

ボックス・コンタクト法シミュレーションの概念と ボックスの定義について

3K-6

武田邦彦, 豊高宏典

芝浦工業大学工学部材料工学科

1 はじめに

歴史的経過から理解できるように, もともと自然現象を方程式で表現する目的は, 自然現象をより正しく詳細に理解しようとする事, その方程式を解くことによって自然現象の理解と利用を促進することである. その目的に沿って, 人の手で計算できるという制限の中で, 微分方程式などが研究されていた. そこで, 仮に“近代科学誕生の時から超高速のコンピュータが存在した”という想定のもとに, 対象とする自然現象の表記方法を見直すと, 微分方程式の意義は少なくなり, 自然現象を特定の制約のもとで理解しようとする方法と考えることができる. 近代科学の誕生の時から超高速コンピュータが存在したとすると, 対象とする自然現象を直接的に記述し, そのままの状態を簡単な原理を使用し, 計算によって明らかにしたことも考えられる. この様な疑問から, 本研究ではボックス・コンタクト法という概念を着想し考案した.

2 ボックス・コンタクト法の概要とボックスの定義

自然現象を方程式で表現するもっとも標準的方法は微分方程式による表現である. この手法によると対象とする自然現象を巨視的に連続媒質の満たされた領域における物理的諸性質の状態や変動とみなし, 微小体積内における分子運動の平均値がその領域の物理的諸性質を表すものとして全体の領域を連続関数として取り扱えるとする. しかし, 数学的手法を用いるために自然現象が微小部分において巨視的観察と一致する連続的現象を持っているという仮定を置くことは, 自然現象を解明する上で必須のことではないと考えられる.

この様な微分方程式の持つ制約条件を, 高速コンピュータが出現した現在の環境に合わせて再度考慮し直す. すなわち, 我々が日常的, あるいは顕微鏡などの特殊な機器を使用して観測されるスケールと現象解明の目的の程度に合わせて“最適な素過程で表現される”と考えられる“最適な微小領域”を定め, そこで起こる現象を全体領域に拡張して全体領域における最適な素過程として記述する方法が考えられる. この様な取り扱い, 対象となる自然現象がより忠実に記述されるため, 微分方程式より有用であろうと考えられる. すなわち, 本論文では我々が自然界の対象物を観測する時の手段によって決まる“ある最適な単一の素過程で記述される微小領域の集合した領域”を“ボックス領域”と定義する. 従って, 観測手段が日常生活のレベルとあまり異ならない場合, ボックス領域は比較的大きなスケールを持ち, 現代科学の最先端の観測装置を使用して原子を極めて高速で直接観測できる場合, ボックス領域は一つの原子, またはそのさらに小さい空間的, 時間的な区切りを指すことになる.

ボックス領域は, 研究目的および観測との関係において材料が均質であり, 単一もしくは少ない素過程で表現されると見なされる領域であり, 物質の活量, 温度, 圧力などの示強性因子が同一であるわけではない. そこで, ボックス領域内には複数のボックスを設定する. ボックス領域内に複数のボックスが設定される場合, ボックス領域の境界は, 別の物理的, 化学的性質や原理, 素過程に支配されるボックス領域に接してい

るので、ボックス間のやりとりはかなり慎重を要する。時には微小であっても異なるボックス領域の間では境界ボックス領域の設定が必要であろう。しかし、ボックス領域内のボックス間の境界の処理は単純である。

このように、“ボックス領域”と“ボックス”は観測手段の種類や解析しようとする目的により異なる最適な素過程で表される空間的、時間的領域として定義されるので、物理的、数学的には連続体と見なすことができない場合も、ボックス領域と認識することができる。すなわち、ボックスーコンタクト法の中心的概念の一つは、自然界は基本的に不連続であるということであり、自然界を基本的に連続とし、不連続部分を特殊な部分として処理する微分方程式とは異なる方法であるといえる。

3 ボックスーコンタクト法の具体例としての分離システムへの適用

ボックスーコンタクト法は比較的単純なモデルであるが、その概念をさらに明確にするために吸着分離という化学工学的なプロセスの例を採って検討を加える。検討の対象となるシステムの全体像をFig. 1に示す。中心の装置が分離塔であり、内部には球状の吸着剤が充填されている。分離対象となる物質を含んだ溶液は、左右のタンクから順番にポンプで分離塔に供給される。分離塔から流出する液体は、回収する必要があるため、分割して回収できるように収集装置がついている。分離システムをボックスーコンタクト法で概念検討の例として取り上げたのは、従来より様々なコンピュータ・シミュレーションの手法が検討されており、ボックスーコンタクト法との比較が可能であることによる。この分離システムを微分方程式で表現して解析する場合、分離は、式(1)のようにあらわすことが出来る[1]。

$$(\partial C / \partial t)_x = -v(\partial C / \partial x)_t + D(\partial^2 C / \partial x^2)_t \quad (1)$$

すなわち、従来の方法では、吸着分離塔をマクロ的に連続的と見て、それを微小部分に分割して微分方程式を得て、離散化し、解を求める。データとして使用するものは、縦方向の拡散係数、移動速度、動的濃縮係数である。これらは、吸着体の化学的性質や溶液内の金属元素の錯形成状態と直接的に結びついていない分離実験の結果として得られるデータである。すなわ

ち、流下方向の拡散係数が小さければ分離は良好に進み、平均移動速度が大きければ分離の生産性は向上する。これらの結果は、計算しなくてもその傾向は判っており、コンピュータ・シミュレーションによって定量的な表現ができたに過ぎないといえる。

ボックスーコンタクト法の場合は、実際の分離塔の内部をそのまま記述する。吸着分離の場合、吸着塔には球状の吸着体が充填されており、その間を上方から分離対象となる物質を含む溶液が流下する。すなわち、ボックスーコンタクト法では吸着体と溶液層からなる“分離ユニット”をそのままFig. 2のように表現できると考えられる。この場合、Table 1に示すようにコンピュータ・シミュレーションを実施するときに入力するパラメータや物理的定数は、金属元素の錯形成状態と直接的に結びついている選択係数や平均価数などである。その結果、ボックスーコンタクト法によるコンピュータ・シミュレーションにより、実験を行うのと同じように実験前に実験結果を知る必要がなくなり、コンピュータ・シミュレーションの意義が増すのである。

引用文献

[1]土屋敏明, 豊高宏典, 青柳 裕司, 小野幸子, 武田邦彦: 資源・素材学会, 提出中(1999)

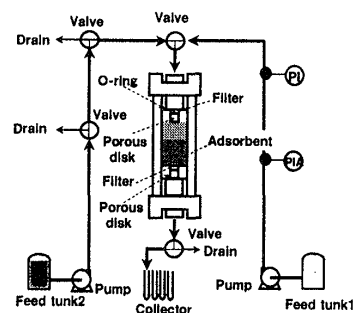


Fig. 1 Outline of separation system

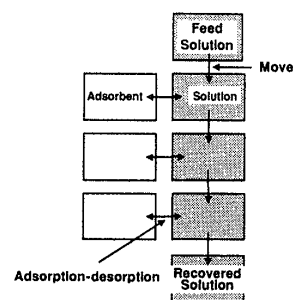


Fig. 2 Fundamental scheme of numerical calculation for separation system by Box-contact method

Table 1 Comparison of physical values

Case	Traditional method	Box-contact method
Physical values used	D_r : Relative diffusion coefficient	K_d : Selectivity
	v_f : Relative mean velocity	C_f : Concentration
		v_f : Occupied area ratio of ion
		Q_a : Quantity of absorption site
		Q_f : Quantity of ion
		ϕ_f : Volume fraction of adsorbent