



Title	高温融体界面と分散相挙動の数値解析 : Smoothed Particle Hydrodynamics 法の製錬プロセス解析への応用
Author(s)	夏井, 俊悟; 梨元, 涼太; 問谷, 一偉 他
Citation	Journal of MMIJ, 135(8), 71-82 https://doi.org/10.2473/journalofmmij.135.71
Issue Date	2019-08-31
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/76022
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	journal article
File Information	Journal of MMIJ 135(8) 71.pdf





高温融体界面と分散相挙動の数値解析 * -Smoothed Particle Hydrodynamics 法の 製錬プロセス解析への応用 -

夏井 俊悟¹ 梨元 涼太² 問谷 一偉³
澤田 旺成³ 菊地 竜也⁴ 鈴木 亮輔⁵

Numerical Analysis of Interfacial Morphology and Dispersion Behavior of High-Temperature Melts - Application of Smoothed Particle Hydrodynamics to Metallurgical Processing Analysis -

by Shungo NATSUI^a, Ryota NASHIMOTO^b, Kazui TONYA^c,
Akinori SAWADA^c, Tatsuya KIKUCHI^d and Ryosuke O. SUZUKI^d

- a. Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University, Katahira 2-1-1, Aoba-ku, Sendai, 980-8577, Japan (Corresponding author, E-mail: natsui@tohoku.ac.jp)
b. Smelting Section, Saganoseki Smelter & Refinery, Pan Pacific Copper CO., LTD., 3-3382 Saganoseki, Oita-shi, Oita-ken, 879-2201, Japan
c. Graduate School of Engineering, Hokkaido University, Kita 13 Nishi 8, Kita-ku, Sapporo 060-8628, Japan
d. Faculty of Engineering, Hokkaido University, Kita 13 Nishi 8, Kita-ku, Sapporo 060-8628, Japan

The transient behavior of the multi-interfacial flow can be modeled using recent Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) model. This developed numerical method is fully-Lagrangian particle-based approach, which can track the movement of many fluid phase directly. The advantage of this simulation model is a direct calculation in both of dispersed phase and continuous phase seamlessly. Thereby this model estimates transient behavior of interfacial behavior by predicting the changes of each interface shape. For example, numerical simulations have been performed for different conditions corresponding to different values of surface tension, viscosity and density, and the predicted topological changes as well as the theoretical interfacial shape of droplets can be validated. Based on this model, we carried out relatively large-scale interfacial flow simulations, investigated case studies of metallurgical processing, and evaluated the non-steady state flow of formed from various dispersed phase.

KEY WORDS: High-Temperature Melt, Dispersed Phase, Metallurgical Process, Interface, SPH Method

1. はじめに

日常的に使用する金属のほとんどは、高温場で熔融状態とし、製錬反応を進行させることで純度を高め、生産されている。鉱石等の原料より金属を取り出す乾式製錬プロセスは、いずれも高温における酸化・還元反応によって金属を熔融状態で抽出するプロセスであり、鉄鋼・非鉄問わず、電解製錬を除けば原理的には同様の手法と言える。熔融状態の金属(メタル)、硫化物(マット)、酸化物(スラグ)などは、液-液間、液-気間、液-固間またはこれらが混在する状態ではたいへんバラエティに富んだ界面を形成することが知られている。また、熔融塩電解では、熔融メタル-熔融塩間で液-液界面を形成するが、電位印加の影響で電気化学的に特有の金属霧などの界面現象が生じる。このような高温界

面現象についてはこれまでに極めて多くの研究があり、またいくつかの良書にまとめられているが¹⁻³⁾、計測の困難さや高温場の不均一性の影響もあって、以下に示すように異相間で生じる諸現象の物理的描像は必ずしもコンセンサスを得不い。

Cu や Ni などの乾式製錬においては、金属相や金属含有マット相がスラグ中に分散する「スラグロス」が重要であるとされ、これは有価金属の微量損失でも経済性に与える影響が大きいのである。スラグ中に化学溶解する以外に、粒状になってスラグ中に留まる金属・マット相は機械的スラグロスと呼ばれ、これは一種のエマルジョンと見なされる。これらは粘性流体中の粒状体なので、Stokes 則に従って重力沈降して相分離が進行するモデルが与えられてきたが^{1,2)}、過酸化によって生じた固体マグネタイト相との接触やスラグ自由表面や懸垂など界面の力学的寄与によって必ずしも分離が進行しない。近年、懸濁粒子の界面電荷が及ぼすスラグ流動への影響も調査されており³⁾、非 Newton 流体として的高温融体挙動を検討する余地がある。

一方、熔融塩化物中で電解析出した金属液滴の挙動も興味深い。熔融塩電解では、カソード界面にバルクとして析出する液相以外に、前述のように強還元雰囲気下の霧状物質(金属霧)が生じることが古くから知られている。この分散相は Li 電解採取を目的とした場合には電流効率の低下を招くが、一方でバルク Li よりも

*2018 年 11 月 13 日受付 2019 年 1 月 28 日受理

1. 正会員 東北大学 多元物質科学研究所 助教 (元 北海道大学 大学院工学研究院 材料科学部門 助教)
2. パンパシフィック・銅工業 (株) 佐賀製錬所 製錬課溶錬係 主任 (元 北海道大学 大学院工学研究院 材料科学専攻)
3. 北海道大学 大学院工学研究院 材料科学専攻
4. 北海道大学 大学院工学研究院 材料科学部門 准教授
5. 正会員 北海道大学 大学院工学研究院 材料科学部門 教授
[著者連絡先] E-mail: natsui@tohoku.ac.jp
キーワード: 融体, 分散相, 製錬, 界面, SPH 法

強い還元力をもつ可能性があり、またカソード表面を不均一に生成することがわかってきた⁴⁾。Caを用いた場合、TiO₂など難還元性酸化物を効率よく還元でき、従来製錬法と比べ高いエネルギー効率での製錬が期待される⁵⁾。最近、著者らは熔融CaCl₂-LiClの電解によって生じる液体Ca-Li合金と金属霧の挙動について調べ、sub-mmスケールでの自発的な流れを観測した⁶⁾。この流動メカニズムは十分に解明できていないが、著者らによって新たな移動現象解明が検討されている⁷⁾。

鉄鋼製錬においては、分散相が様々な場面で顔を出す。例えば、製鉄プロセスの高炉内では、融着帯と呼ばれる領域で溶融した焼結鉱が溶融金属-スラグ相を形成して、コークスベッド中を滴下する。この二相融体は、気相との自由表面、固体との界面を介して接触しながら流動していく。このさいに融体が鉛直上方への気相流動に対する抵抗となることで、高炉の生産性が制限される要因となる。充填層中気相および液相の向流挙動の研究は主に化学工学分野で発展してきた。その一手法として水モデルによる模型実験があり、ホールドアップやフラiddiing現象について無次元相関から実炉内を予測する方法がある⁸⁾。近年、室温液体と高温融体でのホールドアップ傾向の違いが指摘されており、これは両者の物性が大きく異なるだけでなく、コークス表面の濡れが非定常に変化することが要因と考えられる⁹⁾。コークスの濡れ性を因子として無次元相関式の修正がなされたものの統一的理解はなく¹⁰⁾、溶融金属-スラグが同時に存在する場合の検討も少ない¹¹⁾。さらには2融体間の化学反応を伴う場合での界面挙動に関しては、界面への化学種の吸着モデル等による記述がなされているものの非定常場での界面変形メカニズムは未解明のままである¹²⁾。

このような複数の相から成る界面形態を検討するに当たり、界面エネルギーの釣り合いを考慮して解析的に求めるために、コンピュータを用いた予測法が発展してきた。例えば、Brakkeによって開発された“Surface Evolver”は、体積を固定した曲面の変分に関して局所面積が最小となるように曲面を動かす(離散的な曲面は三角形から構成される)、界面エネルギーが最小となるときに液相形態を求めるプログラムである¹³⁾。これによれば、直感的に理解し難い平衡界面形状でもコンピュータ上で可視化することができる。このような平衡状態における界面形状理解の重要性は無論である。しかし、実プロセス解析の難しさは時々刻々と変化し続ける界面状態を含む総体として理解することにある。すなわち、融体が動的な状態にある場合には、界面エネルギーバランスのみならず、各相の物理量(質量、体積、運動量など)の保存性を担保した上での運動方程式を解かなければ、実プロセス内の状態を理解することは難しいと思われる。

2. 分散融体界面の力学的記述

融体界面の動力学を包括的に考察していくためには、専用の数値シミュレーションのフレームワークが必要であり、流体力学を基礎とする移動境界問題の数値シミュレーションの拡張が有用である。数値流体シミュレーションは、従来、有限差分法、有限体積法、有限要素法のように、計算対象領域を計算格子で分割(離散化)して、計算点上での流速や圧力などを追跡する手法が主に用いられてきた。この計算格子を用いる手法(格子法)では、格子内の各相の体積割合で平均化する2流体モデルを除けば、相間の境界を正確に捉える方法について、現在まで多くの研究がなされ改良が加えられて、現在では、より洗練された以下の2つのアプローチが主流となっている。すなわち、界面追跡法(ALE法、Space-time法など)は、気液界面を移動変形格子によって直接的に追跡する方法、一方、界面捕獲法(VOF法、Level-set法、Phase

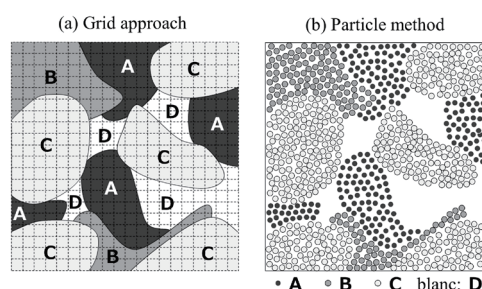


Fig.1 Schematic diagrams of spatial discretization of dispersed multi-phase system in high-temperature metallurgical process.

field法、Front-tracking法など)は、固定格子上に界面関数を定義し、間接的に界面位置を捕捉する方法である。これらの詳細はすでに多くの文献^{例へば14-16)}があるので省略させて頂き、上述の分散する複数の相からなる製錬プロセスへの適用を考えてみる。Fig.1にA, B, C, Dの4相からなる系の数値力学的な空間の離散化について模式的に示す。本系は、例えば高炉内の溶鉄、スラグ、コークス、ガスに相当する。VOF法を例に考えると、Fig.1a)に示す分割された格子内を相境界が横切っていることがわかる。このとき、時間とともに相の移動が生じると考える。界面形状プロファイルの情報を考慮に入れないで、相の体積分率の移動のみを考えた場合、数値誤差が蓄積してしまい、やがて相間の境界がぼやけてしまう。この問題は格子法の宿命であり、現在の洗練された界面移動アルゴリズム(THINC-WLICやVOF-PLIC等¹⁵⁾)を用いたとしても、分散する多相流では厳しいことが想像される。さらに、例えばA-B-D3相界面では界面張力を考慮する必要があるが、3次元空間での曲率計算の複雑さが数値解析を困難なものにしてしまう。

上述の問題を解決するため、流体を粒子の集合体と考え、それらを追跡することで運動を記述する方法(粒子法)が、2000年代以降のコンピュータの発展とともに急速に発展した。本法は、Fig.1b)に示すように、変形する界面は粒子によって直接的に表現される。大きく変形する解析にも高いrobustnessを有するとされ、汎用性の高さが最大の特徴である。界面張力も粒子間に働く力を積算すれば良いため、後述するように非常にシンプルで、上述の問題に対して有効である(Hooverは本法では表面粒子の規則配列などの数値解法上の困難が生じると述べた¹⁷⁾が、最近では緩和されてきている)。また、気相のように運動量が十分小さく無視し得る場合には、D相のように粒子を配置することなく、これと接する異相粒子を自由表面として取り扱うことも可能で、解析系に合わせた柔軟性がある。一方で粒子法には短所もある。特に、粒子配置不均一性による圧力擾乱の問題は長年の課題であり、黎明期のアルゴリズムでは致命的な計算誤差を与えてしまう。そのため、格子法と比べ著しく計算精度が劣ると考えられてきた。現在では、解析アルゴリズムの研究進展によってその欠点は大きく緩和されてきている。さらには並列演算ユニットとの相性も比較的良く、大規模シミュレーションによって高精度な解析も可能である。

3. SPH法とその応用

著者らは、2014年よりSmoothed Particle Hydrodynamics (SPH)法に着目し、従来困難であった乾式製錬プロセス中の分散融体の力学的記述に取り組んできた。SPH法は、今日の粒子法シミュレーションの起源である古い方法で、もとは天体物理学における圧縮性流体の解析法であった。1970年代に英国ケンブリッジ大学のL. B. Lucyによって開発され、SPH法の基本概念と式の展開が論文として発表されたのは1977年で¹⁸⁾、そのほぼ直前にGingold

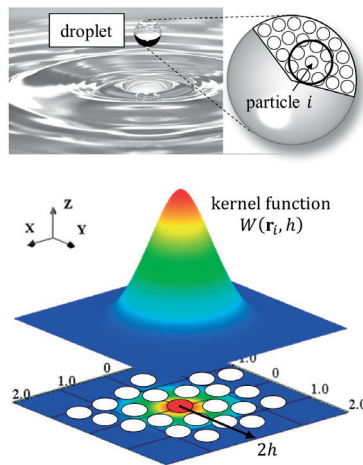


Fig.2 Descriptions of a distribution of physical quantity by the SPH approximation.

and Monaghan¹⁹⁾によって発表された論文で SPH 法という用語が初めて使用された。その後、Monaghan らのグループによって様々な応用研究がなされ、その応用範囲は工学、惑星科学、海洋学、情報科学に至るまで多岐にわたり、多くのモデルが提案されてきた²⁰⁻²⁴⁾。したがって、一言で SPH 法と言っても本稿で全てを紹介することは難しい。類似の計算手法である Moving Particle Simulation (MPS) 法や離散要素法 (Discrete Element Method, DEM) などとともに体系的にまとめた文献²⁵⁻²⁸⁾が近年刊行されているので、網羅的に粒子法を習得されるためにはこれらを参照していただき、本稿では、微弱な圧縮性に対応するように改良された Weakly-Compressible (WC) -SPH 法²⁹⁾を一般的な SPH 法と呼称して、あまり本法に馴染みのない方を対象に概説したい。

3・1 SPH 法の基礎的な考え方

繰り返しになるが、流体を（任意に与えられた）有限個の粒子に離散化し、各粒子座標と粒子のもつ物理量の時間変化と計算することで、流体の運動を記述するのが SPH 法の特徴である。この方法の最も重要な概念は、「ある物理量（例えば密度、速度、圧力、温度、濃度など）が各粒子の中心から特徴的な長さをもって広がっており、空間の任意の場所の物理量が各粒子の足し合わせで表現される」ことである。SPH 法では、kernel 関数（物理量の分布状態を規定する関数）を用いることにより、粒子が持つ物理量の空間分布をなめらかに表現し、分布の重なり合いによって各粒子座標における物理量を決定する。Fig. 2 にこのことを模式的に示す。ある粒子 i が持つ物理量 $f(\mathbf{r}_i)$ は、その粒子の有効半径内 Ω にあるほかの物理量分布の体積分により、以下のように計算される。

$$f(\mathbf{r}_i) = \iiint_{\Omega} f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r}, h) dV \quad (1)$$

つまり、計算点 $\mathbf{r}_i$ 周囲に分布する物理量を積分補間することで、ある点における物理量を求めるのが SPH の基礎となる近似である。ただし、kernel 関数は、以下の条件を満たす必要がある³⁰⁾。
条件 1: 有効半径内で規格化されていること（正規化）:

$$\iiint_{\Omega} W(\mathbf{r}, h) dV = 1 \quad (2)$$

条件 2: 有効半径外では 0 となること (compact support という):

$$W(\mathbf{r}, h) = 0, \text{ if } |\mathbf{r}| > h \quad (3)$$

条件 3: h の極限が Dirac のデルタ関数に収束すること (smoothing length h がゼロとなる極限では kernel 関数による近似が関数 f に一致):

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{r}, h) = \delta(\mathbf{r}) \text{ or } \lim_{h \rightarrow 0} [f(\mathbf{r}_i)] = f(\mathbf{r}_i) \quad (4)$$

条件 4: $|\mathbf{r}_{ij}| = 0$ に対して対称な偶関数であること

条件 5: 影響半径内のすべての座標において正の実数であること
これらの条件を満たす kernel 関数として、高次の spline 関数（区間多項式）を用いたものが主流である。著者らは、式形の煩雑さを避け、かつ密度差の大きい流動現象に対して有効と報告されている 3 次元 Wendland の kernel をよく用いている³¹⁾。本来の Lagrange 的記述を保持するため（粒子が密集したところでは高解像度、低密度領域では低解像度になってしまう）、 h の範囲内に存在する粒子数を一定にするように h を調整するのが望ましいが、流体計算の場合には計算コスト低減のために固定値を用いることが多い。

以上の SPH 近似を用いると、各粒子 j の質量を m_j としたとき、粒子 i の密度 ρ_i は、以下のように表現される。

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (5)$$

3・2 微分演算

流体運動の記述には、微分演算子の数値モデル化が必要となるが、前述の SPH 近似によって非常にシンプルに表すことができる。物理量の勾配 $\nabla f(\mathbf{r}_i)$ は、式 (1) の積分補間より以下のように表される。

$$\nabla f(\mathbf{r}_i) = \iiint_{\Omega} \nabla f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r}, h) dV \quad (6)$$

(6) 式右辺は、部分積分によって以下のように展開できる。

$$\begin{aligned} \iiint_{\Omega} \nabla f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r}, h) dV &= \iiint_{\Omega} \nabla \{f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r}, h)\} dV \\ &\quad - \iint_{\Omega} f(\mathbf{r}') \nabla W(\mathbf{r}, h) dV \end{aligned} \quad (7)$$

一般に、Gauss の発散定理を用いて右辺第 1 項は面積分に変換され、前述の条件 2 を利用して領域の外縁曲面 S で $W(\mathbf{r}, h) = 0$ となるので、

$$\iiint_{\Omega} \nabla \{f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r}, h)\} dV = \iint_S f(\mathbf{r}') W(\mathbf{r}, h) \cdot dS \cong 0 \quad (8)$$

したがって、物理量の勾配 $\nabla f(\mathbf{r}_i)$ は偶関数である kernel の対称性を考慮して以下のように書ける。

$$\nabla f(\mathbf{r}_i) \cong \iiint_{\Omega} f(\mathbf{r}') \nabla W(\mathbf{r}, h) dV \quad (9)$$

この近似を (5) 式のように粒子ベースで表記すると、圧力や速度など密度以外の物理量の空間分布は、各粒子の中心位置における密度 ρ_j と物理量 f_j を用いて表すことができる。

$$f_i(\mathbf{r}_i) = \sum_{j=1}^N m_j \frac{f_j}{\rho_j} W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (10)$$

この勾配は、

$$\nabla f_i(\mathbf{r}_i) = \sum_{j \neq i}^N m_j \frac{f_j}{\rho_j} \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (11)$$

(11) 式によって微分演算を行うのが本法の肝心なところであり、

一般的に用いられるので“標準 SPH”と言える。

現在では、この素朴な仮定を用いた場合、相境界の近傍粒子に正確な解をもたらさない可能性が指摘されている³²⁾。すなわち、(8) 式の近似を用いることは、 h の外縁で kernel がゼロ (条件 2) になるため、密度分布が平滑化されない。粒子の分布が不均一となる場合、界面付近で密度・体積・質量の 1 次の“consistency”が満たされず、計算誤差が蓄積することになる。このことは圧力の振動 (擾乱) に現れ、粒子の微振動に影響することが知られている。通常、この数値的エラーは十分小さいため無視しても差し支えない場合も多いが、分散相が多数存在する問題においては顕在化して、まったく異なる解を導いてしまうこともある。これを避けるため現在も多くは数学モデルが検討されており、応用数学者の腕の見せ所となっている。著者らは、素朴な近似で計算が容易な (11) 式を利用しながら、密度を再計算するアプローチを採用している。例えば、付帯条件付き多次元移動最小二乗法 (multidimensional moving least-squares interplant with constraint condition, C-MLS) は、空間的に少なくとも 1 次精度を有し、小規模の振動ノイズを除去することで実用上十分な計算精度を得ることができ、かつアルゴリズムがシンプルで計算負荷もそれほど大きくないという利点を有する^{32, 33)}。

3・3 流れの解析

Monaghan (1994) によって始められた SPH 法を非圧縮性流体解析への適用は、圧縮性流体を対象とした従来のアルゴリズムを非圧縮性流体に応用したものである。この方法の目標としては、非圧縮性流体の支配方程式である連続の式と Navier-Stokes 方程式を時間発展的 (陽的) に解くことである。Lagrange 的描像における流体運動の基礎方程式は以下のように書ける。

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (12)$$

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{g} + \frac{1}{\rho} \mathbf{F}_s \quad (13)$$

さらに、密度と圧力を関係づける状態方程式を導入することで方程式系を完結するのが WC-SPH 法の特徴である。今、単純な断熱系で $p\rho^{-\gamma} = \text{const.}$ 、流体は等エントロピーである場合を考えると、Tait の状態方程式において、圧力は密度のみの関数で表される。

$$\frac{p+B}{p_0+B} = \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\gamma} \quad (14)$$

γ は比熱比であり、気体で 1.4、液体で 7.0 が広く用いられている。Monaghan²⁴⁾ によれば、基準圧力 $p_0=0$ として

$$p = B \left\{ \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\gamma} - 1 \right\} \quad (15)$$

ここで、音速 $c = \sqrt{\partial p / \partial \rho}$ を用いて、

$$c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho} = B \frac{\gamma}{\rho_0} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\gamma-1} \quad (16)$$

が得られる。Morris et al.³⁴⁾ は、 $\rho = \rho_0$ のとき $B = c^2 \rho_0 \gamma$ となることを利用して、以下のように標準的に用いられる状態方程式を得た。

$$p_i = \frac{c^2 \rho_0}{\gamma} \left\{ \left(\frac{\rho_i}{\rho_0} \right)^{\gamma} - 1 \right\} \quad (17)$$

ただし、 c に実際の物性値を代入すると非常に大きな圧力となり相当に小さな時間刻みが要求されるため、現実的な数値解析は実行できない。そこで、SPH では密度変化が極小 (体積変化 1% 以下)

かつ最大の時間刻みとなるように c を最適化して与えることが肝要である³³⁾。

さて、ここでは簡単のために粘性力、重力、表面力を無視して、(13) 式右辺の圧力勾配項のみを考え、流れの解析手順を概説する。

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \quad (18)$$

(18) 式は高圧領域から低圧領域へ加速度が生じることを表す。圧力勾配項には、粒子間の asymmetric 問題 (i と j 間の作用・反作用に反する立式) を回避するためにこれまで様々な改良が加えられ、現在では一般に下記のとおり定式化されている。まず、分数関数の微分から、

$$\nabla \left(\frac{p}{\rho} \right) = \frac{\nabla p}{\rho} - \frac{p}{\rho^2} \nabla \rho \quad (19)$$

であるので、(11) 式で表される SPH 近似を用いて (18) 式右辺の離散化を以下のように行う。

$$\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i(\mathbf{r}_i) = \frac{p_i}{\rho_i^2} \sum_{j \neq i}^N m_j \frac{\rho_j}{\rho_j} \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) + \sum_{j \neq i}^N m_j \left(\frac{p}{\rho} \right)_j \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (20)$$

したがって、(18) 式は、

$$\frac{D\mathbf{u}_i}{Dt} = - \sum_{j \neq i}^N m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} \right) \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \quad (21)$$

と離散化でき、(21) 式は i と j に対して反対称となるため作用・反作用の法則を満たすので、標準的に用いられる。さらに、密度は (5) 式、圧力は (17) 式によって求めることができるので、粒子 i の加速度が計算できることになる。 i 粒子の中心座標の移動が、

$$\frac{D\mathbf{r}_i}{Dt} = \mathbf{u}_i \quad (22)$$

に従うとすれば粒子座標を以下の手順で更新できる。ある任意の時刻 (n ステップ) で、全粒子の質量、位置、速度、密度、圧力がわかっているとすれば、 $n+1$ ステップ目の粒子 i の速度と位置座標は、時間 1 次精度の前進差分法により有限の時間刻み幅 Δt を用いて、以下のように表すことができる。

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_i^{n+1} &= \mathbf{u}_i^n - \Delta t \cdot \sum_{j \neq i}^N m_j \left(\frac{p_i^n}{\rho_i^{n2}} + \frac{p_j^n}{\rho_j^{n2}} \right) \nabla W(\mathbf{r}_{ij}^n, h) \\ \mathbf{r}_i^{n+1} &= \mathbf{r}_i^n + \Delta t \cdot \mathbf{u}_i^n \end{aligned} \quad (23)$$

この解法は陽解法とよばれ、シンプルな時間発展アルゴリズムである。 $n+1$ ステップ目の粒子座標と速度から $n+1$ ステップ目の密度と圧力が求まり、 $n+2, n+3, \dots$ と帰納的に計算が可能である。以上は基礎的な SPH 法についてのみ概説したが、実際には、実現象を精度良く追跡するために時間差分には 2 次精度以上が望ましく、また、粒子の過剰接近や衝撃波の問題のために適切な人工粘性項を付加するなどの工夫が施される。現在では、空間 2 次精度を有し、Riemann solver という衝撃波面を正しく捉え高速に計算することができる方法を SPH に導入することで人工粘性の利用を回避する Godunov SPH 法が注目されている³⁵⁾。

3・4 SPH 法の長所と課題

SPH 法は、前述から明らかなようにシンプルな陽解法、本質

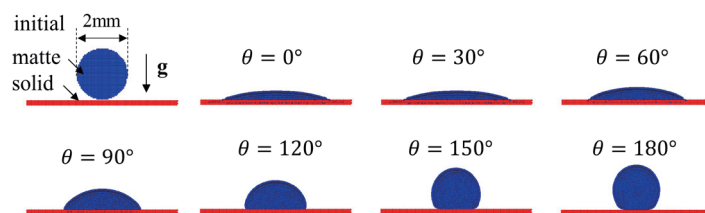


Fig.3 Calculated droplet shapes at different contact angles depending on interfacial potential ratio between solid and molten matte.

的に3次元向きアルゴリズム、境界条件への特別な配慮が不要、比較的高速で並列演算も可能という利点を有している。また、粒子が存在しない領域は計算しないので、気相や真空に対しても格子を張り巡らすなどの配慮も不要である。また、次節で述べるように2相以上の物質への取り扱いも容易である。

一方、短所として、密度のゆらぎの存在、各時刻での粒子間距離計算のコストが大きい、などがあげられる。SPH法では、数値的安定性を確保するため、非物理的な人工粘性の導入が不可避とされている。人工粘性は、運動量を散逸させる効果を持ち、解の信頼を損なう恐れがある。その性質は、常に運動エネルギーの熱散逸的である必要があり、回転や圧縮に対する粘性が発現しないように特別な配慮が必要となる。人工粘性なしに非圧縮性流体を解析するため圧力に対して陰解法を適用したのがMPS法で、SPH法にも同様のアルゴリズムを適用することができる(ISPH)が³⁶⁾、連立1次方程式を解く必要があるため、時間ステップ単位での計算量が大きくなる。 δ -SPH³⁷⁾は、連続の式に人工拡散項を導入して、密度勾配を1次精度で記述する方法で近年広く研究されており、有望なアプローチの一つと思われる。その他、前述のGodunov SPH法など種々の高精度化手法が提案され、文献中に詳細にまとめられている²⁸⁾。

高温素材プロセス分野の研究においては、ユーザーとして対象となる問題に対して、何をどこまで明らかにしたいのか、そしてどのアルゴリズムを選択すれば良いのか、正確に見極める必要がある。そのさいにSPH法は、わずかなアルゴリズムの変化でも計算速度が低下しやすいことにも注意が必要である。アルゴリズムによっては10倍程度の速度変化は普通であり、その場合、1日で計算が終了するものが10日以上もかかってしまう。粒子間距離の計算は計算速度のネックとなる原因の一つである。差分格子を用いて周囲粒子を検索する方法にボクセル法(またはバケット法)があるが、この格子サイズを適切にしないだけで大幅に減速してしまうこともある³⁸⁾。

4. 複数の相が共存する系に対応した界面張力モデル

界面(ここでは表面の意も含む)の液相分子は、分子間に作用するvan der Waals力により、バルク側よりもエネルギーが高い状態にあるため界面積を減じる方向に力が働く。このような界面張力は単位面積あたりのHelmholtzの自由エネルギーであり、等温過程で仕事として外部に取り出される。SPH法においては、界面張力の計算方法としてVOF法などと同様にContinuum Surface Force (CSF)モデル³⁹⁾に基づく方法が主流である⁴⁰⁾。CSFモデルは、表面張力を粒子単位の体積力に変換するアプローチであり、気液界面を挟んで値が0から1に変化するカラー関数を用いるか、影響半径内の粒子数に基づいて、界面の曲率と法線ベクトルを求めることで界面張力が計算される。一方、系の平衡状態において極小となるエネルギーを定義し、この勾配に対して力が働く界面自由エネルギー理論に基づいたCahn-Hilliard model⁴¹⁾が用いられることもある^{42, 43)}。SPH法の実際の3次元計算において、粒子

分布の不均一化により界面近傍の曲率と法線ベクトルを精度良く求めることは容易ではない⁴⁰⁾。解決策として例えば、補助評価点の挿入⁴⁴⁾、MPSと組み合わせた曲率算出に特化したkernelの利用⁴⁵⁾による高精度化などが提案されているが、数学的な煩雑化は避けられない。

一方、van der Waals力と本質的に同じ力を与えるポテンシャルモデル⁴⁶⁾も広く用いられる。元々固体の濡れ性を表現するために開発された本法の長所は、分散する多相界面の記述を容易にする実用性にある。ポテンシャルモデルを用いた場合には、界面幾何の厳密さを多少犠牲にする代わりに、界面曲率と法線ベクトルの計算や、各粒子の界面判定を行う必要がない。また、後述するように本稿で対象とする多くの相境界が存在する場合でも計算のrobustnessを有することが最大の利点である。以下、簡単にこの方法を説明する。分子間に働くvan der Waals力は、Lennard-Jonesモデルによって距離に応じて引力・斥力が切り替わる特性が与えられるので、ポテンシャルモデルではこれと同じアルゴリズムを採用して、界面張力を以下のように近似する。

$$\mathbf{F}_{s,i} = E \sum_{j \neq i}^N \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|} \quad \dots \dots \dots (24)$$

ここで、界面張力の大きさに関する係数 E とポテンシャル関数 ϕ は、粒子単位での界面が保持している界面エネルギーと固液界面エネルギーを関連付けることで理論的に与えることができる^{47, 48)}。係数が解像度に依存すること⁴⁹⁾が指摘されており、Nakano and Itoは無次元化したポテンシャルを提案している⁵⁰⁾。

多相界面において粒子間に生じる力は、例えばFowkesの仮説を適用することでモデル化できる⁵¹⁾。AおよびBの非混和性2液相が界面で接触する場合、同相側への引力がそれぞれ表面張力と等しいとして σ_A 、 σ_B とし、異相側の引力を σ_D とおく。Aの界面粒子が受ける力 $\sigma_A - \sigma_D$ とBの界面粒子が受ける力 $\sigma_D - \sigma_B$ の差分が界面張力 σ_{AB} であると考え、

$$\sigma_{AB} = \sigma_A + \sigma_B - 2\sigma_D \quad \dots \dots \dots (25)$$

と与えられる。この定式化を用いれば、 σ_A 、 σ_B 、 σ_{AB} を物性値として σ_D を計算することで、多相界面の力学解析が可能となる。Fig. 3に平滑な固体表面上のマット液滴形状解析の結果を示す。本問題では、重力下において、径1mmの液滴が固体に接触する。濡れ性を表す液滴の静的接触角 θ は、気-液-固3相それぞれの界面エネルギーバランスで決定され、Youngの式を考慮すれば $\sigma_D = 1/2 \sigma_m (1 + \cos \theta)$ で与えられる。計算粒子に有限の厚みが存在することから、超親水側の液滴の3相界面には粒子径分の厚みが残るが、各接触角 θ に対応した液滴形状が定性的に得られている。また、Fig. 4に3液相の衝突解析結果を示す。3相ともマットと同じ物性、および同じ各界面には同じ界面張力を代入している。時間の経過とともに各相は表界面積を小さくするように変形して、力学的平衡形状に近づく。各物性は単純な条件であるが形

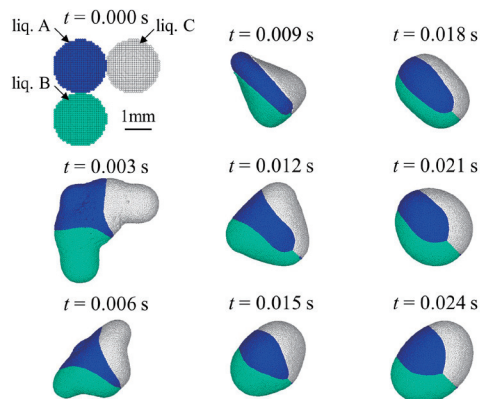


Fig.4 Time change in calculated 3 immiscible droplets shape.

状の時間変化は直感的に想像するのが難しく、液滴初期配置や運動量にも影響を受ける。本解析は、分散液滴の界面形状変化の直感的なイメージを我々に与え、結果を整理していく過程での現象理解を深めることができる。

5. 解析例

本章では、SPH法を用いて著者らが行ってきた乾式製錬プロセスにおける解析事例を紹介したい。

5・1 銅マット-スラグの界面

(液滴衝突による液-液-気界面の変形)

銅製錬の自溶炉工程においては、シャフト上部より銅精鉱粒子とフラックス粒子をバーナで吹き込むことで反応を進行する。両粒子は酸化・溶融しながらシャフト部を落下し、熔融硫化物であ

る銅マット相と熔融スラグ相に分離する。この落下液滴はセトラ部に滞留するスラグ相に衝突し、比重の大きなマット相が底部に沈降する。この際、スラグ中にマット液滴が懸濁・残留すると銅分の損失となるので、マット相の懸濁を低減させることが銅の回収率増加に直結する。そのためには平衡論に基づいた理解のみならず、熔融マット-スラグ界面における動力学解析により操業設計をすることも重要と考えられる。

自溶炉の反応シャフト内の燃焼現象を記述する数学モデルとして、精鉱の分解と酸化反応メカニズムを未反応核モデルで記述する方法や、精鉱粒子同士の衝突・合体による粒成長と反応を組み合わせた方法(2粒子モデル)が開発されている^{52, 53)}。佐々木らは一連の研究で、これらの精鉱粒子挙動モデルを参照し、Particle-Source-In-Cell (PSIC) 法を用いて数値流体力学に導入し、熱物質移動を総括的に扱う方法を開発した⁵⁴⁻⁵⁷⁾。本法は、液滴相を粒子、気相を連続体として近似するEuler-Lagrange法であり、Fig. 5に示すように様々な炉内情報を予測することができる(文献⁵⁵⁾より転用)。落下中の精鉱挙動はFig. 5a, b)に示す2粒子モデルに基づいて与えられる。2粒子モデルはバーナーコーンから射出された熔融マット-スラグが所謂コア-シェル構造を作ることとを仮定している。著者らは、2液滴が接触することで形成する界面形態をSPH法により求めた。計算例をFig. 6に示す。Fig. 6a)に示すように、AとBの表面張力 σ_A , σ_B を一定としてA-B間界面張力 σ_{AB} を種々変更した場合、A-B-気相三重線の界面張力のつり合い(ノイマンの三角形)によって形態が決定され、SPH法においてもコア-シェル構造あるいは部分的に濡れた構造が求められる。2粒子モデルのようなコア-シェル構造は界面張力が十分小さい場合に限られ、多くの場合は部分濡れの形態となる。Fig. 6b)にはメタル-スラグの代表的な物性を代入した場

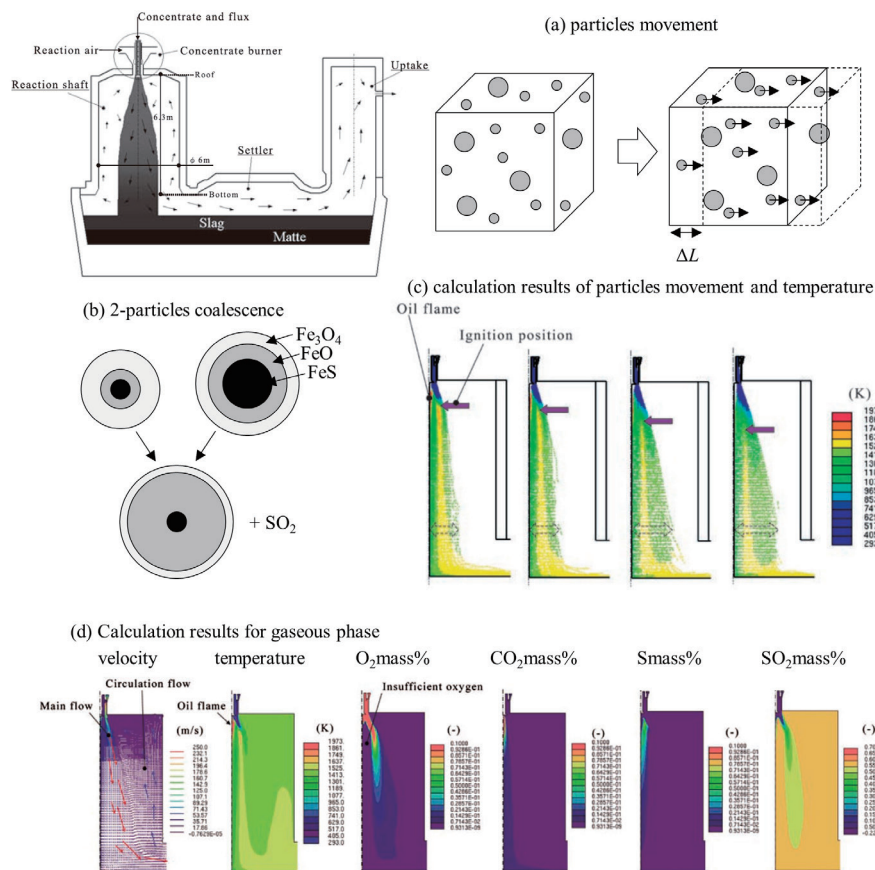


Fig.5 Numerical study of combustion of concentrate particles in flash smelting furnace by Sasaki et al.

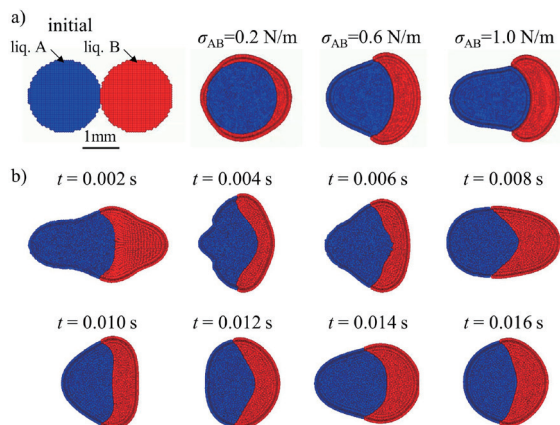


Fig.6 Calculated static 2-droplets shapes depending on interfacial tension ratio between 2-liquids. To highlight change in interface, they are displayed in vertical cross sections. (a: $\sigma_A=1.2$ N/m, $\sigma_B=0.48$ N/m, b: $\sigma_A=0.4$ N/m, $\sigma_B=0.3$ N/m, $\sigma_{AB}=0.1$ N/m)

合の動力学的な変形挙動を示しており、2液界面の振動が粘性によって減衰していく様子がわかる。このような変形を伴った液滴の自溶炉内での挙動を明確に理解することは今後の検討課題として興味深い。一方、液相界面の流動および反応の進行によるSO₂ガス発生が精鉱粒子運動に与える影響も少なからず考えられる。高橋と武部は、固体の銅精鉱-珪石をAr雰囲気制御下で急速加熱及びair吹付けを行う系を対象に、Hot Thermocouple法により銅精鉱の酸化熔融挙動の直接観察結果を報告している^{58, 72)}。熔融マット-スラグ相分離挙動はairの流量に依存して全く異なる挙動が見られる。著者の一人は、愛媛大学にて同グループとの共同実験に参加させていただく機会を得て、Fig. 7に示す高速顕微鏡カラー画像を得た。a)に示す二相分離に対して、air流量を増加させた(b-1)においては急激な発熱を伴ったマグネタイト生成が反応開始から0.5s程度で完了している。また、このとき(b-2)に示すようにマイクロ秒スケールでのガス発生が継続的に生じており、常に反応界面は攪拌された状態にある。上記モデル解析と合わせた動力学的な理解に基づいたプロセス設計が期待される。

5・2 熔融メタル-スラグ界面の気泡による変形

(単一気泡による液-液界面流動)

金属精錬専用の転炉では、熔融金属相中に大きな圧力で酸素富化空気を吹き込む操作がなされる。酸素が熔融金属中の不純物と反応することで、燃焼熱とともに熔融スラグを形成する。熔融メタル-スラグは比重差によって分離が進行する。相界面に着目すると、気泡通過に伴って反応界面積増加するため製錬反応が効率化することは明白である。よって、熔融金属相中への気相の効率的な吹き込み技術が、水モデル等を用いた可視化技術によって古くから研究されてきた。一方で、転炉内での気液界面形状の変動は高速かつ大きく変形するため複雑であり、実験的な予測が極めて難しい。

言うまでも無いが、数値解析により炉内流動挙動を追跡するアプローチは、界面形状を三次元的に取得することができる。著者らは、SPH法を利用した気-液-液3相モデルの開発に取り組んだ。高温の気-液間密度比は10³以上のオーダーであるため、気液界面における気相粒子は非常に大きな加速度が与えられ、現実には生じない液中浸透が生じるが、圧力項に付加的なrepulsive forceを加算することでこれを抑制する方法を用いて対症療法的に解決できる⁵⁹⁻⁶¹⁾。この操作は、非物理的な液中浸透を防ぐために非物理的な力を与える操作であるから、注意深く実験系を良く再現するか見極めることが必須であり、今後も継続的に検討がなされ

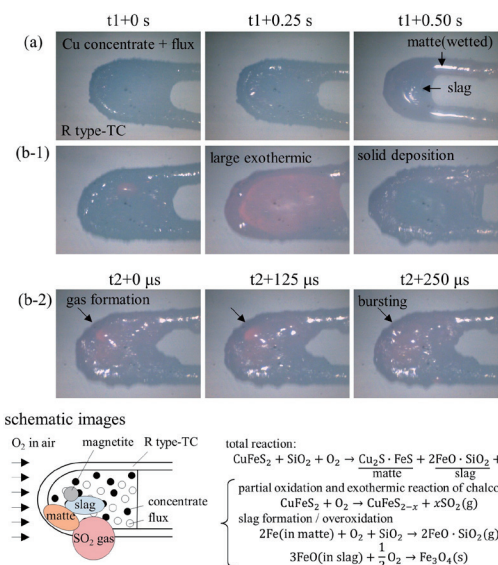


Fig.7 High-speed visualization of combustion / melting phenomena of copper concentrate by hot thermocouple method (frame rate: 8000 fps). The reaction starting time at which first gas evolution occurs by air blowing is t1, and the arbitrary time during combustion reaction is t2. (a: the condition formed by the matte-slag 2-phase interface, b: air flow rate was increased)

る必要がある。この問題への本モデルの応用例として、Fig. 8に2液相を通過する単一気泡と界面挙動の変化を示す。初期条件として静置されたメタル相とスラグ相、また、メタル相中に単一球形状気泡を配置し、二液相間の界面張力を変化させてケースワークを行った。上昇気泡の下部にメタル相が液柱状になってスラグ相に貫入していく様子が見られ、界面張力の増加に伴い液柱の破断が短期化した。液柱の破断時間によってメタル-スラグ間界面積が特徴づけられ、このような予測は本法のユニークな結果の一つであろう。しかし、残念ながら解析スケールリミットのため気泡上部に生じる薄い液膜の影響までは解析できていない。液相界面に生じる複雑な流れ場、応力場の物理モデル化についてはここでは詳述を避けるが、上述現象における液膜維持時間の影響は無視できず今後の課題として残る⁶²⁾。

5・3 コークスベッド中の溶銑-熔融スラグ

(固-気-液-液4相共存場の流動)

製鉄プロセスでは、高炉内に充填されたコークス層中を溶銑した溶銑とスラグが滴下していく。高炉では、充填層中を還元性ガスが下部から移動する構造のため、鉄鉱石の相変化により生成する融体の滴下がカウンターフローとなり通気を阻害する。特に、近年ではCO₂排出量削減を指向したコークス量低減が、通気・通液をより難しくする。

充填層内の流動より明確な理解のため、著者らはSPH法を利用した詳細なシミュレーションを実施した。まず、高炉下部を模擬したコークスを回転強度試験法によって作製、3Dスキャナを用いてサンプル表面座標を取得した。さらに三角形メッシュで表面形状をポリゴン化、Level set関数を用いてコークス内部に粒子を配置することで、Multi-sphere型DEM⁶³⁾による充填構造を得た。Fig. 9に約1300万粒子を用いた計算例を示す(文献⁶⁴⁾より転用)。Fig. 9a, b)に示すように、コークス充填構造がシミュレートされた。Fig. 9c)は、これを境界条件として熔融スラグ(1773 K, 40mass%SiO₂-40 mass%CaO-20 mass%Al₂O₃)の流れをSPHによって計算した例である。熔融スラグは一定の流路を通過し、静的ホールドアップサイトが充填構造中に点在していることがわかる。Fig. 10に各塩基度(CaO/SiO₂, C/S)の熔融スラグに対応するホールドアップサイトを示す(文献⁶⁴⁾より転用)。塩基度の低

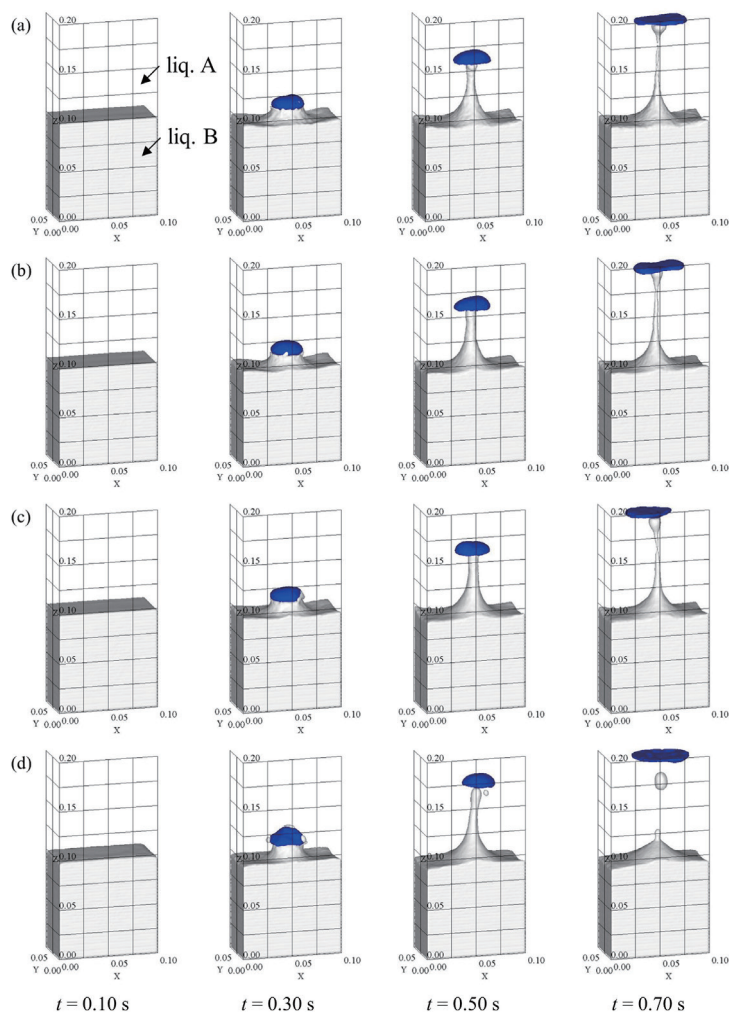


Fig.8 Calculated snapshots of single gas bubble rising through the interface of a liquid phase A and B with various interfacial tension (interfacial tension σ_{AB} is set as a: 51, b: 102, c: 204, 408 mN/m). To highlight change in three-dimensional interface, liquid B is not displayed. Volume of single bubble was set as $7.2 \times 10^{-6} \text{ m}^3$.

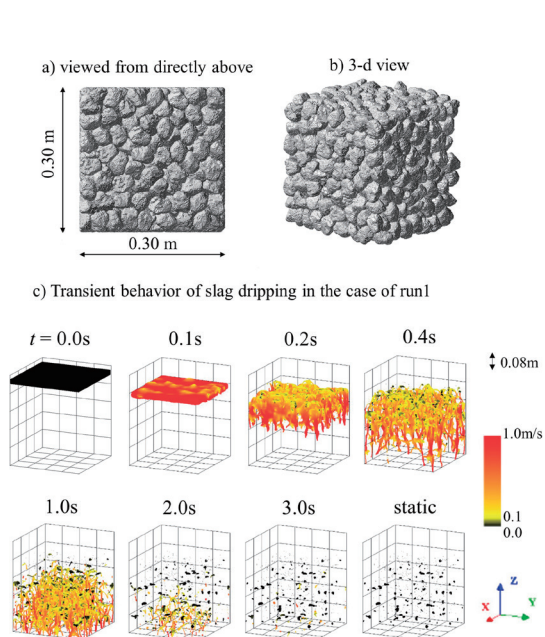


Fig.9 a, b) : packed structure obtained by DEM calculation with 600 cokes with 6 different shapes. c) Snapshots of slag dripping velocity distribution.

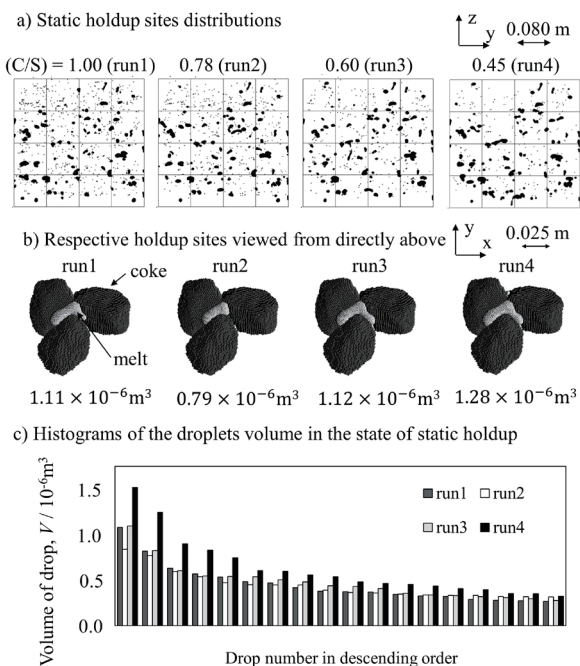


Fig.10 Influence of basicity on distribution of holdup sites. (basicity CaO/SiO_2 in run 1: 1.00, run 2: 0.78, run 3: 0.60, run 4: 0.45, $T=1773 \text{ K}$)

下によって表面張力・密度は低下、粘度は増加する。Fig. 10a) に示すように滞留する液滴サイズは、低塩基度の方が大きく、全体的に分散滴が少なくなっている。一方 Fig. 10b) に示す共通の代表的ホールドアップサイト、および Fig. 10c) の滴サイズのヒストグラムを見ると、液滴サイズは塩基度に単調変化しない。融体が通液できない毛管長 $\kappa^{-1} = (\sigma/\rho g)^{1/2}$ 以下の通液パスに液滴は滞留するが、静力学的なパラメータである重力と表面張力との比のみならず、粘性による流路変化がホールドアップに影響を与えることが示唆される。最近、コークス表面で熔融スラグと溶銑が接触すると、毛管長以下の間隙を通過できる可能性が指摘されている⁶⁵⁾。著者らは現在、SPH 法を用いて、本現象について検討しており、シミュレーションの例を Fig. 11 に示す。本計算はコークスが非濡れの場合を示しており、乱数的に配置された溶銑と熔融スラグは早急に比重分離が生じ、溶銑が先に滴下する。本系においても各相間の界面張力が流れに少なからず影響することが考えられ、様々な系について数値実験を試行できる本モデルは、今後の不透明な原料事情に対応する非経験的な理解を助けるツールとして役立つと考えられる。

6. お わ り に

本稿では、代表的な粒子法シミュレーションのひとつである SPH 法を用いた複数の相からなる界面の移動解析について概説した。著者らは、SPH 法のユーザーとして高温素材プロセスの研究者の立場から、本法の広い応用展開の可能性を見出すことができた。これは近年のコンピュータ性能の向上や、応用数学的立場からのアルゴリズム改良によってもたらされた恩恵によるものであり、計算精度など本法の従来の制約が大きく緩和されたことを示している。そして現在もお両者の進化は留まることがなく、これは誠に驚くべきことである。将来、大規模演算処理に優れたマルチコアプロセッサの普及によって、より手軽に複雑な分散相の流動を解析できるようになると考えられる。このような計算機資源を最大限利用することとともに、製錬プロセスにおいてキーとなる知見を如何に抽出するかが高温素材プロセスの研究者にとって重要であることは言うまでも無い。現状において最も困難かつ重要な課題は、反応系の融体物性を本法へ反映することである。従来報告されてきた密度、粘度、界面張力等の力学的物性はほぼすべてが非反応系に限られている。近年では、反応系における時々刻々と変化する物性研究^{69, 70)} および SPH の枠組みでの反応を組み込んだモデリング研究⁷¹⁾ が別々に進展しており、高温プロセス分野においても高温実験と数値流体解析の有機的な融合が望まれる。最後に、数値モデルは、現象の素過程から全体までの俯瞰した広いスケールでの理解を助ける役割を担うため、ゆえに我々は計算結果の信頼性を常に慎重に検討していく必要があることを念頭に置き、これを利用した多角的視点からの操業設計の模索に活用されることを期待したい。

付録 SPH サンプルコード

SPH の入門書や専門書は多く存在するが、実際にシミュレーションモデルを構築して新規な研究・開発を行う場合において、初学者には決して低くないハードルがあると考えている。その主たる原因の一つは、微分方程式を数値的に解くまでは良いとしても物理的具體化あるいは現象を高度に抽象化するまでのプロセス習得の煩雑さにあると思われる。つまるところ“実際に動く物理的プログラムを自分で作成”する過程が重要である。本節では、SPH に興味はあるが実際の数値解析経験が少ない大学生、大学院生、技術者、研究者の方々にとって少なからず有益と考え、3

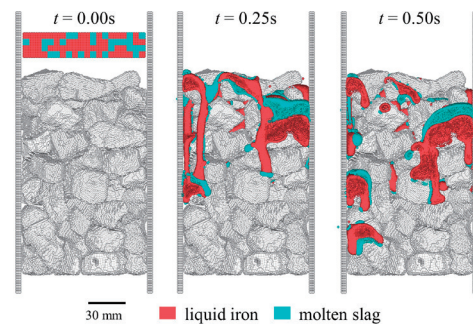


Fig.11 Calculated metal-slag 2-liquid phase flow in packed coke bed.

次元 SPH の初歩的プログラム例を提示した。

本コードでは、一辺が 0.080m の立方体箱形容器に設置した一辺 0.048m 立方体型液相（常温の水を過程）が重力によって崩壊する問題を取り扱っている。液相は半径 0.004m の粒子、時間は 0.0005s で離散化され、影響半径は 0.010m とする。粒子数は 512 個である。液相の運動は、次の非圧縮性 Navier-Stokes 式に従うと仮定する。

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad \text{.....(A1)}$$

粒子が消失しない限り質量は保存されるので（体積ではないことに注意されたい）、質量保存則（連続の式）を解く必要はない。粒子 i について時間微分項を 1 次精度の前進差分法で差分化すると、

$$\begin{aligned} \rho_i \frac{\mathbf{u}_i^{t+\Delta t} - \mathbf{u}_i^t}{\Delta t} &= f_i; \\ f_i &= -\nabla p_i + \mu \nabla^2 \mathbf{u}_i + \rho_i \mathbf{g} \end{aligned} \quad \text{.....(A2)}$$

右辺第 1 項は圧力勾配項、第 2 項は粘性項、第 3 項は外力項である。したがって、次ステップの粒子速度 $\mathbf{u}_i$ と粒子位置ベクトル $\mathbf{r}_i$ は、

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_i^{t+\Delta t} &= \mathbf{u}_i^t + \frac{f_i \Delta t}{\rho_i} \\ \mathbf{r}_i^{t+\Delta t} &= \mathbf{r}_i^t + \mathbf{u}_i^{t+\Delta t} \Delta t \end{aligned} \quad \text{.....(A3)}$$

と求まる。さて、各項の実際の数値計算手順を以下に示す。粒子の密度 ρ_i は、

$$\begin{aligned} \rho_i &= \sum_{j \in N} m_j W(r_{ij}, h); \\ W(r_{ij}, h) &= \frac{315}{64\pi h^9} \begin{cases} (h^2 - r_{ij}^2)^3, & 0 \leq r_{ij} \leq h \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \end{aligned} \quad \text{.....(A4)}$$

と与えられる。ここで r_{ij} は粒子 i と j 間の距離であり、影響半径 h の範囲内でのみ相互作用が働く（section 2 参照）。本コードでは、 $W(r_{ij}, h)$ として平方根を計算しなくて良い単純な 6 次多項式型 (poly6) kernel を採用したが、これまで様々な kernel が提案されており、状況に応じて最適な kernel を選択されたい。さて、本コードは Müller によって定式化された理解しやすい離散化を採用する⁶⁶⁾。圧力勾配項 $f_{p,i}$ は、

$$\begin{aligned} f_{p,i} &= - \sum_{j \in N} m_j \frac{p_i + p_j}{2\rho_j} \nabla W(r_{ij}, h); \\ \nabla W(r_{ij}, h) &= - \frac{945}{32\pi h^9} \begin{cases} (h^2 - r_{ij}^2)^2 \mathbf{r}, & 0 \leq r_{ij} \leq h \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \end{aligned} \quad \text{.....(A5)}$$

で与える。 p_i の計算には、前述のように圧力と密度の関係を表す

状態方程式が用いられるが、簡単に非圧縮状態での流体密度 ρ_0 を用いて、 $p_i = k(\rho_i - \rho_0)$ として与えた(k は定数)。さらに、粘性項 $f_{v,i}$ は、

$$f_{v,i} = \mu \sum_{j \in N} m_j \frac{\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i}{\rho_j} \nabla^2 W(r_{ij}, h); \quad \cdots (A6)$$

$$\nabla^2 W(r_{ij}, h) = -\frac{945}{32\pi h^9} \begin{cases} (h^2 - r_{ij}^2)(3h^2 - 7r_{ij}^2), & 0 \leq r_{ij} \leq h \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

で与える。

固体壁面と粒子との相互作用も考え方は同じで、通常は空間に固定した粒子を固体壁面として条件に組み込む。本コードでは詳細は省略するが、固体壁面粒子を配置しなくて良いペナルティ法と呼ばれる方法を用いて簡便に記述している。以上のアルゴリズムを時間発展的に繰り返して、粒子の座標を時々刻々と解いていく(陽解法)。粒子検索についてはあまり工夫していないが、本コードは十分に高速である。Panasonic[®] Let's note CF-SZ6にintel[®] parallel studio 2018でコンパイルして実行したところ、500時間ステップ(0.25sまで)を1秒からずらに解けた。

本プログラムコードはなるべく易しく記述することを心掛けて作成したので、大学学部生レベルのプログラミング技術があれば十分理解が可能と思われる。また、言語は科学技術計算において利用者が多いと思われるFortran90(.f90)を選択し、書式は牛島によるFortran90プログラムの入門書⁶⁷⁾に準拠した。近年は、フリーのコンパイラ(例えばGFortranなど)があり、手軽に試すことができると思われる。なお、粒子座標、速度、圧力などの出力部分を排して冗長を避けた。グラフィック出力は計算結果を評価するため重要であり、実際の粒子の動きを追跡することで理解が深まるものと思われる。Fig. A1に計算結果を示す。グラフ作成商用ソフトウェアMicroAVS(サイバネットシステム製)を用いて3次元プロットしたものであり、粒子の速度や圧力が時々

刻々変化していく様子がわかる。なお、Gnuplot等フリーソフトでも十分可視化は可能である⁶⁷⁾。

本コードは基礎的なSPHプログラムではあるが、多くの研究論文に提案された様々な改良点を組み込めば、研究に使用することのできる現代型コードに一新することも可能である。例えば、密度差のある異相間での数値安定性を向上したkernel関数³¹⁾、多相流などに対応する圧力勾配項や粘性項^{59, 60)}、表面・界面張力項の付加(第4章)、非圧縮性アルゴリズム(MPS, ISPHなど)、粒子検索高速化、圧力振動問題への対策(第3章)、MPIやCUDAによる高速並列演算と大規模化、格子法とのカップリングによる多相流解析⁶⁸⁾などがある。その可能性は極めて多岐にわたっており、状況に応じてこれらのアルゴリズムを使い分けるのが良いと思われる。さらに近年では多くの専門書があり²⁸⁾、類似の国産手法MPSによる商用コードも入手可能であるため^{25, 26)}、本法における初学者へのハードルは低くなってきたと感じている。様々な専門分野の研究者が粒子法シミュレーションのユーザーとなることで、本法の更なる展開あるいは全く新たな数理モデルが生み出されることと期待される。

なお、本プログラムの著作権は著者が有し、著作権者の許諾なしに個人的な利用を認めるが、あくまで初学者への理解を促すものであり、不具合等への対応は行わない。二次使用による損害や訴訟に関して責任を負わないものとする。

謝辞 本研究の遂行にJFE21世紀財団、マツダ財団、鉄鋼環境基金、日本鉄鋼協会、東電記念財団、独立行政法人石油天然ガス・金属鉱物資源機構(JOGMEC)、資源・素材学会、岩谷直治記念財団、新井科学技術振興財団、池谷科学技術振興財団、日本学術振興会科学研究費、物質・デバイス領域共同研究拠点の支援を受けた。愛媛大学佐々木秀顕先生、資源・素材学会事務局各位には本稿執筆の機会を与えて頂いた。愛媛大学武部博倫先生と学生諸氏にはHot-Thermocouple法による銅精鉱燃焼実験についてご教示頂き、high-speed videoデータを撮影する機会を頂いた。ここに記して感謝の意を表する。

```

1 | !
2 | ! Simple SPH Source Code for Journal of MMIJ ver. 1.1
3 | ! by Shungo Natsui, 2018 July 31
4 | !
5 | program sph | プログラムの開始
6 | implicit none | 暗黙の型宣言は行わない
7 | ! --- パラメータの宣言
8 | integer, parameter :: dim = 3, num = 1000, max_loop = 500
9 | real(8), parameter :: pi = 3.14159265359
10 | real(8), parameter :: dt = 5d-4, radius = 4d-3, h = 1d-2
11 | real(8), parameter :: mass = 0.0002d0, kpress = 1.01d0
12 | real(8), parameter :: kernel = 315.0d0 / (6d, 0d0 * pi * h**9)
13 | real(8), parameter :: gradkern = -945.0d0 / (32.0d0 * pi * h**9)
14 | real(8), parameter :: lapkern = -945.0d0 / (32.0d0 * pi * h**9)
15 | real(8), parameter :: dens = 1d5, visc = 1d-3
16 | real(8), parameter :: sff = 1.2d4, dmp = 4d2, eps = 1d-5
17 | real(8), parameter :: velli = 200d0
18 | real(8), parameter :: dis = (mass / dens)**(1d0 / 3d0)
19 | ! --- 変数の宣言
20 | real(8), save :: r(dim, num), v(dim, num) | 粒子半径[a], 速度[m/s]
21 | real(8), save :: rho(num), p(num), f(dim, num) | 密度[kg/m3], 圧力[Pa], 力[N]
22 | real(8), save :: initmin(dim), initmax(dim), min(dim), max(dim) | 初期液相サイズ[a], 容器サイズ[a]
23 | integer i, j, k, ps, ni, nj, nk | 粒子初期配列に係る変数
24 | real(8), save :: x = 0d0, y = 0d0, z = 0d0 | 粒子初期配列に係る変数
25 | real(8) it, h2, sum, r2, c, c2, rr, rand(num), dr(dim) | 繰り返し回数, 影響半径に係る変数, 粒子間距離
26 | real(8) force(dim), fcurr(dim), pterm, vterm | 力の計算に係る変数
27 | real(8) accel(dim), g(dim), norm(dim), speed | 加速度等に係る変数
28 | real(8) diff, adj | ベナルティ法(壁との相互作用)に係る変数
29 | ! --- 初期粒子配置
30 | call random_seed | 擬似乱数生成
31 | call random_number(rand) | 乱数を格納
32 | rand(:) = -0.05d0 + rand(:) * 0.1d0 | -0.05 < rand < 0.05 (部分配列を利用)
33 | initmin(1:3) = 0.000d0 | 液相初期配置時のx, y, z方向最小値
34 | initmax(1:3) = 0.04d0 | 最大値
35 | min(1:3) = 0.000d0 | 容器の各方向最小値(1, 2, 3はx, y, zに対応)
36 | max(1:3) = 0.080d0 | 最大値
37 | ni = int(initmax(1) / dis) | 各方向に配置する粒子数, x方向
38 | nj = int(initmax(2) / dis) | y方向
39 | nk = int(initmax(3) / dis) | z方向
40 | ps = 0 | 粒子数
41 | do k = 1, nk | z方向ループ
42 | z = z + dis | z方向へ粒子間距離だけ加算
43 | y = y + dis | y座標ゼロクリア
44 | do j = 1, nj | y方向ループ
45 | y = y + dis | y方向へ粒子間距離だけ加算
46 | x = 0d0 | x座標ゼロクリア
47 | do i = 1, ni | x方向ループ
48 | x = x + dis | x方向へ粒子間距離だけ加算
49 | ps = ps + 1 | 粒子番号カウント(インクリメント)
50 | r(1, ps) = x | 粒子座標を代入, x座標
51 | r(2, ps) = y | y座標
52 | r(3, ps) = z | z座標
53 | v(1:3, ps) = rand(ps) | 粒子初期速度を乱数で与える
54 | enddo
55 | enddo
56 | enddo

```

Fig.A1 SPH source code written in Fortran90 (part1) .

```

57 | ! --- タイムループ
58 | do it = 1, max_loop | 陽的な時間発展(繰り返し回数)
59 | ! --- 密度と圧力の計算
60 | h2 = h * h | カーネル関数影響半径の2乗
61 | do i = 1, ps | 全粒子ループ(粒子番号i, 粒子数ps)
62 | sum = 0.0d0 | 粒子間距離の逆数をゼロクリア
63 | do j = 1, ps | 相手側の粒子
64 | if(i == j) cycle | 相手側と同じ粒子番号なら計算をスキップ
65 | dr(:) = (r(:, i) - r(:, j)) | x, y, z方向への粒子間距離ベクトル
66 | r2 = dot_product(dr(:), dr(:)) | 2乗の和(平方根計算は重いのてスキップ)
67 | if(h2 > r2) then | 影響半径の中であれば
68 | c = h2 - r2 | 距離
69 | sum = sum + c * c * c | 距離に応じて重みを足し合わせる
70 | enddo
71 | rho(i) = sum * mass * kernel | 足し合わせた重みに粒子質量とカーネル乗算
72 | p(i) = kpress * (rho(i) - dens) | 圧力の計算
73 | if(p(i) <= 0d0) p(i) = 0d0 | 負圧を回避(計算しないための研究も多い)
74 | fcurr(i) = 1.0d0 / rho(i) | 後の計算のために逆数をとる(除算は遅い)
75 | enddo
76 | ! --- 力の計算
77 | do i = 1, ps | 全粒子ループ
78 | force(:) = 0d0 | 力をゼロクリア
79 | do j = 1, ps | 相手側の粒子
80 | if(i == j) cycle | 相手側と同じ粒子番号なら計算をスキップ
81 | rr = dsqrt(dot_product(dr(:), dr(:))) | 粒子間距離
82 | if(h < rr) then | 影響半径内にjが存在する場合
83 | c = h - rr | 距離
84 | r2 = dot_product(dr(:), dr(:)) | 2乗の和
85 | c2 = h2 - r2 | 距離
86 | pterm = -0.5d0 * c2 * c2 * gradkern * (p(i) + p(j)) | 圧力項の計算
87 | vterm = lapkern * visc * (c2 * (3d0 * h2 - 7d0 * r2)) | 粘性項の計算
88 | fcurr(:) = pterm * dr(:) + vterm * (v(:, j) - v(:, i)) | 圧力と粘性項からの力の計算
89 | fcurr(:) = fcurr(:) + rho(i) * rho(j) | 密度の除算, 75行目に注意
90 | force(:) = force(:) + fcurr(:) | 力の総和
91 | enddo
92 | enddo
93 | f(:, i) = force(:) | 各粒子の力に代入
94 | enddo

```

Fig.A2 SPH source code written in Fortran90 (part 2) .

```

97  ! --- 位置の計算
98  g(1:3) = (/ 0.0d0, -9.8d0, 0.0d0/) ! 重力加速度
99  do i = 1, ps ! 全粒子ループ
100  accel(:) = f(-i, rho(i)) ! 加速度を計算, 75行目に注意
101  speed = dot_product(accel(1:3), accel(1:3)) ! 粒子速度の計算
102  if (speed > vlim * vlim) accel(:) = accel(:) * vlim / dsqrt(speed) ! 粒子速度制限
103  ! --- ベナリテ法による壁との相互作用の計算
104  diff = 2.0d0 * radius - (r(3, i) - min(3)) ! Z軸最小値側の壁とのオーバーラップ
105  if (diff > eps) then ! 接触判定(オーバーラップが閾値以上ならば)
106  norm(1:3) = (/ 0.0d0, 0.0d0, 1.0d0/) ! 法線ベクトル
107  adj = stf * diff - dmp * dot_product(norm(1:3), v(1:3, i)) ! バネ・ダンパモデルによる力の計算
108  accel(:) = accel(:) + adj * norm ! 壁から受ける力から加速度を加算
109  endif
110  diff = 2.0d0 * radius - (max(3) - r(3, i)) ! Z軸最大値側の壁
111  if (diff > eps) then
112  norm(1:3) = (/ 0.0d0, 0.0d0, -1.0d0/)
113  adj = stf * diff - dmp * dot_product(norm(1:3), v(1:3, i))
114  accel(:) = accel(:) + adj * norm
115  endif
116  diff = 2.0d0 * radius - (r(1, i) - min(1)) ! X軸最小値側の壁
117  if (diff > eps) then
118  norm(1:3) = (/ 1.0d0, 0.0d0, 0.0d0/)
119  adj = stf * diff - dmp * dot_product(norm(1:3), v(1:3, i))
120  accel(:) = accel(:) + adj * norm
121  endif
122  diff = 2.0d0 * radius - (max(1) - r(1, i)) ! X軸最大値側の壁
123  if (diff > eps) then
124  norm(1:3) = (/ -1.0d0, 0.0d0, 0.0d0/)
125  adj = stf * diff - dmp * dot_product(norm(1:3), v(1:3, i))
126  accel(:) = accel(:) + adj * norm
127  endif
128  diff = 2.0d0 * radius - (r(2, i) - min(2)) ! Y軸最小値側の壁
129  if (diff > eps) then
130  norm(1:3) = (/ 0.0d0, 1.0d0, 0.0d0/)
131  adj = stf * diff - dmp * dot_product(norm(1:3), v(1:3, i))
132  accel(:) = accel(:) + adj * norm
133  endif
134  diff = 2.0d0 * radius - (max(2) - r(2, i)) ! Y軸最大値側の壁
135  if (diff > eps) then
136  norm(1:3) = (/ 0.0d0, -1.0d0, 0.0d0/)
137  adj = stf * diff - dmp * dot_product(norm(1:3), v(1:3, i))
138  accel(:) = accel(:) + adj * norm
139  endif
140  accel(:) = accel(:) + g ! 重力加速度を加えた加速度
141  v(:) = v(:) + accel(:) * dt ! 差分法(オイラー法)による速度更新
142  r(:) = r(:) + v(:) * dt ! 差分法(オイラー法)による粒子座標更新
143  enddo
144  end program sph ! タイムループ終了
145  ! プログラムの終了

```

Fig.A3 SPH source code written in Fortran90 (part 3) .

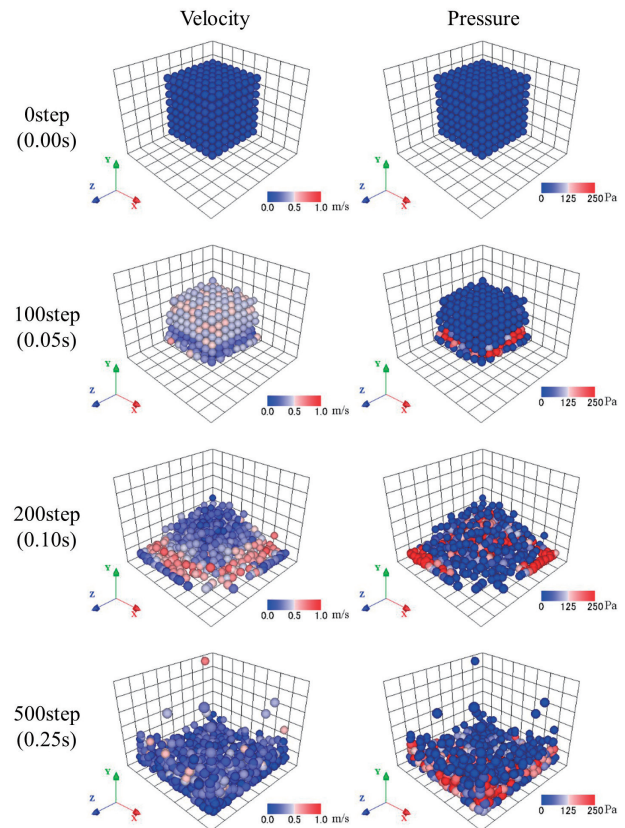


Fig.A4 Calculation example.

References

- 1) E. Shibata and T. Nakamura: J. MMIJ, **129** (2013), 171-176.
- 2) W.G. Davenport, M. King, M. Schlesinger, and A.K. Biswas: Extractive Metallurgy of Copper, 4th ed., Pergamon, New York, (2002), 173-186.
- 3) 原 大悟, 齊藤 敬高, 中島 邦彦: 平成 30 年度資源・素材関係学協会合同秋季大会要旨集, (2018), 3201-06-03. [D. Hara, et al.: Proc. MMIJ Annual Meeting (2018), Vol. 5, No. 2, [3201-06-03].]
- 4) T. Takenaka, S. Akimura and T. Morishige: Electrochem. **86** (2018), 179-183.
- 5) R. O. Suzuki, H. Noguchi, H. Hada, S. Natsui and T. Kikuchi: Mater. Trans. **58** (2017), 341-349.
- 6) S. Natsui, T. Sudo, T. Kaneko, K. Tonya, D. Nakajima, T. Kikuchi and R. O. Suzuki: Sci. Rep., **8** (2018), 13114.
- 7) 夏井 俊悟, 菊地 竜也, 鈴木 亮輔: 電気化学会第 50 回溶融塩化学討論会講演要旨集, (2018), in press. [S. Natsui, et al.: The 50th Symposium on Molten Salt Chemistry, (2018), in press.]
- 8) T. Fukutake and V. Rajakumar, Trans. ISIJ, **22** (1982), 355-364.
- 9) T. W. Kang, S. Gupta, N. Saha-Chaudhury, and V. Sahajwalla: ISIJ Int., **45** (2005), 1526-1536.
- 10) H. Ohgusu, Y. Sassa, Y. Tomita, K. Tanaka and M. Hasegawa, Tetsu-to-Hagané, **78** (1992), 1164-1170.
- 11) I. H. Jeong, H. S. Kim and Y. Sasaki: ISIJ Int., **53** (2013), 2090-2098.
- 12) T. Tanaka, H. Goto, M. Nakamoto, M. Suzuki, M. Hanano, M. Zeze, H. Yamamura, T. Yoshikawa: ISIJ Int., **56** (2016), 944-952.
- 13) K. A. Brakke, The surface evolver. Exp. Math., **1** (1992), 141-165.
- 14) Y. Bazilevs, K. Takizawa, T. E. Tezduyar (訳: 津川 祐美子, 滝沢 研二): 流体・構造連成問題の数値解析, 森北出版, 東京, (2015). [Y. Bazilevs, et al.: Computational Fluid-Structure Interaction: Methods and Applications (Wiley Series in Computational Mechanics).]
- 15) 太田 光浩, 酒井 幹夫, 島田 直樹, 本間 俊司, 松隈 洋介: 混相流の数値シミュレーション, 丸善出版, 東京, (2015). [M. Ohta, et al.: Konsouryo no suchi simulation, Maruzen-Publishing, Tokyo, (2015).]
- 16) 小山 敏幸, 高木 知弘: フェーズフィールド法入門, 丸善出版, 東京, (2013). [T. Koyama, et al.: Phase-Field houn nyumon, Maruzen-Publishing, Tokyo, (2013).]
- 17) W. G. Hoover (訳: 志田 晃一郎): 粒子法による力学・連続体シミュレーションへの展開, 森北出版, 東京, (2008). [W. G. Hoover (Translated by K. Shida): Smooth particle applied mechanics, Morikita Publishing, Tokyo, (2008).]
- 18) L. B. Lucy: Astron. J., **82** (1977), 1013-1024.
- 19) R. A. Gingold, and J. J. Monaghan, Monthly notices of the royal astronomical society, **181** (1977), 375-389.
- 20) J. J. Monaghan: J. Comput. Phys., **60** (1985), 253-262.
- 21) J. J. Monaghan: Comput. Phys. Commun., **48** (1988), 89-96.
- 22) J. J. Monaghan: J. Comput. Phys., **82** (1989), 1-15.
- 23) J. J. Monaghan: Annu. Rev. Astron. Astrophys., **30** (1992), 543-574.
- 24) J. J. Monaghan: J. Comput. Phys., **110** (1994), 399-406.
- 25) 越塚 誠一: 粒子法, 丸善, 東京, (2005). [S. Koshizuka: Ryushihou, Maruzen-Publishing, Tokyo, (2005).]
- 26) 越塚 誠一, 柴田 和也, 室谷 浩平: 粒子法入門 - 流体シミュレーションの基礎から並列計算と可視化まで, 丸善, 東京, (2014). [S. Koshizuka, et al.: Ryushihou Nyumon, Maruzen-Publishing, Tokyo, (2014).]
- 27) 後藤 仁志: 数値流砂水理学, 森北出版, (2004). [H. Gotoh: Suchi ryusa suirigaku, Morikita Publishing, Tokyo, (2004).]
- 28) 後藤 仁志: 粒子法 - 連続体・混相流・粒状体のための計算科学 -, 森北出版, 東京, (2018). [H. Gotoh: Ryushihou, Morikita Publishing, Tokyo, (2018).]
- 29) M. Becker and M. Teschner: In Proceedings of the 2007 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation. Eurographics Association., (2007), 209-217.
- 30) G. R. Liu and M. B. Liu: Smoothed Particle Hydrodynamics (A Meshfree Particle Method), World Scientific Publishing Co., Singapore, (2003), 118-137.
- 31) H. Wendland: Adv. Comput. Math., **4** (1995), 389-396.
- 32) G. Hashimoto and H. Noguchi: Trans. JSCES, **2007** (2007), 20070030.
- 33) S. Natsui, R. Nashimoto, H. Takai, T. Kumagai, T. Kikuchi, and R. O. Suzuki: Chem. Eng. Sci., **141** (2016), 342-355.
- 34) J. P. Morris, P. J. Fox and Y. Zhu, J. Comp. Phys., **136** (1997), 214-226.
- 35) Inutsuka, S., 2002, J. Comput. Phys. **179**, 238.
- 36) S. Shao and E. Y. Lo: Adv. Water Res., **26** (2003), 787-800.
- 37) S. Marrone, M. A. G. D. Antuono, A. Colagrossi, G. Colicchio, D. Le Touzé, and G. Graziani: Comp. Methods Appl. Mech. Eng., **200** (2011), 1526-1542.
- 38) H. Mio, A. Shimosaka, Y. Shirakawa, and J. Hidaka: Adv. Powder Technol., **18** (2007), 441-453.
- 39) J. U. Brackbill, D. B. Kothe and C. Zemach: J. Comput. Phys., **100** (1992), 335-354.
- 40) J. P. Morris: Int. J. Numer. Methods Fluids, **33** (2000), 333-353.
- 41) J. W. Cahn and J. E. Hilliard: J. Chem. Phys. **28** (1958), 258-267.
- 42) M. Hirschler, M. Huber, W. Säckel, P. Kunz, and U. Niekne: Math. Problems Eng., (2014), 2014.
- 43) Mysliński, A., & Wróblewski, M. (2017). Structural optimization of contact problems using Cahn-Hilliard model. Computers & Structures, **180**, 52-59.
- 44) A. Khayyer, H. Gotoh and N. Tsuruta: J. Japan Soci. Civil Eng. Ser. B2 (Coastal Engineering), **70** (2014), 26-30.
- 45) H. Ichikawa, S. Labrosse and K. Kurita: J. Geophys. Res.: Solid Earth **115** (2010), B1.
- 46) A. Tartakovsky and P. Meakin: Phys. Rev. E, **72** (2005), 026301.
- 47) M. Kondo, S. Koshizuka, and M. Takimoto: Trans. JSCES, **2007** (2007), 20070021.
- 48) A. M. Tartakovsky and A. Panchenko: J. Comput. Phys., **305** (2016), 1119-1146.
- 49) S. Adams, X. Y. Hu and N. A. Adams: J. Comput. Phys., **229** (2010), 5011-5021.
- 50) M. Nakano and K. Ito: ISIJ Int., **56** (2016), 1297-1299.
- 51) 問谷 一偉, 夏井俊悟, 菊地竜也, 鈴木亮輔: 平成 30 年度資源・素材関係学協会合同秋季大会講演要旨集, (2018), PY-89. [K. Tonya, et al.: Proc. MMIJ Annual Meeting (2018), Vol. 5, No. 2, [PY-89].]

- 52) Ahokainen, T., and A. Jokilaakso. "Numerical simulation of the Outokumpu flash smelting furnace reaction shaft." *Canadian metallurgical quarterly* 37.3-4 (1998): 275-283.
- 53) Kemori, N., Denholm, W. T., & Kurokawa, H. (1989). Reaction mechanism in a copper flash smelting furnace. *Metallurgical and Materials Transactions B*, **20**(3), 327-336.
- 54) Y. Sasaki, Y. Mori, Y. Hattori: *Journal of MMIJ*, **125** (2009), 25-30.
- 55) Y. Sasaki, Y. Mori, Y. Hattori: *Journal of MMIJ*, **125** (2009), 31-37.
- 56) Y. Sasaki, Y. Mori: *Journal of MMIJ*, **125** (2009), 121-128.
- 57) Y. Sasaki, Y. Mori, T. Miura, H. Aoki: *Journal of MMIJ*, **125** (2009), 129-134.
- 58) 高橋 祐介, 武部 博倫: , 平成 29 年度資源・素材関係学会合同秋季大会講演要旨集, (2017), PY1-62. [T. Takahashi, et al.: *Proc. MMIJ Annual Meeting* (2017), Vol. 4, No. 2, [PY1-62].]
- 59) K. Szewc, J. Pozorski and J.P. Minier: *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **92** (2012), 343-369.
- 60) K. Szewc, J. Pozorski and J.P. Minier: *Int. J. Multiphase Flow*, **50** (2013), 98-105.
- 61) K. Szewc, J. Pozorski and J.P. Minier: *Int. J. Numer. Methods Eng.*, **103** (2015), 625-649.
- 62) S. Natsui, R. Nashimoto, D. Nakajima, T. Kikuchi and R. O. Suzuki, *Phys. Rev. E*, **97** (2018), 062802.
- 63) S. Natsui, A. Sawada, K. Terui, Y. Kashihara, T. Kikuchi, and R. O. Suzuki: *Chem. Eng. Sci.*, **175** (2018), 25-39.
- 64) S. Natsui, K. Ohno, S. Sukenaga, T. Kikuchi and R. O. Suzuki, *ISIJ Int.*, **58** (2018), 282-291.
- 65) I. H. Jeong, H. S. Kim and Y. Sasaki: *ISIJ Int.*, **53** (2013), 2090-2098.
- 66) M. Müller, D. Charypar and M. Gross: In *Proceedings of the 2003 ACM SIGGRAPH/Eurographics Symposium on Computer Animation*, SCA 03, Aire-la-Ville, Switzerland, Eurographics Association, (2003), 154-159.
- 67) 牛島省: 数値計算のための Fortran90/95 プログラミング入門, 森北出版, 東京, (2007). [S. Ushijima: *Suchi keisan no tamenno Fortran90/95 programming nyumon*, Morikita Publishing, Tokyo, (2007).]
- 68) R. Takahashi, H. Mamori and M. Yamamoto: *Int. J. Comput. Fluid Dynamics*, **30** (2016), 120-128.
- 69) A. Giustiniani, W. Drenckhan, and C. Poulard: *Adv. Colloid Interf. Sci.*, **247** (2017), 185-197.
- 70) T. Tanaka, H. Goto, M. Nakamoto, M. Suzuki, M. Hanao, M. Zeze, H. Yamamura, T. Yoshikawa: *ISIJ Int.*, **56** (2016), 944-952.
- 71) B. Drawert, B. Jacob, Z. Li, T. M. Yi, and L. Petzold: *J. Comput. Phys.*, **378** (2019), 1-17.
- 72) H. Takebe, Y. Takahashi, and T. Okura: *J. Sustainable Metall.*, (2019), 1-9.