

# 溶鉱炉に現われる自由境界問題に対する有限要素解析

筑波大学理工学研究科

張 国 豊

## 1. はじめに

自由境界問題は、工学や自然現象の中に多く存在する問題である。自由境界問題は内部状態に対する支配方程式と自由境界においての問題に特有の境界条件を表わす微分方程式によって記述される。自由境界の形状は内部状態に影響されるので、境界条件は一般に複雑な非線形方程式になる。したがって、自由境界問題の解析には、数値的な手法が必要とされる。ここでは、自由境界問題の一例である溶鉱炉内のスラグ・メタル問題<sup>[1]</sup>に対して、有限要素法を用いた数値解法を試みた。

## 2. スラグ・メタル問題の定式化

溶鉱炉(図1)の中に鉱石とコークスなどを入れ、高温と酸素を加えると、鉱石が溶けて、スラグ(溶滓)とメタル(溶鉄)に分かれる。これらが炉床に溜り、比重の関係でスラグが上にメタルが下になる。スラグとメタルがある量まで溜ったら、これらを炉の下部にある出鉄口から排出する。炉内のスラグとメタルが減っていき、スラグの液面が出鉄口まで下がると、炉内ガスが噴出し初め、危険であるため、出鉄口を塞ぐ。

上述した排出プロセスがスラグ・メタル問題の原型である。排出によるスラグ液面及びスラグ・メタル界面の時間に関する変化を解析するために、この問題を(図2)のような2次元の自由境界問題として定式化する<sup>[1]</sup>。ここで、 $x=0$ ,  $x=a$  及び  $y=0$  は炉壁と底面を表わし、炉壁  $x=a$  の上に鉄口  $\Gamma_0$  がある。 $\Omega_1(t)$  と  $\Omega_2(t)$  はそれぞれスラグとメタルの領域で、曲線  $y=g_1(x,t)$ 、 $y=g_2(x,t)$  はそれぞれスラグの液面とスラグ・メタル界面を表わす。また  $\Omega_1(t)$  と  $\Omega_2(t)$  の固定境界をそれぞれ  $\Gamma_1(t)$  と  $\Gamma_2(t)$  で表わし、自由境界のスラグ液面及びスラグ・メタル界面をそれぞれ  $\Gamma_1'(t)$  と  $\Gamma_2'(t)$  で表わす。

炉床にはコークスが詰まっており、スラグとメタルはコークス層を通過して鉄口へ流れとす。すなわち、スラグとメタルの流れは充填層内のゆっくりした流れであって、Darcy の法則が適用できる。スラグとメタルが均質で、非圧縮的で密度一定とする。また、炉床は等方性を持ち、毛細管現象が無視でき、流れは一定とする。スラグ、メタルの速度及び速度ポテンシャルは次のように与えられる。

$$V_i = -K_i \cdot \nabla U_i \quad (i=1,2) \quad (2.1)$$

$$U_i = \frac{P_i - P_0}{r_i} + Y \quad (i=1,2) \quad (2.2)$$

ここで、 $i=1$ :スラグ、 $i=2$ :メタルを表わす。また、 $U_i$ :速度ポテンシャル、 $V_i$ :速度、 $K_i$ :透過係数、 $P_i$ :圧力、 $P_0$ :基準点の圧力、 $r_i$ :比重、 $Y$ :基準面からの垂直高さなどを表わす。

スラグ、メタルが非圧縮的であることから、 $V_i$  は連続方程式を満足する。したがって、次のLaplace方程式が成立する。

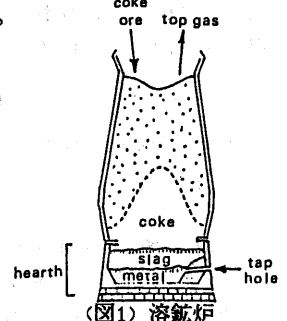
$$\Delta U_i = 0 \quad \text{in } \Omega_i(t) \quad (i=1,2) \quad (2.3)$$

ただし、

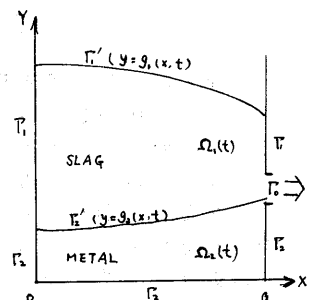
$$\Omega_1(t) = \{(x, y), 0 < x < a, g_2(x, t) < y < g_1(x, t)\}$$

$$\Omega_2(t) = \{(x, y), 0 < x < a, 0 < y < g_2(x, t)\}$$

式(2.3) はスラグとメタルの流れの基礎方程式であり、適当な境界条件を与えることにより  $U_i$  が求められる。



(図1) 溶鉱炉



(図2)

2次元のスラグ・メタル問題

次に境界条件を考える。スラグ液面 $\Gamma_1'$ 上では、圧力 $P_1 = P_0$ と等しい。スラグ・メタル界面 $\Gamma_2'$ 上では、圧力 $P_1 = P_2$ で、また、 $U_1$ 、 $U_2$ の法線方向微分も等しい。出銃口以外の固定境界上では、流出がなく、出銃口では、流出速度がそれぞれ一定である。以上のことをまとめて、次の式を得る。

$$U_1|_{\Gamma_1'} = g_1 \quad (2.4)$$

$$\left( U_1 - \frac{r_2}{r_1} U_2 \right) \Big|_{\Gamma_2'} = \left( 1 - \frac{r_2}{r_1} \right) \cdot g_2 \quad (2.5)$$

$$K_1 \frac{\partial U_1}{\partial n_1} \Big|_{\Gamma_2'} = -K_2 \frac{\partial U_2}{\partial n_2} \Big|_{\Gamma_2'} \quad (2.6)$$

( $n_i$ : 領域 $\Omega_i(t)$ 境界上の外向き法線方向を示す。)

$$\frac{\partial U_i}{\partial n_i} \Big|_{\Gamma_i \setminus \Gamma_0} = 0 \quad (i=1,2) \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial U_i}{\partial n_i} \Big|_{\Gamma_i \cap \Gamma_0} = -\frac{v_{out}}{K_i} \quad (i=1,2) \quad (2.8)$$

ここで、もし $y = g_i(x, t)$  ( $i=1,2$ ) が与えられた場合、 $U_1$ 、 $U_2$  は Laplace 方程式 (2.3) と境界条件 (2.4) ... (2.8) を解くことによって、求めることができる。一方、液面 $g_1(x, t)$ 、 $g_2(x, t)$ の時間に関する変動は次の式で与えられる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_i}{\partial t} &= K_i \cdot \left( \frac{\partial U_i}{\partial x} \cdot \frac{\partial g_i}{\partial x} - \frac{\partial U_i}{\partial y} \right) \Big|_{\Gamma_i'} \\ &= -K_i \sqrt{1 + \left( \frac{\partial g_i}{\partial x} \right)^2} \cdot \frac{\partial U_i}{\partial n_i} \Big|_{\Gamma_i'} \quad (i=1,2) \end{aligned} \quad (2.9)$$

上述した自由境界問題を解くためには、まず自由境界を一時的に固定境界と見なし、定常問題 (2.3) ... (2.8) を解き、自由境界上の速度の法線方向成分を計算し、しかるのちに、式 (2.9) により、微小時刻後の自由境界を移動させるという手順をとる。定常問題 (2.3) ... (2.8) の解法には有限要素法<sup>[2]</sup>を用い、自由境界の移動には差分法<sup>[3]</sup>を使う。この場合、方程式 (2.9) は Stiff な性質を持つので、差分法として陽解法を用いると解が振動して正しい解が得られないことになるので、ここでは後退オイラ法を用いる。

$$g_i^{(k+1)} = g_i^{(k)} - \Delta t K_i \sqrt{1 + \left( \frac{\partial g_i^{(k)}}{\partial x} \right)^2} \cdot \frac{\partial U_i^{(k+1)}}{\partial n_i} \Big|_{\Gamma_i'} \quad (i=1,2) \quad (2.10)$$

ここで、 $(\partial g_i^{(k+1)} / \partial x)$  を  $(\partial g_i^{(k)} / \partial x)$  で代用したのは、(2.10) を  $g_i^{(k+1)}$  に関して線形にするためである。

### 3. 有限要素法の適用

出銃口の近くで液面の変動が大きいと思われるので、領域を三角形分割する際に、出銃口近くはやや細かく分割する。X 方向では、 $n$  個の分点は次のように取る。

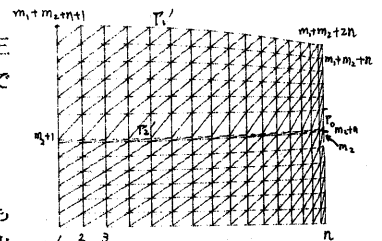
$$x_i = a \left( 1 - \left( \frac{n-i}{n} \right)^{1.5} \right) \quad (i=0, n)$$

Y 方向では、自由境界 $\Gamma_1'$ 、 $\Gamma_2'$ の形状は1時間ステップ前のものを使って代用し、境界上の積分が正確に近似されるために、出銃口上に節点に乗るように分割を行う。

(図3)のように番号付けする。

第  $k$  番目の節点のみで値が1、他のすべての節点では値が0、そして各三角形要素内では平らな面であるようなピラミッド型の線形な基底関数を  $\phi_k(x, y)$  とする。

後退オイラ法を使うために、形式上自由境界 $\Gamma_1'$ 、 $\Gamma_2'$ をノイマン型境界と見なす。 $U_1$ 、 $U_2$  は次のように基底関数の線形結合で近似することができる。



(図3) 領域の三角形分割

$$U_1(x, y) = \sum_{j=m_2+1}^{m_1+m_2+2n} u_{1j} \phi_j(x, y) \quad (3.1)$$

$$U_2(x, y) = \sum_{j=1}^{m_2+n} u_{2j} \phi_j(x, y) \quad (3.2)$$

また、境界  $\Gamma_1'$  上で  $\partial U_1 / \partial n_1 = \alpha_1$ 、 $\Gamma_2'$  上で、 $\partial U_1 / \partial n_1 = \alpha_2$ 、 $\partial U_2 / \partial n_2 = \alpha_3$  とすると、

$$\alpha_1(x, y) = \sum_{j=m_1+m_2+n+1}^{m_1+m_2+2n} \alpha_{1j} \phi_j(x, y) \quad (3.3)$$

$$\alpha_2(x, y) = \sum_{j=m_2+1}^{m_2+n} \alpha_{2j} \phi_j(x, y) \quad (3.4)$$

$$\alpha_3(x, y) = \sum_{j=m_2+1}^{m_2+n} \alpha_{3j} \phi_j(x, y) \quad (3.5)$$

Laplace 方程式 (2.3) とノイマン型境界条件 (2.6) ... (2.8) に有限要素法を適用すると、次の連立一次方程式 (3.6)、(3.7) を得る。

スラグにおいて

$$[C_2, A_1, C_1] \cdot \begin{bmatrix} \alpha_2 \\ u_1 \\ \alpha_1 \end{bmatrix} = b_1 \quad (3.6)$$

メタルにおいて

$$[A_2, C_2] \cdot \begin{bmatrix} u_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = b_2 \quad (3.7)$$

ここで、 $A_1: (m_1+2n) \times (m_1+2n)$ 、 $A_2: (m_2+n) \times (m_2+n)$ 、 $C_1: (m_1+2n) \times n$ 、 $C_2: (m_2+n) \times n$ 、 $u_1: (m_1+2n) \times 1$ 、 $u_2: (m_2+n) \times 1$ 、 $\alpha_1: n \times 1$ 、 $\alpha_2: n \times 1$ 、 $\alpha_3: n \times 1$ 、 $b_1: (m_1+2n) \times 1$ 、 $b_2: (m_2+n) \times 1$  であって、それぞれの要素は次のものになる。

$$(A_1)_{ij} = \iint_{\Omega_1} \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} + \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \right) dx dy \quad (i, j = m_2+1, \dots, m_1+m_2+2n)$$

$$(A_2)_{ij} = \iint_{\Omega_2} \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} + \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \right) dx dy \quad (i, j = 1, \dots, m_2+n)$$

$$(C_1)_{ij} = \int_{\Gamma_1} \phi_i \phi_j ds \quad (i = m_2+1, \dots, m_1+m_2+2n, j = m_1+m_2+n+1, \dots, m_1+m_2+2n)$$

$$(C_2)_{ij} = \int_{\Gamma_2'} \phi_i \phi_j ds \quad (i = 1, \dots, m_2+n, j = m_2+1, \dots, m_2+n)$$

$$(b_1)_i = -\frac{V_{out}}{K_1} \int_{\Gamma_1} \Gamma_0 \phi_i ds \quad (i = m_2+1, \dots, m_1+m_2+2n)$$

$$(b_2)_i = -\frac{V_{out}}{K_2} \int_{\Gamma_2} \Gamma_0 \phi_i ds \quad (i = 1, \dots, m_2+n)$$

スラグ・メタル界面とスラグ液面上の境界条件に後退オイラ法を組み合わせると下の式を得る。

$$\begin{aligned} u_{1j}^{(k+1)} &= g_{1j}^{(k+1)} \\ &= g_{1j}^{(k)} - \Delta t K_1 \sqrt{1 + \left( \frac{\partial g_{1j}^{(k)}}{\partial x} \right)^2} \cdot \alpha_{1j}^{(k+1)} \quad (j = m_1+m_2+n+1, \dots, m_1+m_2+2n) \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} u_{1j}^{(k+1)} - \left( 1 - \frac{r_2}{r_1} \right) u_{2j}^{(k+1)} &= \left( 1 - \frac{r_2}{r_1} \right) g_{2j}^{(k+1)} \\ &= \left( 1 - \frac{r_2}{r_1} \right) \left( g_{2j}^{(k)} - \Delta t K_2 \sqrt{1 + \left( \frac{\partial g_{2j}^{(k)}}{\partial x} \right)^2} \cdot \alpha_{3j}^{(k+1)} \right) \quad (j = m_2+1, \dots, m_2+n) \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$K_1 \alpha_{2j}^{(k+1)} = -K \alpha_{3j}^{(k+1)} \quad (j = m_2+1, \dots, m_2+n) \quad (3.10)$$

(3.8) ... (3.10) と連立線形方程式 (3.6)、(3.7) を連立して、整理すると、次のような時刻  $\Delta t \cdot (k+1)$  のスラグとメタルに関する統一した連立線形方程式が得られる。

$$A^{(k+1)} \cdot \begin{bmatrix} u_2^{(k+1)} \\ \alpha_3^{(k+1)} \\ u_1^{(k+1)} \\ \alpha_1^{(k+1)} \end{bmatrix} = b^{(k+1)} \quad (3.11)$$

ただし、

$$A^{(k+1)} = \begin{array}{c|c|c|c|c} & A_2^{(k)} & C_2^{(k)} & 0 & 0 \\ \hline & E_1^{(k)} & E_2^{(k)} & E_3^{(k)} & 0 \\ \hline & 0 & C_3^{(k)} & A_1^{(k)} & C_1^{(k)} \\ \hline & 0 & 0 & E_4^{(k)} & E_5^{(k)} \end{array} \quad b^{(k+1)} = \begin{array}{c} b_2^{(k)} \\ b_3^{(k)} \\ b_1^{(k)} \\ b_4^{(k)} \end{array}$$

$A_1$ 、 $A_2$ 、 $C_1$ 、 $C_2$ 、 $b_1$ 、 $b_2$  は (3.6)、(3.7) で与えられたもので、 $C_3$  は  $C_2$  に  $(-K_2/K_1)$  を乗じたものである。また、 $E_1^{(k)}$  ...  $E_6^{(k)}$  及び  $b_3^{(k)}$ 、 $b_4^{(k)}$  はそれぞれ次のものである。

$$\begin{aligned} E_1^{(k)} &: n \times (m_2 + n), \\ (E_1^{(k)})_{ij} &= \begin{cases} -r_2/r_1 & (j=i+m_2) \\ 0 & (j \neq i+m_2) \end{cases} \quad (i=1, \dots, n) \\ E_2^{(k)} &: n \times n, \\ (E_2^{(k)})_{ij} &= \begin{cases} \frac{r_2}{r_1} - 1) \Delta t K_2 \sqrt{1 + \left( \frac{\partial g_2^{(k)}(j+m_2)}{\partial x} \right)^2} & (j=i) \\ 0 & (j \neq i) \end{cases} \quad (i=1, \dots, n) \\ E_3^{(k)} &: n \times (m_1 + 2n), \\ (E_3^{(k)})_{ij} &= \begin{cases} 1 & (j=i) \\ 0 & (j \neq i) \end{cases} \quad (i=1, \dots, n) \\ E_4^{(k)} &: n \times (m_1 + 2n), \\ (E_4^{(k)})_{ij} &= \begin{cases} 1 & (j=i+m_1+n) \\ 0 & (j \neq i+m_1+n) \end{cases} \quad (i=1, \dots, n) \\ E_5^{(k)} &: n \times n, \\ (E_5^{(k)})_{ij} &= \begin{cases} -\Delta t K_1 \sqrt{1 + \left( \frac{\partial g_1^{(k)}(j+m_1+m_2+n)}{\partial x} \right)^2} & (j=i) \\ 0 & (j \neq i) \end{cases} \quad (i=1, \dots, n) \\ b_3^{(k)} &: n \times 1 \\ (b_3^{(k)})_i &= \left( 1 - \frac{r_2}{r_1} \right) g_2^{(k)}(m_2+i) \quad (i=1, n) \end{aligned}$$

$$b_4^{(k)}: n \times 1$$

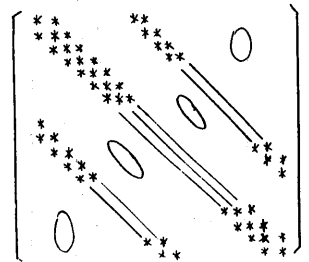
$$(b_4^{(k)})_i = g_1^{(k)}_{(m_1+m_2+n+i)} \quad (i=1, n)$$

方程式(3.11)はスラグ・メタル問題を時間に関する陰解法と空間に関する有限要素法を組み合わせ、得られた離散化方程式である。各時刻について、1時間ステップ前で計算された境界を用いて領域分割を行って、連立一次方程式(3.11)を構成すれば、(3.11)を解くことによって、新しい時刻の自由境界の形状及び領域内部の状態が計算できる。

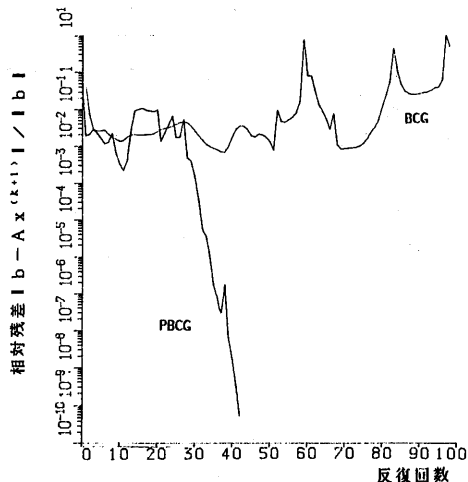
#### 4. 数値結果

$a = 1$ ,  $V_{out} = 2.25$ , 透過係数  $K_1 = 7.5$ ,  $K_2 = 1875$ , 比重比  $r_2/r_1 = 4.1875$ , 時間きざみ  $\Delta t = 0.16$ , 初期状態  $g_1(x, 0) = 0.25$ ,  $g_2(x, 0) = 0.12$ , 出鉄口 =  $\{(x, y), x = a, 0.09 \leq y \leq 0.11\}$ , 節点数 = 238 で計算を行った。

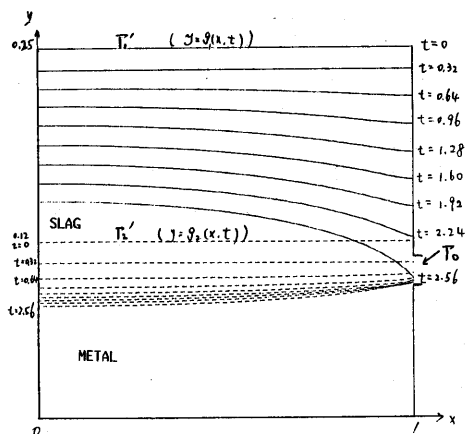
各時間ステップでの有限要素法と差分法により得られた連立一次方程式(3.11)の係数行列  $A$  は 10 個の小行列で構成されている。 $A$  の構成から判るように  $A$  は非対称な非  $M$  行列である。また、基底関数の性質により、小行列がそれぞれ疎なため、係数行列  $A$  は(図4)のような疎な行列になる。疎な非対称行列の解法には、SOR法、CR(Conjugate Residual)法、BCG(BiConjugate gradient)法<sup>[4]</sup>などがあるが、今回のような問題に対してはSOR法の収束性が悪いことが経験的に判っている。また、 $A$  の対称部分は非正定値で、 $A$  はCR法の収束条件を満たさないから、BCG法を用いる。前処理(Precondition)は  $A$  の非零要素部分だけを不完全LU分解を用いる<sup>[4],[5]</sup>(図5)はBCG法とPBCG法を用いた時の反復回数と相対残差のグラフである。 $(A^{(1)})$  の固有値分布について、前処理前[最大固有値/最小固有値] =  $0.14 \times 10^6$ , 前処理後[最大固有値/最小固有値] =  $0.15 \times 10^3$  であった。)。



(図4)  $A$  の非零要素のパターン



(図5)  $A^{(1)}$  に対する PBCG と BCG の比較



(図6) スラグ、メタル液面の変化

(図6)は自由境界  $\Gamma_1'$ ,  $\Gamma_2'$  の変化を時間ステップ2回に1回の割合でプロットしたものである。点線の下はメタル、点線と実線の間は、スラグである。(図6)は、スラグとメタルの界面  $g_2(x, t)$  が出鉄口の下部分に近づいた時、出鉄口側の界面が反対側よりも高いことを示している。この現象は、実際の溶鋳炉の中でも確認されている。

各時間ステップの計算結果の誤差を推定するために、質量保存の原理により、次の式を用いた。

$$\begin{aligned} \text{相対誤差} &= \left| 1 - \frac{\Delta t \text{ 当たりの計算上の排出量}}{\Delta t \text{ 当たりの理論排出量}} \right| \\ &= \left| 1 - \frac{\int_0^{\alpha} (g_1^{(k)} - g_1^{(k+1)}) dx}{\Delta t \cdot V_{out} \cdot (\Gamma_0 \text{ の大きさ})} \right| \end{aligned}$$

各時間ステップのPBCG法の反復回数を(表1)に示す。また、各時間ステップの相対誤差を(表2)に示す。

(表1) 反復回数

| ステップ | 反復回数 |
|------|------|
| 1    | 43   |
| 2    | 44   |
| 3    | 44   |
| 4    | 43   |
| 5    | 43   |
| 6    | 48   |
| 7    | 42   |
| 8    | 44   |
| 9    | 43   |
| 10   | 47   |
| 11   | 45   |
| 12   | 42   |
| 13   | 47   |
| 14   | 41   |
| 15   | 46   |
| 16   | 45   |
| 平均   | 44   |

A: 289 × 289

反復停止許容誤差:

$$\|b - Ax^{(k)}\| / \|b\| < \varepsilon = 10^{-10}$$

機種:

ECLIPSE MV4000

倍精度演算

(表2) 相対誤差

| ステップ | 相対誤差                  |
|------|-----------------------|
| 1    | $0.95 \times 10^{-6}$ |
| 2    | 0.00                  |
| 3    | $0.95 \times 10^{-6}$ |
| 4    | $0.95 \times 10^{-6}$ |
| 5    | $0.10 \times 10^{-5}$ |
| 6    | $0.10 \times 10^{-5}$ |
| 7    | $0.16 \times 10^{-5}$ |
| 8    | $0.31 \times 10^{-5}$ |
| 9    | $0.41 \times 10^{-5}$ |
| 10   | $0.57 \times 10^{-5}$ |
| 11   | $0.73 \times 10^{-5}$ |
| 12   | $0.10 \times 10^{-4}$ |
| 13   | $0.14 \times 10^{-4}$ |
| 14   | $0.19 \times 10^{-4}$ |
| 15   | $0.28 \times 10^{-4}$ |
| 16   | $0.28 \times 10^{-4}$ |
| 平均   | $0.79 \times 10^{-5}$ |

ここでは、スラグ・メタル問題を空間方法に関する有限要素法と時間方向に関する後退オイラ法を組み合わせ、解析することを試みたが、この解法は他の方法に比較して、十分妥当な解が計算されていることがわかった。一般の自由境界問題に対してもこの解法が有効であると思われる。

また、有限要素法により生じた疎な連立一次方程式に対して、前処理付き双対共役勾配法(PBCG法)が有効であることが確認された。次元数の大きい非対称行列に対して、PBCG法がさらにその優勢を発揮することが期待できるであろう。

#### 参考文献

- [1] Makoto Natoli, Hideo Kawarada: Numerical Solution of Free Boundary Problem for Unsteady Slag Flow in the Hearth, ISE-TR-83-39, 1983
- [2] 森正武: 有限要素法とその応用, 岩波出版, 1983
- [3] 李栄華 等: 微分方程数值解法, 人民教育出版社(中国)
- [4] 村田健郎, 子国 力, 唐木幸比古: スーパーコンピュータ---科学技術計算への適用, 丸善, 1985
- [5] 野寺 隆: 大型疎な行列に対するPCG法, Seminar on Math. Science, Keio Univ. No.7, 1983