図4 2次元チャネル中の円柱回りの流れ
(HYBRID-TOMCAT法による)⁽⁶²⁾.

ス, たとえば, 凝固界面や, 気液相境界等に適用すればその効果が期待できよう。

(3) 安定性その他

微分方程式の数値解を求めようとするとき常に問題となるのは, 解の安定性である。定係数常微分方程式についての Von Neumann による, フーリエ級数による解析以来多くの研究が行われているが, 一般の非線型連立偏微分方程式については, Hirt による「発見的安定性理論」以外には有力なものがない⁽⁴⁹⁾。

方程式の差分化に伴って, 諸物理量の正および負の擬拡散という現象が起きることが知られている。これは, 場を離散化したために, 主として変化の激しい場所での物理量の勾配 (1 階微分) に大きな打ち切誤差を生ずるためである。勾配を流れの向きによって定義する (上流差分)⁽⁵⁷⁾ ことが安定化対策としては有効であるが, 擬拡散によるみかけの拡散係数が大きくなり, 場を「ならし」過ぎ, Karman 渦などの非線型現象を作り出せなくなるという欠点がある。

乱流については, Spalding 流の方法以外に Deadroff の Subgrid-scale (SGS) モデルによって乱流の直接解を求める試みが注目される⁽⁴⁷⁾。

有限要素法を, 流体に適用した報告が多くなってきたが, ここでは, 最近の概説書に譲ることとする⁽⁶³⁾。

5. 展 望

3 節で述べたように, 現在のところ, 連続体力学的アプローチは, 製錬工学の分野においては, 未だ限られた範囲でしか報告されていない。しかし, 以下に述べるような理由によって, その範囲は拡大していくと考えられる。

(1) 解析の手段として有力。たとえば, 比較的単純な流れと拡散を解いておいて, 簡単な実験との比較から未知の拡散係数を定めるとか, 少数個の気泡について気泡の相互作用を含めて解いて実際の気泡塔の解析に応用するなど。

(2) 設計の手段として有力。基礎式の成り立つ限り常温の小さい系で正しい数値実験結果が得られるプログラムは, 寸法や物性値がどう変化しても正しい結果を与えるはずである。

この方向の研究が進んでいる航空力学分野では, 風洞はいずれ数値実験のチェックの装置と化すであろうとさえ言われている。

しかし, 製錬プロセスの本質は複雑で連続体力学の適用は, 数値手法の面で研究成果が蓄積され見通しが明るいとはいえ Richardson の夢 (1922 年数値天気予報の可能性を提唱した) のように甘いものでないことは確かである。

6. 結 言

連続体力学は工学の各分野においてさまざまな姿をとって現れている。たとえば伝熱工学であるとか, 水理学であるとかいった個別の名称を与えられて研究されてきた。しかし, それらはすべて, 本稿で述べたような, 輸送現象論 (Transport Phenomena) としてまとめらるべきものである。また, 基礎的な概念の上に議論を展開する道具として連続体力学の果たす役割は今後一層重くなると思われる。

5 節でも述べたように, 連続体力学の製錬工学への応用はその緒に着いたばかりである。今までこの方面の研究が進まなかった理由としては, 方程式系の複雑さと, 境界条件の設定のむづかしさが挙げられよう。しかし, 近年の大型計算機のハードウェア面での発展と, そのソフトウェアの開発の進歩をみれば, 数値解析の面でこの分野の進むべき未来は開けたものであることが予想できよう。

本稿は, 方程式系の展開と数値計算の手法の紹介が主になって, 応用面での既往の研究の解説の比重が小さくなってしまったが, これは, 手を染めた研究者がまだ少ないということでお許し頂きたい。

〔記 号〕

B, B'	: 磁束密度	[M/ct ²]
c_i	: i 成分の比熱	[L ² /Tt ²]
$\mathcal{D}_{ij}$	: i - j 系における拡散係数	[L ² /t]
$\mathcal{D}_{ij}^{(x)}$	: Dufour 効果による拡散係数	[L ² /t ²]
$\mathcal{D}_t$	: 乱流拡散係数	[L ² /t]
D, D'	: 電束密度	[c/L ²]
D_p	: 粒子径	[L]
E	: 流体の全エネルギー	[L ² /t ²]
E, E'	: 絶対および相対電場	[ML/ct ²]
F, F_g, F_m	: 全, 重力, 磁場体積力	[ML/t ²]
g	: 重力加速度	[L/t ²]
$\bar{H}$	: エンタルピー	[L ² /t ²]
H, H'	: 磁気場ベクトル	[c/Lt]
i	: 電流ベクトル	[c/L ² t]
I	: 単位行列	[−]
K	: 乱流の変動成分の運動エネルギー	[L ² /t ²]
K	: 透過度テンソル	[ML ³ /t]
k	: 熱伝導度	[ML/t ³ t]
M_i	: i 成分の分子量	[M/mol]
N	: 成分の数	[−]
p, p'	: 圧力	[M/Lt ²]
$q, q^{(c)}, q^{(d)}, q^{(x)}, q^{(r)}$	: 熱流束	[M/t ³]
r_i	: 反応速度	[M/L ³ t]
R	: 気体定数	[ML ² /t ² mol T]
t	: 時間	[t]
T	: 温度	[T]

u, v	: x 方向, y 方向の流 体速度	[L/t]
U	: 内部エネルギー	[L ² /t ²]
v	: 流体速度ベクトル	[L/t]
w	: 渦度	[1/t]
W	: 乱流特性値	[1/t ²]
ε	: 空隙率	[—]
ε_0	: 誘電率	[c ² t ² /ML ³]
κ_e	: 電気伝導度	[c ² t/ML ²]
κ	: bulk 粘性	[M/Lt]
μ, μ_e, μ_t, μ_m	: 実効, 乱流, 分子粘性係数	[M/Lt]
μ_0	: 真空透磁率	[ML/c ² t ²]
ν	: 動粘性係数	[L ² /t]
ρ_e	: 電荷密度	[c/L ³]
ρ_i	: 流体密度	[M/L ³]
σ	: Stefan-Boltzman 定数	[M/t ⁴ T ⁴]
σ_K, σ_W	: K, W の Schmit 数	[—]
τ	: 剪断応力テンソル	[M/t ² L]
Φ	: ポテンシャルエネルギー	[M/Lt ²]
Ψ	: 流れ関数	[M/t]
ω	: 局所時間平均渦度の絶対値	[1/t]

文 献

- (1) R.B.Bird, W.E.Stewart and E.N.Lightfoot: *Transport Phenomena*, Wiley & Sons, Inc., (1960).
 - (2) J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss and R. B. Bird: *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, New York, (1954).
 - (3) B. E. Launder and D. B. Spalding: *Mathematical Models of Turbulence*, Academic Press, (1972).
 - (4) D. B. Spalding: VDI-Forschungsh, **38**(1972), No.549, 5~16.
 - (5) 吉沢昭宣, 中西恭二, 梅村晃由, 浅井滋生, 沖進: 金属工学における連続体力学の応用(シンポジウム予稿), 金属学会第IV総合分科, (1977).
- (MHD)
- (6) J.Szekely and C.W.Chang: I & S, **4**(1977), No.3, 196~204.
 - (7) A.H.Dilawari, T.W.Eagar and J.Szekely: *Welding Research Supplement*, (1978), pp 24~30.
 - (8) A.H.Dilawari and J.Szekely: *Met. Trans. B*, **9B**(1978), 77~87.
 - (9) A. S. Ballantyne and A. Mitchell: I & S **4**(1977), No.4, 222-239.
 - (10) K.Nakanishi, J.Szekely *et al.*: *Met. Trans. B*, **6B**(1975), 111~118.
 - (11) J. Szekely and S.Asai: *ISIJ*, **15**(1975), 276~285.
 - (12) J. Szekely, S. Nakanishi and S. Iwaoka: *Electric Furnace Proceedings*, (1974), 247~255.
 - (13) J.Szekely, C.W.Chang and W.E.Johnson: *Met. Trans. B*, **8B**(1977), 514~517.
 - (14) J. Szekely and C.W.Chang: I & S, **4**(1977), No.3, 190~195.
 - (15) A.H.Dalawari and J.Szekely: *Met. Trans. B*, **8B**(1977), 227~236.
 - (16) J. Szekely, C. W. Chang and R. E. Ryan: *Met Trans. B*, **8B**(1977), 333~338.
 - (17) J. Szekely and C. W. Chang: *JOM*, Sept (1976), 6~11.
 - (18) J. Szekely, H. J. Wang and K. M. Kiser: *Met. Trans.*, **7B**(1976), 287~295.
 - (19) J.Szekely and S.Asai: *ISIJ*, **15**(1975), 270~275.
 - (20) J. Szekely and K. Nakanishi: *Met. Trans.* **6B**(1975), 245~256.
 - (21) K.Nakanishi and J.Szekely: *ISIJ*, **15**(1975), 522~530.
 - (22) 浅井滋生: 融体系冶金プロセスにおける流れの問題, 日本金属学会会報, **16**(1977), No.8, 493~497.
- (Ergun 式関係)
- (23) J. J. Poveromo: *Proc. Am. Inst. Min. Metall. Pet. Eng. Ironmaking Conf.*, **34**(1975), 383~402.
 - (24) J. Szekely and M. Proster: *Ironmaking & Steelmaking*, **4**(1977), No.1, 15~22.
 - (25) V. Stanek and J. Szekely: *AIChE*, **20**(1974), No.5, 974~980.
 - (26) J. Radestock and R. Jeschar: *Stahl Eisen*, **90**(1970), 1249~1255.
 - (27) 桑原 守, 鞭 巖: 鉄と鋼, **61**(1975), No.3, 301~311.
 - (28) 桑原 守, 鞭 巖: 鉄と鋼, **61**(1975), No.6, 787~796.
 - (29) 桑原 守, 鞭 巖: 鉄と鋼, **62**(1976), No.5, 463~471.
 - (30) M.Kuwabara and I.Muchi: *ISIJ*, **17**(1977), No.5, 271~278.
 - (31) M.Kuwabara and I.Muchi: *ISIJ*, **17**(1977), No.6, 321~329.
 - (32) M.Kuwabara and I.Muchi: *ISIJ*, **17**(1977), No.6, 330~338.
 - (33) J. Yagi and J. Szekely: *ISIJ*, **17**(1977), No.10, 569~575.
 - (34) J. Yagi and J. Szekely: *ISIJ*, **17**(1977), No.10, 576~585.
 - (35) 杉山 喬, 八木順一郎, 大森康男: 鉄と鋼, **64**(1978), No.12, 1676~1684.
 - (36) 八木順一郎: 日本金属学会会報, **16**(1977), No.6, 357~362.
 - (37) 荒木和男: 鉄と鋼, **62**(1967), No.12, 1485~1492.
 - (38) 荒木和男, 森山 昭, 西尾賢一: 鉄と鋼, **60**(1974), No.14, 2085~2097.
 - (39) 荒木和男, 森山 昭: 鉄と鋼, **63**(1977), No.3, 1035~1036.
 - (40) 荒木和男, 森山 昭: 鉄と鋼, **63**(1977), No.9, 1453~1459.
 - (41) 羽田野道春, 栗田興一: 鉄と鋼, **63**(1977), No.2, 217~226.
- (そ の 他)
- (42) 福武 剛, 岡部俠児: 鉄と鋼, **60**(1974), No.6, 607~621.
- (数値計算)
- (43) P. J. Roache: *Computational Fluid Dynamics*, Hermosa Publishers, (1972).
 - (44) W.C.Rivard, O.A.Farmer and T.D.Butler: RICE A Computer Program for Multicomponent Chemically Reactive Flows at All Speeds, LA-5812(1974).
 - (45) J.E.Welch, F.H.Harlow, J.P.Shannon and B. J. Daly: The MAC Method-Acomputing Technique for Solving Viscous, Incompressible, Transient Fluid-Flow Problems Involving Free Surface, LA-3425(1965).

- (46) J. F. Thompson, F. C. Thames and C. W. Mastin : Boundary-Fitted Curvilinear Coordinate Systems For Solution of Partial Differential Equations on Fields Containing Any Number of Arbitrary Two-Dimensional Bodies, NASA-CR-2729(1977).
- (47) J. W. Deardroff : A numerical Study of Three-Dimensional Turbulent Channel Flow at Large Reynolds Numbers, Fluid Mech., (1970), Vol.41, 453~480.
- (48) T. D. Butler : Recent Advances in Computational Fluid Dynamics, Computer Science, 11(1974), Lecture Notes Computing Methods in Applied Sciences and Engineering PAPT 2.
- (49) C. W. Hirt : Heuristic Stability Theory for Finite Difference Equations, J. Comp. Phys., 2(1968), 339~355.
- (50) F. H. Harlow and A. A. Amsden : J. Comp. Phys., 3(1968), 80~93.
- (51) C. W. Hirt and J. P. Shannon : J. Comp. Phys., 2(1968), 403~411.
- (52) B. D. Nichols and C. W. Hirt : J. Comp. Phys., 8(1971), 434~448.
- (53) F. H. Harlow and J. E. Fromm : The Physics of Fluids, 7(1964), No. 8, 1147~1156.
- (54) B. J. Daly : The Physics of Fluids, 12(1969), No. 7, 1340~1355.
- (55) B. J. Daly and W. E. Pracht : The Physics of Fluids, 11(1968), No. 1, 15~30.
- (56) F. H. Harlow and J. E. Welch : The Physics of Fluids, 8(1965), No. 12, 2182~2189.
- (57) C. W. Hirt and J. L. Cook : J. Comp. Phys., 10(1972), 324~340.
- (58) J. A. Vieceilli : J. Comp. Phys., 8(1971), 119~143.
- (59) 佐久田博司, 吉沢昭宣 : 鉄と鋼, 62(1976), No. 11, s-436.
- (60) 佐久田博司, 吉沢昭宣 : 鉄と鋼, 63(1977), No. 3, s-43.
- (61) 佐久田博司, 吉沢昭宣 : 鉄と鋼, 63(1977), No. 11, s-460.
- (62) 佐久田博司, 吉沢昭宣 : 鉄と鋼, 64(1978), No. 11, s-527~529.
- (63) J. J. Conner and C. A. Brebbia : 流体解析への有限要素法の応用 (和訳), サイエンス社, (1978).

*

————— 日本金属学会主催国際会議のご案内 —————

第2回 JIM 国際シンポジウム「金属と水素」

時 : 昭和54年11月26日(月)~29日(木)

所 : 水上館(群馬県利根郡水上町)

アブストラクト締切 : 昭和54年5月31日

参 加 申 込 締 切 : 昭和54年8月31日

第4回 チ タ ン 国 際 会 議

時 : 昭和55年5月19日(月)~22日(木)

所 : 国立京都国際会館(京都市左京区宝地)

アブストラクト締切 : 昭和54年5月31日

参 加 申 込 締 切 : 昭和55年3月31日

サーキュラー請求先 : (980) 仙台市荒巻字青葉 日本金属学会事務局
(0222-23-3685 ; 0222-25-3098)