

JAERI-M  
92-038

溶融層内のマランゴニ対流の  
数値シミュレーション

1992年3月

横川三津夫

JAERI-Mレポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。  
入手の間合わせは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11茨城県那珂郡東海村）  
あて、お申しこしてください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11茨城  
県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

JAERI-M reports are issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Division, Department  
of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun,  
Ibaraki-ken 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1992

---

編集兼発行 日本原子力研究所  
印刷 日立高速印刷株式会社

溶融層内のマランゴニ対流の数値シミュレーション

日本原子力研究所東海研究所情報システムセンター

横川三津夫

(1992年2月14日受理)

金属溶融過程は、核融合炉の第1壁溶融現象や原子法レーザー同位体分離過程などの様々な分野に見られる現象である。この過程においては、溶融層形状や溶融のメカニズムを知ることが重要となっている。

本報告書では、ナビエーストークス方程式とエネルギー方程式を用いた数値シミュレーションを行うことによって、電子ビームによる金属溶融過程の非定常特性を明らかにした。また、固液境界面の時間発展を融解熱モデルを用いて予測した。この融解熱モデルは、2相ステファン問題を用いて詳細に検討した。一方、格子数やクーラン数を変化させて、非線形項に対する1次風上差分法と高次精度差分法の適用可能限界について議論した。高次精度差分法を用いた数値シミュレーションによる溶融層形状は実験結果と一致することが分った。

さらに、溶融層内の流れをモデル化したマランゴニ対流のレイノルズ数依存性について検討した。この結果、溶融層の周辺部に生じる2つの渦は、溶融層を形成する上で重要な要因となっていることが分った。

Numerical Simulation on the Marangoni Convection  
in the Molten Metal Pool

Mitsuo YOKOKAWA

Computing and Information Systems Center  
Tokai Research Establishment  
Japan Atomic Energy Research Institute  
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received February 14, 1992)

Melting process of metal is found in various nuclear engineering fields, such as melting phenomena on the first wall in a fusion reactor and the atomic vapor laser isotope separation process. In this process, it is important to know the shape of the molten pool and its melting mechanism.

A set of the Navier-Stokes equation and the energy equation is applied to simulate the transient melting process of metal irradiated by electron beam. A time evolution of the liquid-solid interface is predicted using the latent heat model. The validity of this model is confirmed by using the two-phase Stefan problem. The upwind and the higher order finite difference method for nonlinear terms of the convection equation are studied for various parameters, such as the mesh size and the Courant number. The shape of the molten region, which is calculated using a higher order finite difference method, is in good agreement with measured ones.

The Marangoni convection in a long rectangular cavity, which is a model of the flow observed in the pool, is simulated in detail as a function of the Reynolds number. It is found that two vortices in the periphery of the pool play a decisive role in forming the molten region.

Keywords: Numerical Simulation, Marangoni Convection, QUICK, Upwind, Navier-Stokes Equation, Thermocapillary Convection, Courant Number, Cavity Flow, Reynolds Number

## 目 次

第1章	序 論	1
第2章	金属溶融過程の数値シミュレーション	4
2.1	解析モデル	4
2.2	数値計算法	7
2.3	数値計算結果及び考察	12
第3章	浅いキャビティ内のマランゴニ対流の数値シミュレーション	27
3.1	モデル化	27
3.2	無次元化方程式	31
3.3	QUICK法について	32
3.4	数値シミュレーション結果と考察	43
第4章	自由境界問題	51
4.1	1次元2相ステファン問題	51
4.2	移動座標系による差分化	52
4.3	融解熱モデルによる差分化	53
4.4	数値計算結果と考察	55
第5章	結 論	62
	謝 辞	63
	参考文献	64
付録A	自由表面モデル	67
A.1	基礎方程式	67
A.2	自由表面での境界条件	68

## Contents

1. Introduction .....	1
2. Numerical Simulation on Melting Process .....	4
2.1 Physical Model .....	4
2.2 Numerical Algorithm .....	7
2.3 Numerical Results and Discussions .....	12
3. Numerical Simulation on the Marangoni Convection in a long rectangular Cavity .....	27
3.1 Model .....	27
3.2 Non-dimensionalization .....	31
3.3 QUICK Method .....	32
3.4 Numerical Results and Discussions .....	43
4. Free Boundary Problem .....	51
4.1 One-dimensional Two-phase Stefan Problem .....	51
4.2 Difference Method by Moving Boundary Fitted Coordinate .....	52
4.3 Difference Method with the Latent Heat Model .....	53
4.4 Numerical Results and Discussions .....	55
5. Conclusion .....	62
Acknowledgements .....	63
References .....	64
Appendix A Free Surface Model .....	67
A.1 Basic Equations .....	67
A.2 Boundary Conditions on the Free Surface .....	68

## 目 次

1.1	マランゴニ対流の概念図 . . . . .	1
2.1	計算領域 . . . . .	5
2.2	融解熱モデル . . . . .	8
2.3	スタッガード格子 . . . . .	8
2.4	コントロール・ボリューム境界面での値 . . . . .	11
2.5	固液境界面の時間発展 . . . . .	17
2.6	100ms 後の固液境界面の実験結果との比較 . . . . .	18
2.7	200ms 後の固液境界面の実験結果との比較 . . . . .	19
2.8	200ms 後の溶融層内の流線 . . . . .	20
2.9	200ms 後の温度分布 . . . . .	21
2.10	金属表面の速度分布 . . . . .	22
2.11	金属表面の温度分布 . . . . .	23
2.12	水平方向溶融長さ格子数の関係 . . . . .	24
2.13	深さ方向溶融長さ格子数の関係 . . . . .	25
2.14	溶融層表面の最大速度 ( $t = 200\text{ms}$ ) . . . . .	26
3.1	溶融層表面付近の流れ . . . . .	28
3.2	解析モデル . . . . .	30
3.3	QUICK法の増幅率と相対位相誤差 . . . . .	36
3.4	1次風上差分法の増幅率と相対位相誤差 . . . . .	37
3.5	3次精度風上差分法の増幅率と相対位相誤差 . . . . .	38
3.6	$\phi$ の初期値 . . . . .	39
3.7	QUICK法による数値解(その1) . . . . .	40
3.7	QUICK法による数値解(その2) . . . . .	41
3.8	1次風上差分法による数値解 . . . . .	42
3.9	流線のレイノルズ数に対する変化 . . . . .	45
3.10	キャビティ中央の無次元速度分布 . . . . .	46

3.11	キャビティ表面の無次元速度分布	47
3.12	キャビティ表面の無次元温度分布	48
3.13	1次風上差分法とQUICK法の流線 ( $Re = 100$ )	49
3.14	1次風上差分法とQUICK法の流線 ( $Re = 5000$ )	50
4.1	水と氷の移動境界	52
4.2	温度と比熱の関係	54
4.3	初期温度分布	58
4.4	移動境界の $\theta_w$ 依存性	59
4.5	移動境界の格子数依存性	60
4.6	初期温度勾配と移動境界の関係	61
A.1	自由表面モデル	67

## 表 目 次

2.1	アルミニウムの物性値	13
-----	------------	----



## 第 1 章 序 論

金属上部表面に電子ビーム等により高い熱流束が加えられると、金属の一部が溶解して溶融層が形成される。溶融層ではビーム照射部から周辺へと溶融層表面付近に局在する流れが生じる。この流れは、液体金属の表面張力の温度依存性に起因することが知られている。すなわち、液体金属表面の温度差により生じた表面張力勾配が液体表面に応力として作用し、溶融層内に流れができる。この流れはマランゴニ対流 (Marangoni Convection) と呼ばれる<sup>†</sup>[1]。マランゴニ対流は溶融層中心部の熱を周辺部へと運ぶため、溶融層の形状は複雑になる (図 1.1)。また、金属表面に熱流束が入るので、自然対流 (Natural Convection) の効果よりもマランゴニ対流による効果が支配的である。

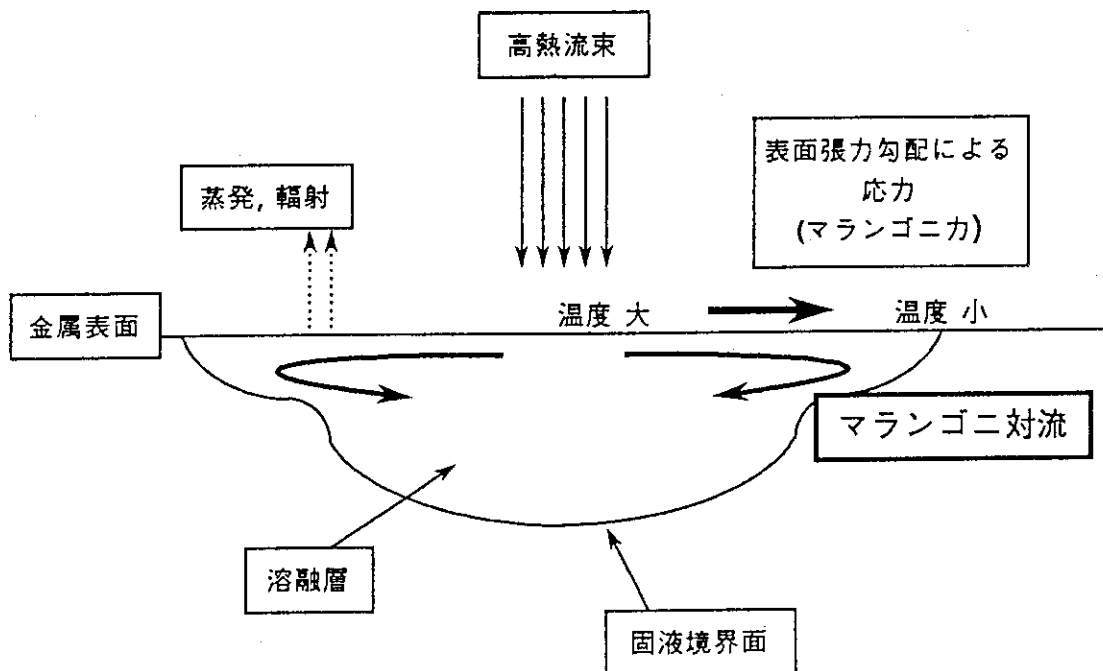


図 1.1 マランゴニ対流の概念図

マランゴニ対流は、高い熱流束にさらされた液体金属表面に生じる流れの共通のメカニズムで

<sup>†</sup>英語では Thermocapillary Convection と云われている。マランゴニ対流は表面張力の変動によって引き起こされる流れ全般を指しているが、適当な日本語がないためここでの流れをマランゴニ対流と呼ぶことにした。

あり、このメカニズムを把握することが重要である。たとえば、単結晶成長過程においては、従来経験的に知られていた流れの効果を、マランゴニ対流の解析や伝熱解析によって知ることは、高品質の単結晶を生成する上で必要である。また、金属溶融溶接においてマランゴニ対流は、溶融層形状、温度分布、溶融層内の化学反応などに影響を与える。原子力分野では、プラズマ・ディスプレイによって核融合装置の第一壁が溶融するため、設計時にその溶融層の大きさを把握することが必要である。また、原子法同位体分離での原子蒸気発生を効率よく行うには、るつぼ内の金属溶融層の対流現象を把握する必要がある。

金属の溶融現象を数値シミュレーションするためには、溶融層内の流れを記述するナビエーストークス方程式 (Navier-Stokes Equation) と、金属全体の温度分布を求めるエネルギー方程式 (Energy Equation) を一緒に解かなければならない。これらの移流拡散方程式では、溶融現象の流れのように移流項が拡散項と比べて大きい場合、離散化の格子幅を小さくとらなければならない。この結果、離散化方程式の次元数は大きくなり、また時間発展の時間刻み幅も数値解法の安定性の観点からかなり小さくしなければならない [2]。さらに、溶融層の表面や固体と液体の境界面については、時間と共に移動する境界を考えなければならないが、時間的に計算格子を変化させる数値シミュレーションは困難である。また、非定常解析時の固液境界面では融解熱を考慮しなければならない。これは一般にステファン問題として知られている [3]。

非圧縮性ナビエーストークス方程式の解法には、有限差分法、有限要素法、スペクトル法等がある。有限要素法は、速度の基底関数を圧力の基底関数よりも1次高くしなければならない [4] などの制約があり、一方、移流項の効果が大きい流れを解く場合には要素数を多く取らなければならない。このため離散化によって得られる連立1次方程式の次元数は大きくなり、現在の計算機の性能では金属溶融過程の数値シミュレーションは非常に困難である。スペクトル法は、求めたい波数領域を厳密に表現することができるが、移流項の効果が大きい場合にはスペクトル成分を多く取る必要があるために離散化方程式の次元数が大きくなる。また複雑な計算領域への適用が難しい。

有限差分法は直交格子を用いて離散化するため、その適用は比較的容易である。しかし、移流拡散方程式の解を数値計算で求める場合、移流項の効果が大きい時には、対流項の差分化が数値解に大きな影響を与える。従来流れの解析で良く用いられている1次風上差分法は、そのスキームに内在する数値粘性を導入して数値解法の安定化をはかっているが、速度が大きい流れについては実際の粘度よりも数値粘性がかなり大きくなり、良い数値解を与えない。最近では、高次精度の差分法が適用される場合が多く、個々の問題に対してスキームの検討 [5] が行われているものの、その適用範囲については系統的に知られていない。Leonard は、高次精度差分のQUICK法 (Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics) を提案し、移流拡散方程式に適用した場合の安定性について議論している [6, 7]。しかし、QUICK法による数値解は振動的な振る舞いを示すことが知られている。この振動を引き起こす条件は明らかにされていない。

溶融層内の対流現象に関する数値シミュレーションには、Chanら[8]、Basuら[9, 10]、Kouら[11]、Sluzalec[12]、Kaburakiら[13]の研究がある。Chanらは2次元直交座標系に対して熱流体解析コードSOLAを用い、定常状態の溶融層形状を解析した。Basuらは、2次元直交および円筒座標を用い、定常状態のシミュレーションを行った。Kouらは、磁場の効果も考慮した2次元円筒座標による定常解析を行った。Sluzalecは、有限要素法による定常シミュレーションを行った。これらの数値シミュレーションでは、ナビエーストークス方程式の対流項差分に1次風上差分法を用いているものが多く、2次精度風上差分法を用いているものは少ない。我々の対象である高熱流束下での速い流れを数値シミュレーションするためには、1次風上差分法の打ち切り誤差項に含まれる数値粘性を無視することができず、精度の高い数値シミュレーションには高次精度の差分法が必要である。また、数値シミュレーションと実験結果との比較研究はほとんどない。山崎らは金属溶融過程の実験を行い、熱伝導モデルによる数値シミュレーション結果と比較したが、溶融層の深さ方向については予測できるものの表面にそった溶融層の大きさについては一致が見られず、対流による熱輸送の効果を考慮する必要があると述べている[14]。

また、キャビティ内での自然対流とマランゴニ対流の効果が共存する流れの研究が行われている。まず、Kirdyashkin[15]は浅いキャビティ内の流れの実験を行い、水平方向に温度勾配が一定である領域の速度と温度分布を解析解と比較した。Laureら[16]は、分岐理論による流れの解析を行い、キャビティの両側の壁付近に特徴的な流れが生じることを示した。Carpenterら[17]、Zebibら[18]は、正方形キャビティ内のマランゴニ対流に関して数値シミュレーションを行い、無次元量を用いて流れの特性を解析した。しかし、浅いキャビティ内のマランゴニ対流についての数値シミュレーション結果はほとんどない。浅いキャビティ内のマランゴニ対流は、金属溶融過程における表面付近の流れをモデル化したものと考えることができ、このモデルによる流れを研究することは金属溶融過程を知る上でも有用である。

本論文では、上記の問題点を考慮しながら行った数値シミュレーションの結果について述べる。まず第2章では、金属表面に高熱流束の電子ビームを照射した時の金属溶融の非定常過程について、数値シミュレーションを行った結果について示す。第3章では、対流項差分QUICK法を取り上げ、その特性について明らかにする。また、溶融層の表面付近の流れに注目し、浅いキャビティ内のマランゴニ対流の特性を明らかにする。第4章では、金属溶融数値シミュレーションに用いた融解熱モデルを1次元2相ステファン問題に適用し、他の解法と比較することによって融解熱モデルの妥当性について述べる。

## 第 2 章 金属溶融過程の数値シミュレーション

本章では、金属溶融過程の非定常数値シミュレーションを行い、溶融層固液境界面の時間発展、金属内の温度分布、および溶融層内の速度場を求めた結果について述べる。

### 2.1 解析モデル

#### 2.1.1 計算領域

金属の溶融過程を数値シミュレーションするために、図 2.1 の様な 2 次元直交座標によるモデル領域を考える。この領域に対して、金属上部表面にビームによる熱流束を与え、溶融層の時間発展を求める。このモデルでは次の仮定をする。まず溶融部は、非圧縮性の層流とする。また、溶融層表面は常に平らである。密度変化による浮力の効果は、ブシネ近似 (Boussinesq Approximation) でモデルに取り入れる。物性値は、液体、固体それぞれで一定の値をとるものとする。図 2.1 の側面および下面は断熱条件としている。この条件は、短い照射時間の範囲内では実験結果から妥当であることが分かっている。また、計算は領域の中心軸に沿って対称であるから、右側半分を計算領域とした。

#### 2.1.2 基礎方程式

非圧縮性流体を解析するには、非圧縮性ナビエーストークス方程式を用いる。また、温度分布を求めるためには、エネルギー方程式を用いる。解析に用いた基礎方程式を以下に示す [19, 20]。

- 連続方程式

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (2.1)$$

- ナビエーストークス方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \Delta u \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \Delta v + \beta g(T - T_{ref}) \quad (2.3)$$

- エネルギー方程式

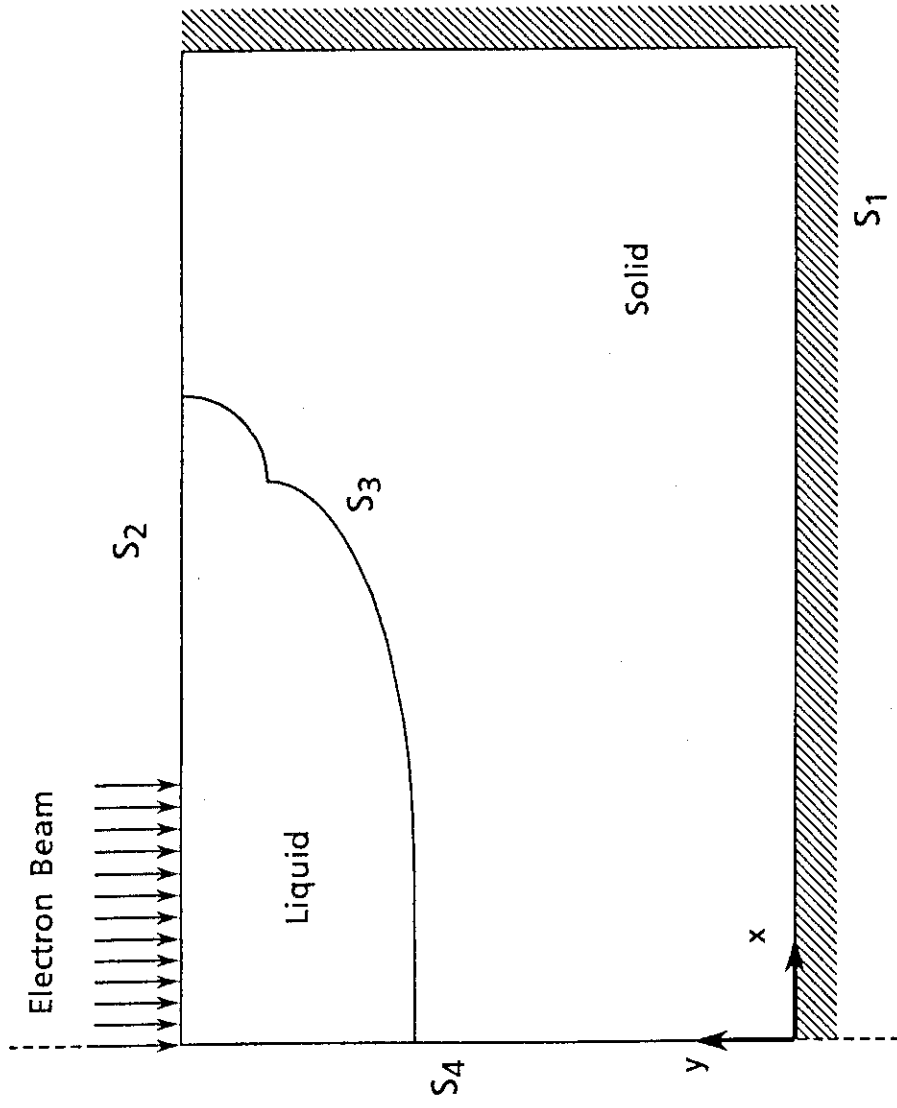


図 2.1 計算領域

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \kappa \Delta T \quad (2.4)$$

ここで,  $u$ ,  $v$  はそれぞれ  $x$  方向,  $y$  方向の速度 (m/s),  $T$  は温度 (K),  $T_{ref}$  は基準温度,  $p$  は圧力 (Pa),  $\rho$ ,  $\kappa$ ,  $\nu$ ,  $\beta$ ,  $g$  は密度 ( $\text{kg/m}^3$ ), 熱拡散率 ( $\text{m}^2/\text{s}$ ), 動粘度 ( $\text{m}^2/\text{s}$ ), 体膨張率 ( $1/\text{K}$ ), 重力加速度 ( $\text{m/s}^2$ ) である. また,  $\Delta$  はラプラシアン (Laplacian) である. 式 (2.1) は非圧縮性を考慮した連続方程式である. (2.2), (2.3) はナビエーストックス方程式であり, 運動量保存則を表わしている. 式 (2.4) は温度に関する移流拡散方程式であり, エネルギー保存則を表わしている.

計算領域の側面および底面を  $S_1$ , 表面を  $S_2$ , 固液境界面を  $S_3$ , 対称軸を  $S_4$  とする. また, 表面の溶融層部分を  $\bar{S}_2$ , 対称軸の溶融層部分を  $\bar{S}_4$  とする (図 2.1). これらの境界で次の境界条件を考える.

- 温度  $T$  に関する境界条件

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0 \quad \text{on } S_1 \quad (2.5)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial y} = q_{in} + q_{evp} + q_{emi} \quad \text{on } S_2 \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad \text{on } S_4 \quad (2.7)$$

- 速度  $u$ ,  $v$  に関する境界条件

$$\mu \frac{\partial u}{\partial y} = - \left( \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad v = 0 \quad \text{on } \bar{S}_2 \quad (2.8)$$

$$u = v = 0 \quad \text{on } S_3 \quad (2.9)$$

$$u = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \quad \text{on } \bar{S}_4 \quad (2.10)$$

温度に関しては, 対称軸 ( $S_4$ ) にそって対称条件, 側面及び底面 ( $S_1$ ) では断熱条件 (ノイマン条件), 表面 ( $S_2$ ) には熱流束条件を与える.  $q_{in}$ ,  $q_{evp}$ ,  $q_{emi}$  はそれぞれビームによる入力熱流束, 蒸発による熱流束, 輻射による熱流束 ( $\text{W/m}^2$ ) を示している.  $k$  は熱伝導率 ( $\text{W/m} \cdot \text{K}$ ) である. 輻射率は 0.3 と仮定した.

速度に関しては, 対称軸 ( $\bar{S}_4$ ) にそって対称条件, 固液境界面 ( $S_3$ ) に対して流体が滑らない no-slip 条件を与える. 溶融層上部 ( $\bar{S}_2$ ) では,  $u$  に関しては応力が溶融層表面の温度勾配に比例するマランゴニ条件 (式 2.8) を考え, 溶融層上部の  $y$  方向速度  $v$  については 0 とした. ここで,  $\sigma$ ,  $\mu$  はそれぞれ表面張力 (N/m), 粘度 ( $\text{Pa} \cdot \text{s}$ ) である. 表面張力については, 温度に関して線形であると仮定する. 表面張力の温度変化の項  $\frac{\partial \sigma}{\partial T}$  は定数となり, 実験によって求められている.

### 2.1.3 融解熱モデルと蒸発熱モデル

固液境界面の移動を熱流束の収支の意味で厳密な形で求めるためには、一般にはステファン条件を考慮した自由境界問題を解かなければならない。ステファン問題では、固体及び液体両側からの熱流束の差が潜熱と等しいとにおいて境界の移動を求める。しかし、境界の形状が複雑である場合、また差分法で解く場合にはアルゴリズムが複雑になる。ここでは、融点 ( $T_{melt}$ ) 近傍のある温度幅 ( $T_w$ ) に入る計算格子の比熱を大きくすることによって融解熱を取入れるモデルを考える (図 2.2) [12, 21]。このモデルは以下の式で表わされる。

$$c = \begin{cases} c_l & T < T_{melt} - \frac{T_w}{2} \\ \frac{c_l + c_s}{2} + \frac{L}{T_w} & |T - T_{melt}| \leq \frac{T_w}{2} \\ c_s & T > T_{melt} + \frac{T_w}{2} \end{cases} \quad (2.11)$$

ここで、 $c_l$ ,  $c_s$ ,  $L$  はそれぞれ液体の比熱 ( $J/kg \cdot deg$ )、固体の比熱、融解熱 ( $J/kg$ ) である。

また、蒸発熱モデルは次の経験式を用いた [22]。

$$\alpha_v = 4.4 \times 10^{-3} p_s \left( \frac{M_D}{T_v} \right)^{1/2} \quad (2.12)$$

ここで、 $\alpha_v$ ,  $p_s$ ,  $M_D$ ,  $T_v$  はそれぞれ蒸発率 ( $kg/m^2 \cdot s$ )、飽和蒸気圧 (Pa)、分子量、蒸気温度 (K) である。

## 2.2 数値計算法

### 2.2.1 差分法による離散化

基礎方程式は、スタッガード格子上で定義された各計算量のコントロール・ボリュームを考え、コントロール・ボリューム内で各量の保存則を満足するように離散化する [23]。スタッガード格子では、格子の中心でスカラー量 (温度, 圧力) を定義し、また各格子の境界でベクトル量 (速度) を定義するものである (図 2.3)。この格子を用いれば、コントロール・ボリュームにおける連続方程式の条件は境界上の速度を用いて自然な形で定義でき、また 2 つの隣り合った格子点間の圧力差が、これらの格子点間にある速度成分の駆動力として表現できる。これによって、ナビエーストークス方程式の圧力項を中心差分で離散化したときの圧力分布の食い違い誤差 (spurious error) を押えることができる。コントロール・ボリュームによる定式化では、常に境界面での値を考慮しその値に基づいて離散化を行う。

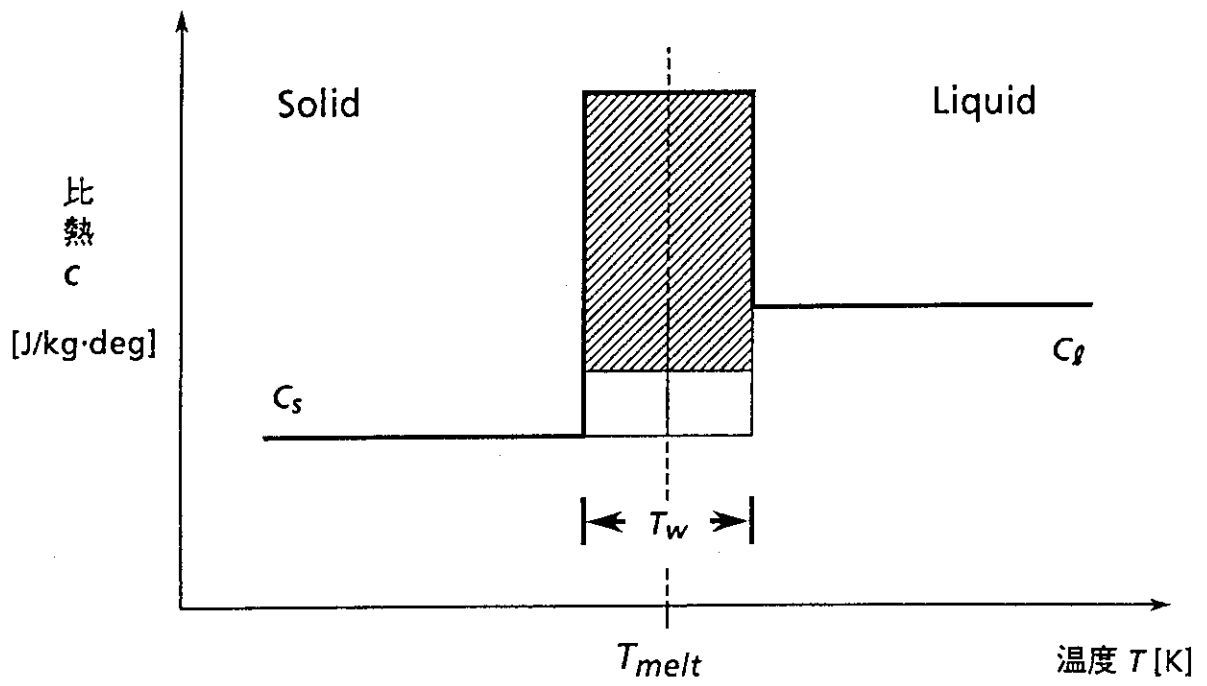


図 2.2 融解熱モデル

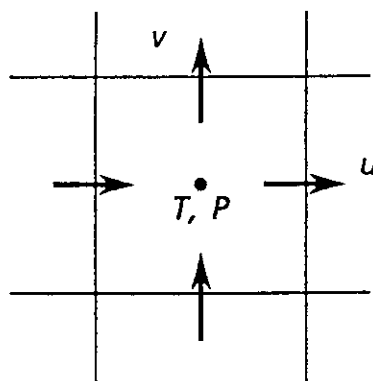


図 2.3 スタッガード格子



対流項差分は、1次風上差分法とQUICK法(Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics)を用いた。拡散項には2次精度中心差分を用いた。また、時間項の離散化には、エネルギー方程式に前進オイラー法、ナビエーストークス方程式に時間分割法[4]を用いた。これらはいずれも時間に関して1次の精度をもっている。

## 2.2.2 時間分割法

時間分割法(Time Splitting Method, Time Fractional Method)は、ナビエーストークス方程式を1ステップ時間発展させる時に、移流拡散による速度の変化と圧力勾配による速度の変化を分けて計算する方法である。アルゴリズムは以下の2つのステップで与えられる。

### • ステップ1

$$\frac{u^* - u^n}{\Delta t} + \frac{\partial(u^n u^n)}{\partial x} + \frac{\partial(v^n u^n)}{\partial y} = \nu \Delta u^n \quad (2.13)$$

$$\frac{v^* - v^n}{\Delta t} + \frac{\partial(u^n v^n)}{\partial x} + \frac{\partial(v^n v^n)}{\partial y} = \nu \Delta v^n + \beta g(T^{n+1} - T_{ref}) \quad (2.14)$$

### • ステップ2

$$\frac{u^{n+1} - u^*}{\Delta t} + \frac{\partial p^{n+1}}{\partial x} = 0 \quad (2.15)$$

$$\frac{v^{n+1} - v^*}{\Delta t} + \frac{\partial p^{n+1}}{\partial y} = 0 \quad (2.16)$$

$$\text{subject to} \quad \frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} + \frac{\partial v^{n+1}}{\partial y} = 0 \quad (2.17)$$

$$\Delta p^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (2.18)$$

ステップ1では、ナビエーストークス方程式から圧力勾配項を取り除いた式を離散化して中間の速度  $u^*$ ,  $v^*$  を求める。ステップ2では、 $u^*$ ,  $v^*$  を用い、第  $n+1$  時間ステップの圧力勾配から速度を求めている。ここで、圧力の第  $n+1$  時間ステップの値は、式(2.18)のポアソン方程式を解いて求める。このポアソン方程式は、式(2.15)、式(2.16)の発散を取り、式(2.17)の条件を考慮することによって得られる。ポアソン方程式の境界条件は、境界の法線方向の圧力勾配を0とおくノイマン条件を与える。

### 2.2.3 対流項差分法

コントロール・ボリュームによる定式化における1階微分の差分近似は、コントロール・ボリューム境界面の値を用いた中心差分によって定義される。したがって、離散点  $i$  における差分式は次のようになる。

$$\left. \frac{\partial(uT)}{\partial x} \right|_i = \frac{(uT)_e - (uT)_w}{\Delta x} \quad (2.19)$$

式(2.19)において、 $e$ 、 $w$ はそれぞれコントロール・ボリュームの右側境界面での値、左側境界面での値を示している。 $\Delta x$ はコントロール・ボリュームの幅である。

本シミュレーションで対流項に用いた差分法は、1次風上差分法とQUICK法であり、コントロール・ボリューム境界面の値はそれぞれ以下の式で定義される(図2.4)。

- 1次風上差分法

$$(uT)_e = u_e \frac{T_{i+1} + T_i}{2} + |u_e| \frac{T_i - T_{i+1}}{2} \quad (2.20)$$

- QUICK法

$$(uT)_e = u_e \frac{-T_{i+2} + 9T_{i+1} + 9T_i - T_{i-1}}{16} + |u_e| \frac{T_{i+2} - 3T_{i+1} + 3T_i - T_{i-1}}{16} \quad (2.21)$$

$u_e$ は速度の境界面での値である。1次風上差分法では、常に上流側のスカラ点の値を境界での値とする。

また、QUICK法では、コントロール・ボリューム境界での流速を見て、上流側2点、下流側1点から2次関数による補間を行い境界の値を求めている。このため、コントロール・ボリューム境界面で補間した値は刻み幅に対して3次精度の近似になっているが、式(2.19)の1階微分値は2次精度である。

### 2.2.4 全体アルゴリズム

金属溶融過程の数値シミュレーションを行うアルゴリズムは次のようになる。

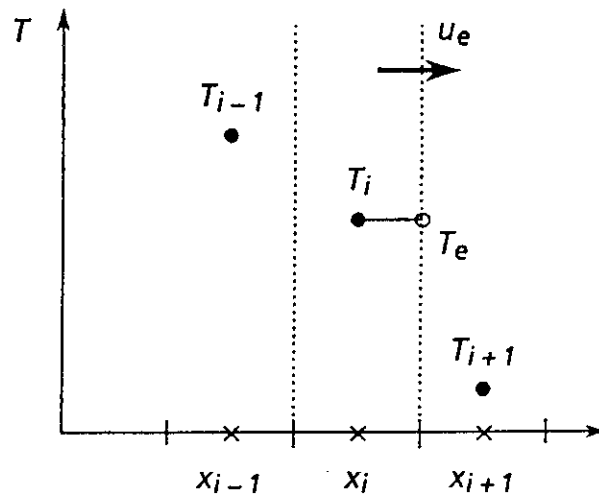
初期設定 ( $T^0$ ,  $u^0$ ,  $v^0$ ) をする。

$n \leftarrow 0$ .

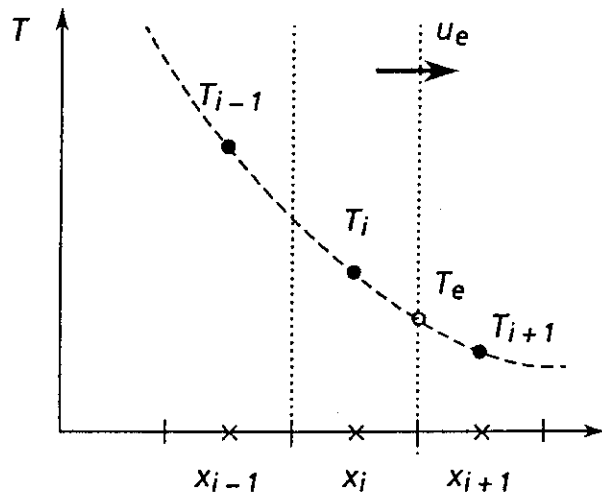
repeat 熱伝導方程式を解いて、 $T^{n+1}$ を求める。

$T^{n+1}$  を用いて固液境界を移動する。

until 溶融層ができるまで。



(a) 1次風上差分法



(b) QUICK法

図 2.4 コントロール・ボリューム境界面での値

```

while シミュレーション時間 ( $n \cdot \Delta t$ ) < 照射終了時間.
do エネルギー方程式を解いて,  $T^{n+1}$  を求める.
    $T^{n+1}$  を用いて固液境界を移動する.
   時間分割法によって, ナビエーストックス方程式を解く.
   中間の速度  $u^*, v^*$  を求める.
    $u^*, v^*$  を用い,  $p^{n+1}$  に関するポアソン方程式を解く.
    $p^{n+1}$  を用いて,  $u^{n+1}, v^{n+1}$  を求める.
n ← n + 1

```

固液境界面の移動は、スカラ点における温度と融点を比較して、融点よりも大きいときはその格子が溶融層であると判定している。

ナビエーストックス方程式は全計算領域で解かず、溶融層部分を含むなるべく小さい長方形領域(流体計算領域)に限定して解き、計算時間を短くしている。しかし、シミュレーション終了時刻での溶融層の大きさは予測できないから、流体計算領域は動的に変化させなければならない。溶融層は時間と共に徐々に大きくなっていくため、ある時点で設定した流体計算領域よりも大きくなった時点で、新たにより大きい流体計算領域を再設定する。また、この流体計算領域には固体の部分も含まれているが、固体側の流速を0とおくことによって、同じアルゴリズムが適用できる。

圧力場は、ポアソン方程式を5点差分で離散化することによって得られた対称行列を係数にもつ連立一次方程式を、前処理つき共役勾配法 (ICCG 法)[2] を用いて求める。流体計算領域に含まれる固体部分の係数については、対角項を1、その他の項を0とおいて、圧力0の値を設定している。ICCG 法はリストベクトルを用いた超平面法によってベクトル計算しているが、流体計算領域が再設定される時点でリストベクトルを更新する必要がある。

## 2.3 数値計算結果及び考察

この節では、2.2.4 節で示したアルゴリズムを用いて実際に行った数値シミュレーションの結果について述べる。

### 2.3.1 計算条件

山崎らの実験結果 [14] と比較するために、実験で用いた条件を計算条件とした。実験に用いた試験体はアルミニウム金属で、その大きさは縦横 50mm、厚さ 10mm である。この試験体を真空容器内に設置し、アルミニウム表面の 13mm 四方の領域に電子ビームをあてた。電子ビームは、最大出力 60kW、ビームエネルギー 100kV の電子銃で発生し、最大 1MHz の周期で走査し

た。照射時間はプラズマ・ディスラプションの時間を考慮して200msとしている。このときの熱流束は、カロリメーターとファラディ・カップではほぼ  $102 \text{ MW/m}^2$  と計測された。

数値計算領域は水平方向 15mm、深さ方向 10mm とし、照射長さは対称軸から 6.5mm の領域とした。計算に用いられたアルミニウムの物性値を表 2.1 に示す [24]。数値計算結果に対する差分格子数の影響を見るため、 $400 \times 267$  (水平方向分割数  $\times$  縦方向分割数) を基本ケースとし、 $200 \times 134$ 、 $300 \times 200$ 、 $500 \times 334$ 、 $600 \times 400$  の 5 つのケースを考えた。対流項差分は QUICK 法を基本ケースとし、比較のために 1 次風上差分法により  $300 \times 200$ 、 $400 \times 267$  の場合について計算した。初期温度分布は、室温の 300K とした。

使用した計算機は、FACOM VP-2600、VP-100 であり、計算はすべて倍精度で行った。ポアソン方程式の ICCG 法による収束条件は、残差の最大値ノルムが  $10^{-5}$  になるまで反復させた。時間刻み幅は、圧力場が発散しないようにとった。

表 2.1 アルミニウムの物性値

融点	933.5	K
密度	$2.37 \times 10^3$	$\text{kg/m}^3$
粘度	$4.5 \times 10^{-3}$	$\text{Pa} \cdot \text{s}$
比熱 (固体)	$1.1 \times 10^3$	$\text{J/kg} \cdot \text{deg}$
(液体)	$1.1 \times 10^3$	$\text{J/kg} \cdot \text{deg}$
熱伝導率 (固体)	233	$\text{W/m} \cdot \text{K}$
(液体)	92	$\text{W/m} \cdot \text{K}$
蒸発熱	$1.09 \times 10^7$	$\text{J/kg}$
融解熱	$3.59 \times 10^5$	$\text{J/kg}$
表面張力係数	$0.35 \times 10^{-3}$	$\text{N/m} \cdot \text{deg}$
原子量	27	

### 2.3.2 基本ケースの結果

ここでは、基本ケース (計算格子数  $400 \times 267$ 、QUICK 法) に対しての計算結果について述べる。

図 2.5 は、シミュレーション終了の 200ms までの固液境界の位置変化を 20ms 毎に示したものである。計算領域は水平方向の長さが 15mm、深さ方向の長さが 10mm である。この図から、時間とともに金属表面の薄い層の周辺部が溶けているのが分かる。

固液境界面について、実験結果、1次風上差分法による計算結果、QUICK法による計算結果を比較した。図 2.6, 2.7 は、それぞれ 100ms 後と 200ms 後の固液境界面の位置を示したものである。実験結果の固液境界面は、電子ビームを照射して冷却した後、試験体を切断し光学顕微鏡を用いて位置測定をしている。照射終了後の凝固は急速におこるため、熔融層の形状は照射終了時点のものとはほとんど変わらない。対称モデルを考慮している計算結果と異なり実験結果は左右対称ではないので、図においては対称軸に関して左右両方の固液境界面を示している。

照射時間 100ms 後の熔融層の大きさを比較した図 2.6では、対流による効果を取り入れた数値シミュレーション結果が、熔融層の水平方向長さをほぼ推定できることが分かった。深さ方向については、実験よりもやや大きくなっている。

照射時間 200ms 後の熔融層の大きさを比較した図 2.7では、QUICK法によって求められた熔融層の水平方向長さが実験結果よりも小さくなっていることが分かる。実験結果の表面を見るとかなり変形しており、実験条件が解析モデルで考慮した計算条件とは必ずしも一致していないためであると考えられる。これは、蒸気流の反力などにより熔融層表面が振動していることが考えられる。また、より小さい熱流束を用いて、より良く制御された実験をすることも必要である。

また、これらの図では、熔融層の水平方向長さについて、1次風上差分法の結果がQUICK法による結果よりも大きくなっている。照射時間 200ms 後では一次風上差分法による結果が実験結果に近い。しかし、1次風上差分法には数値粘性が含まれており、数値計算結果は真のシミュレーション結果と言えない。200ms における最大速度で数値粘性を見積ると動粘度のほぼ 10 倍近い値を示し、熱拡散率もほぼ 2 倍になっている。このため、エネルギー方程式に関する計算ではより多くの熱が伝わっていることになり、ナビエーストークス方程式に関する計算では流れの効果が小さく評価されている。

図 2.8 に 200ms 後の熔融層内の流れの様子を流線によって示す。流線は、流れ関数の最大値と最小値を等間隔に分割して示した。これより、熔融層表面の薄い層に時計回りの流れが局在していることが分かる。また、熔融層周辺部には 2 つの渦ができてるのが特徴的である。熔融層下部の流れは反時計回りである。

図 2.9 は、200ms 後の温度分布を示している。等温線は、500K から 2200K まで 100K おきに描かれている。最高温度はビーム照射中心部で 2277K となっている。熔融層内では、流れによって複雑な温度分布が形成されている。

図 2.10, 2.11に、金属表面の速度分布及び温度分布の時間発展の様子を 20ms 毎に示す。表面速度は、熔融層周辺部で大きな値をもち、200ms 後ではほぼ 1.7 m/s になる。また、熔融層周辺部に速度の 2 つの極大点をもつことが明らかとなった。これは、図 2.8 に現れている 2 つの渦の影響である。金属表面の温度分布に関しても、熔融層周辺部において特徴的な分布をしている。温度勾配は、ビーム照射部でほぼ一定であるが、ビーム照射端部からしだいに大きくなり、周辺部

では一旦小さくなって最後にまた大きくなっている。ここでも、2つの渦の影響がでていることが分かる。

### 2.3.3 格子数の依存性について

計算結果に対する格子数の影響をみるために、QUICK法を用いた場合について水平方向の格子数を200, 300, 400, 500, 600と変化させて計算した。また、一次風上差分法を用いた場合について格子数300, 400のケースを計算しQUICK法と比較した。

図2.12に、溶融層の水平方向の長さを示す。横軸は格子数、縦軸は長さである。この図から、QUICK法では格子数依存性は、ほとんど見られない。一方一次風上差分法では、溶融層長さがかなり大きな値を示していることが分かる。これは、溶融層内の表面付近で水平方向の流れが大きいため、数値粘性によって実際の物性値よりも熱拡散率が大きくなり溶融が進んでいるものと考えられる。図2.13に、深さ方向の溶融層の長さを示す。深さ方向の溶融層長さは、QUICK法、一次風上差分法ともほぼ変わらない。これは、深さ方向の流れが小さいため、一次風上差分法の数値粘性の効果が小さいためである。

200ms後の溶融層表面の最大速度を図2.14に示す。QUICK法による溶融層表面の最大速度は、格子数600でほぼ一定の値に漸近しているのが分かる。この結果から、QUICK法で流れの速度を求めるためには、格子数をほぼ600程度に取れば良いことが分かった。一次風上差分法で求めた速度は、数値粘性により動粘度が大きく見積もられ、QUICK法よりも小さい値を示すことが分かった。

### 2.3.4 解析モデルの仮定に対する考察

ここでは、解析モデルで仮定したいくつかの条件について考察する。

非圧縮性流体の仮定、すなわち流体の密度が時間と共に変化しない条件が満たされるのは、圧力の時間変化と温度の時間変化が無視できる場合である。流速が音速と比較して小さいとき、すなわちマッハ数が小さいときに、圧力の時間変化は小さくなる。本シミュレーション結果から最大流速はほぼ1.7m/sであるのでこの条件は十分満足される。一方、温度の時間変化が大きい場合には、非圧縮性の仮定に影響を与える可能性がある。ここで、密度の相対変化はほぼ $\beta\Delta T$ であり、この量を見積ると約0.15となり圧縮性を考慮した連続方程式に15%程度影響を与えていることになる。本数値シミュレーションではこの効果をブシネ近似として取り入れている。

流体の密度変化は無視できても、温度変化による粘度の相対変化は0.6程度となり、粘度の変化がナビエーストックス方程式に与える影響は大きいと考えられる。そこで、非圧縮性を仮定して粘度を標準ケースの90%、80%としたときの数値シミュレーションを行い、粘度の数値計算結果への影響を調べた。この結果、溶融層形状や温度分布に対する標準ケースとの差異はほとんど

見られないことが確認された。

また、溶融層表面において速度の大きい流れが確認されているので、この領域で層流の仮定が満たされていない可能性がある。表面においてビーム照射部から外側に向う速度をもつ層を境界層と考えると、溶融層表面の境界層におけるレイノルズ数を計算したところ 200 程度となることが分かった。この値を平板上の平行流れにおける境界層のレイノルズ数 [25] と比較した結果、層流の仮定は妥当であることが明らかとなった。

溶融層の表面形状については、実験から平らでないことが分かっているので、自由表面を考慮した計算が必要と思われる (付録 A 参照)。しかし、表面が平らであるとの仮定は、ビーム照射下における金属の溶融過程を明らかにするための第 1 次近似として適当であると考えられる。従来、溶融層内の対流に関する数値シミュレーションは 1 次風上差分法を適用した結果が多く、また実験結果との比較もほとんどないので、表面が平らであると仮定した本数値シミュレーション結果は、マランゴニ対流の金属の溶融過程への影響を知る上で重要な結果であるといえる。



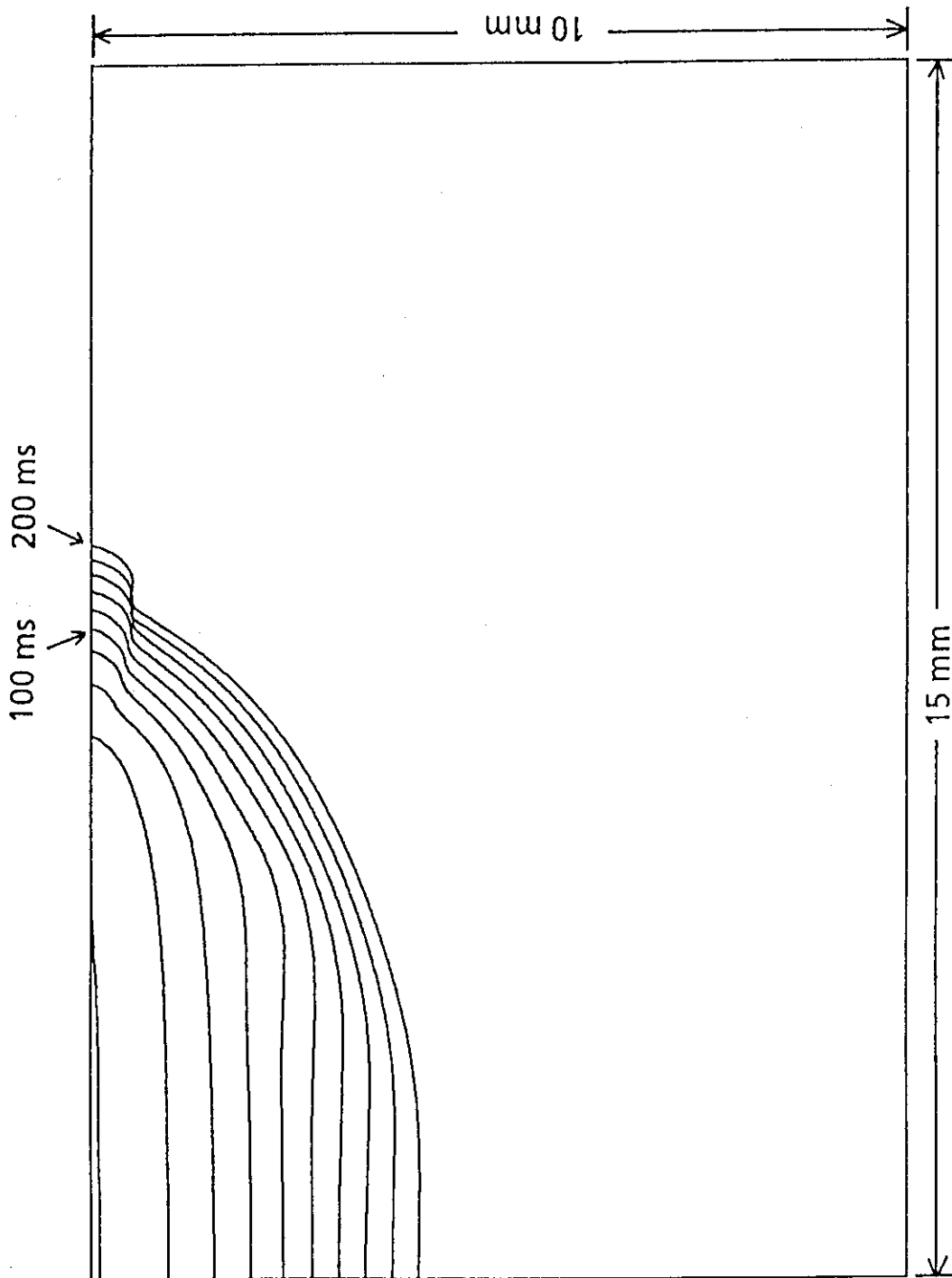


図 2.5 固液境界面の時間発展

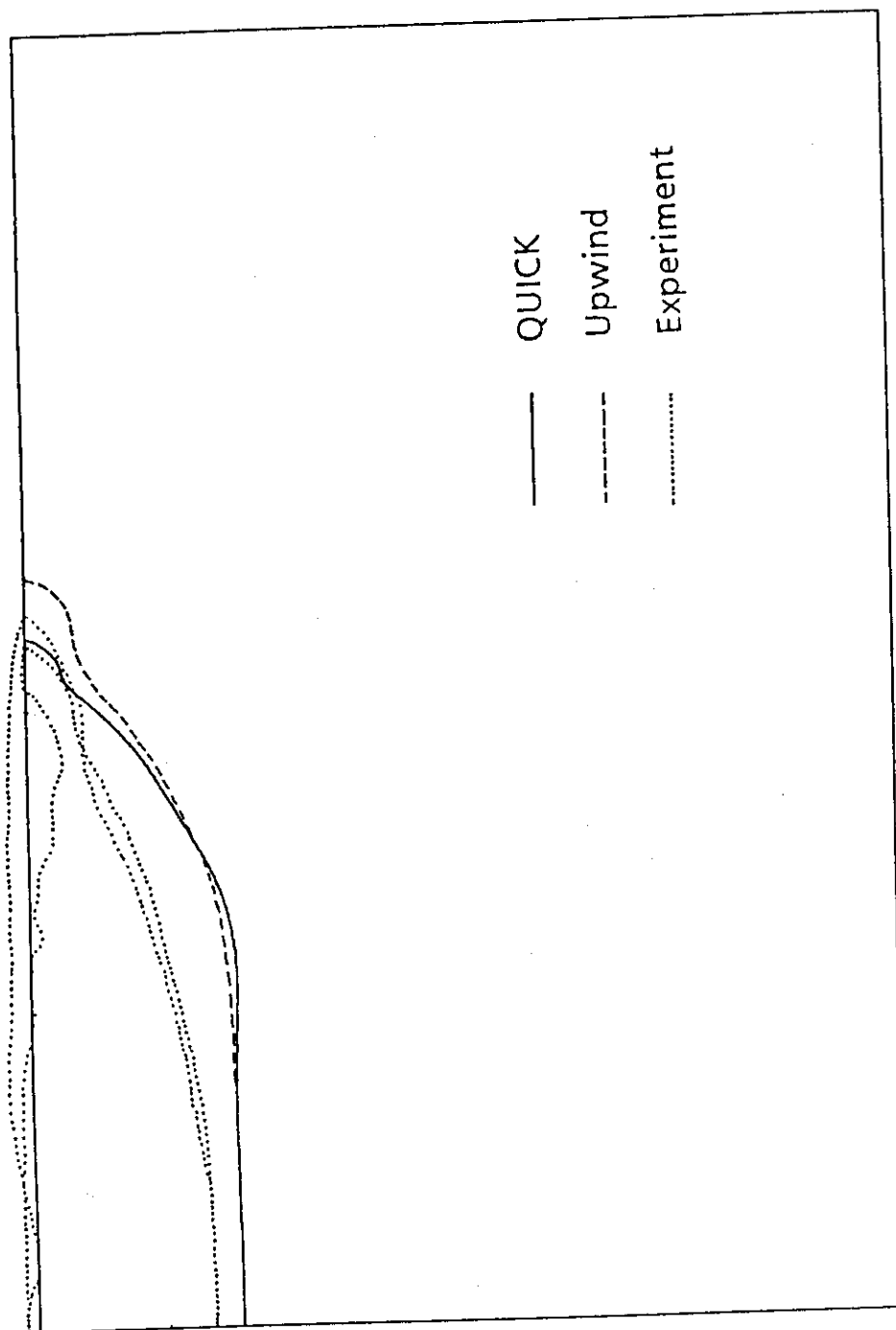


図 2.6 100ms 後の固液境界面の実験結果との比較

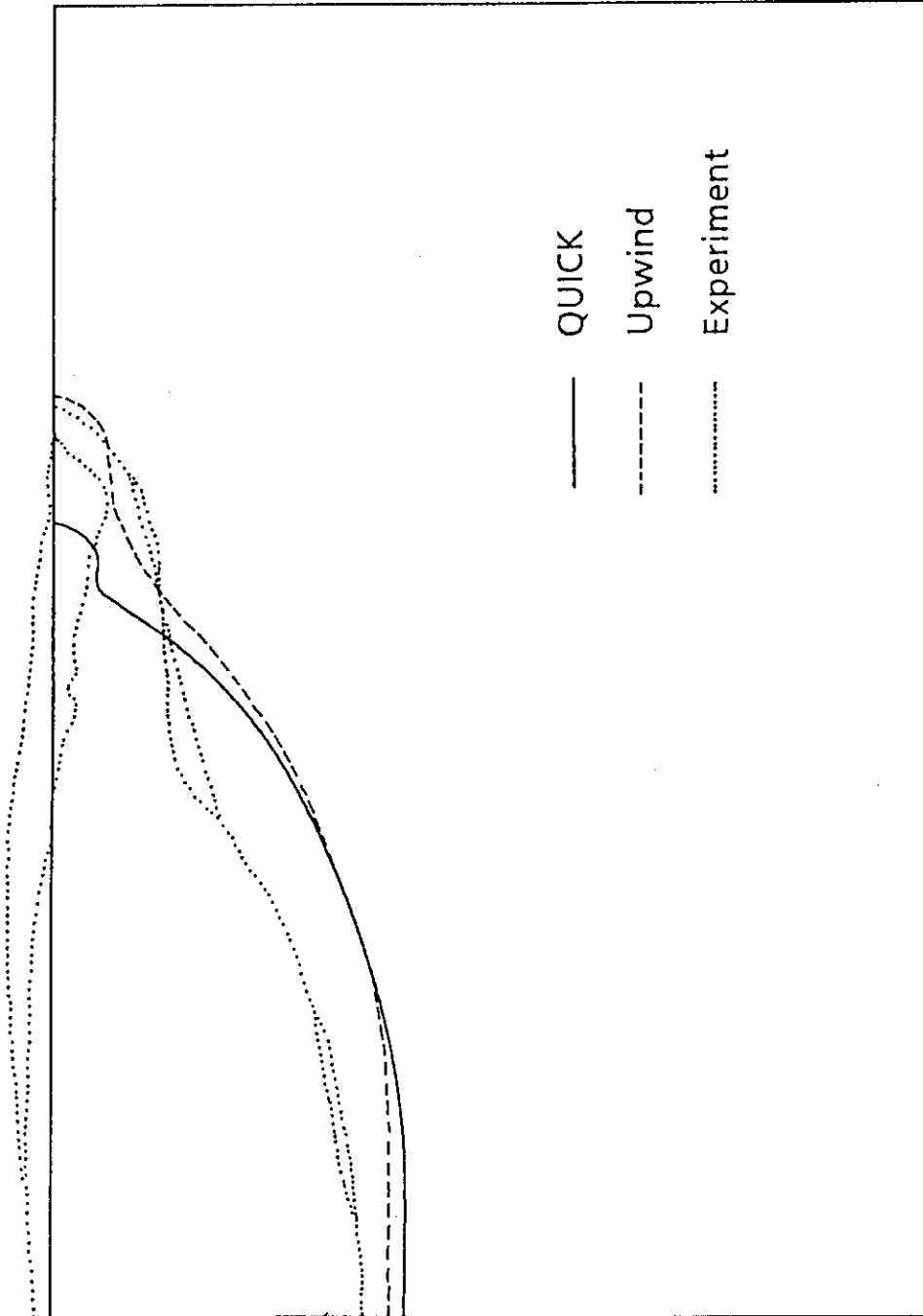


図 2.7 200ms 後の固液境界面の実験結果との比較

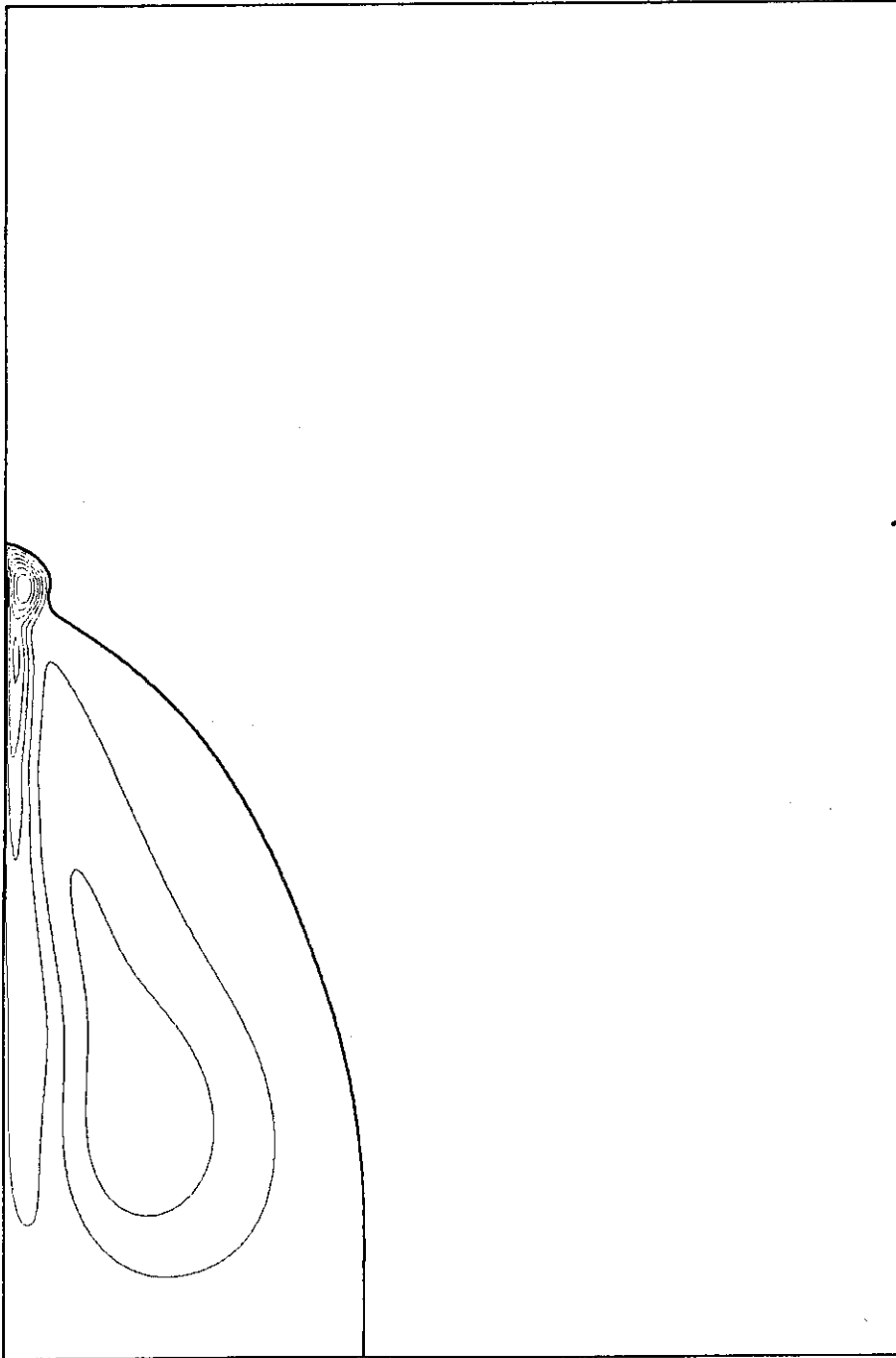


図 2.8 200ms 後の溶融層内の流線

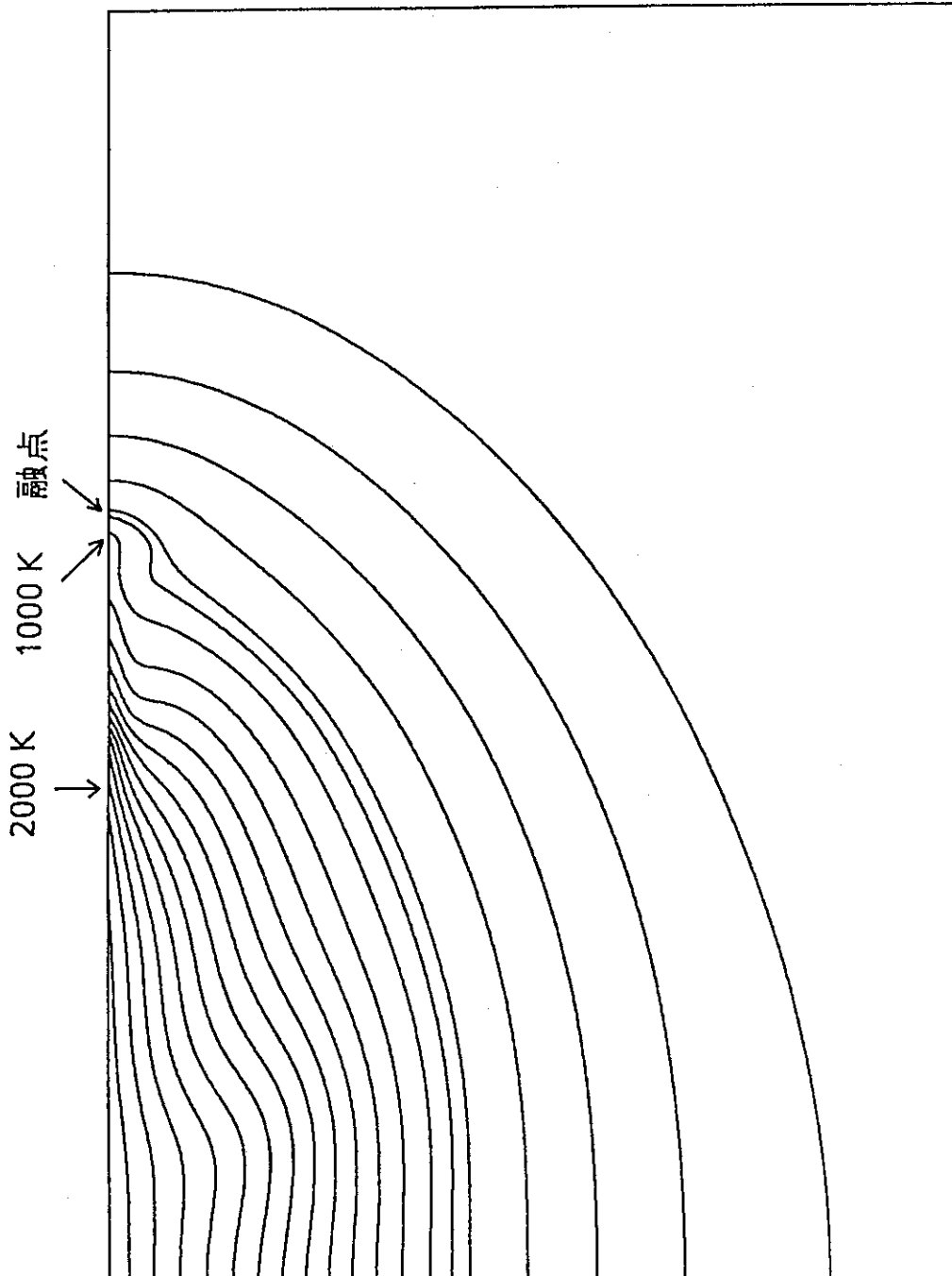


図 2.9 200ms 後の温度分布

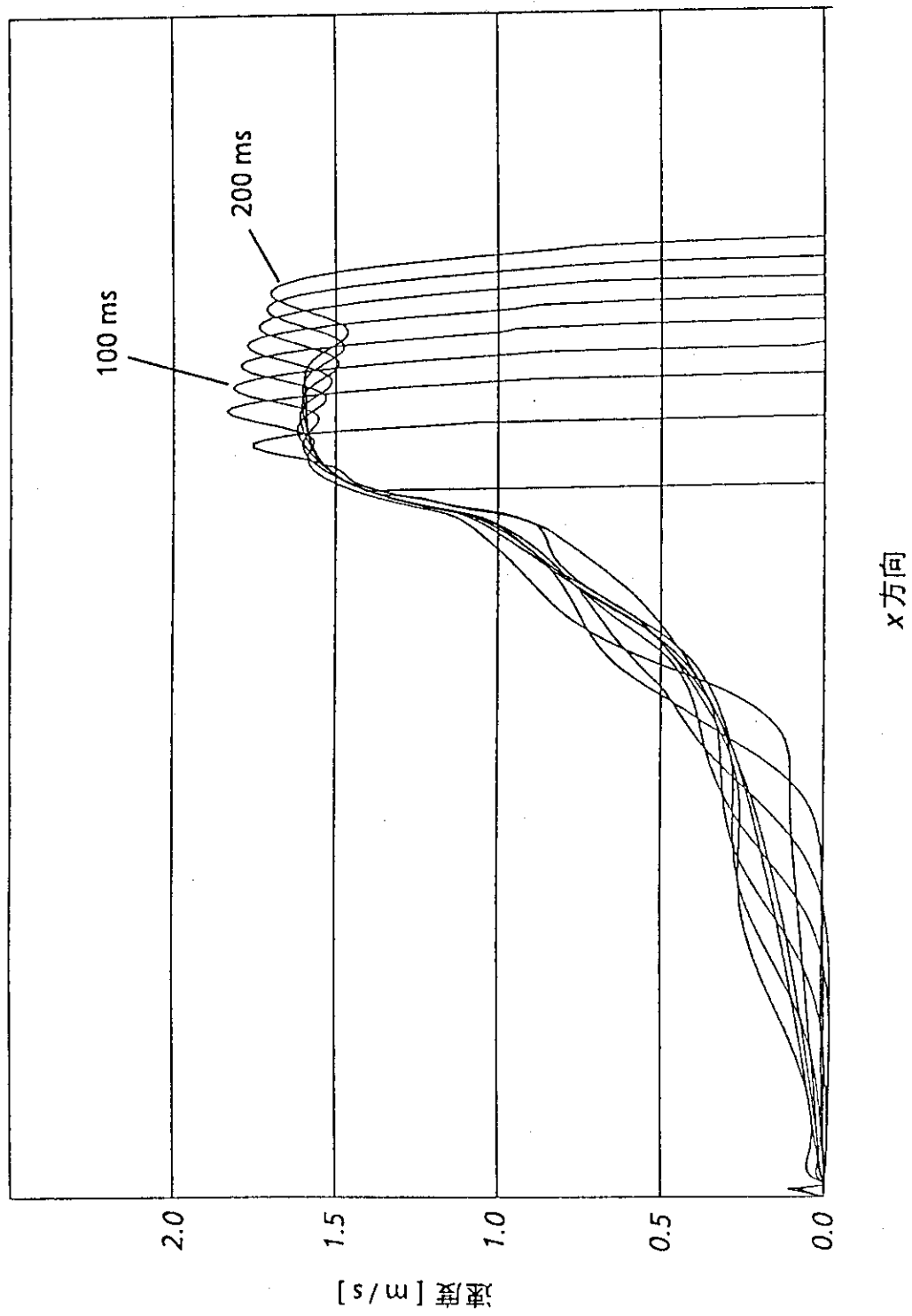


図 2.10 金属表面の速度分布

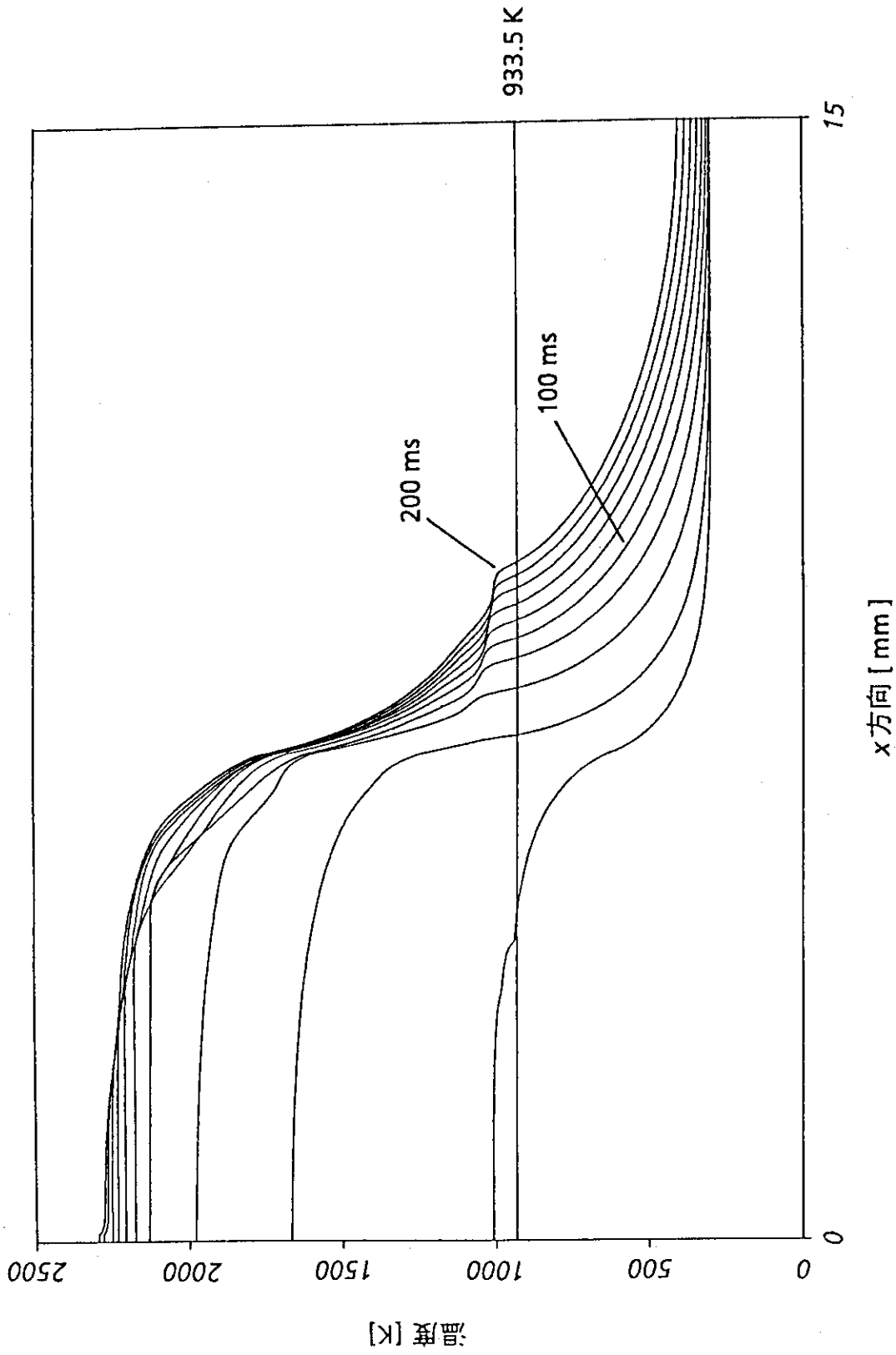


図 2.11 金属表面の温度分布

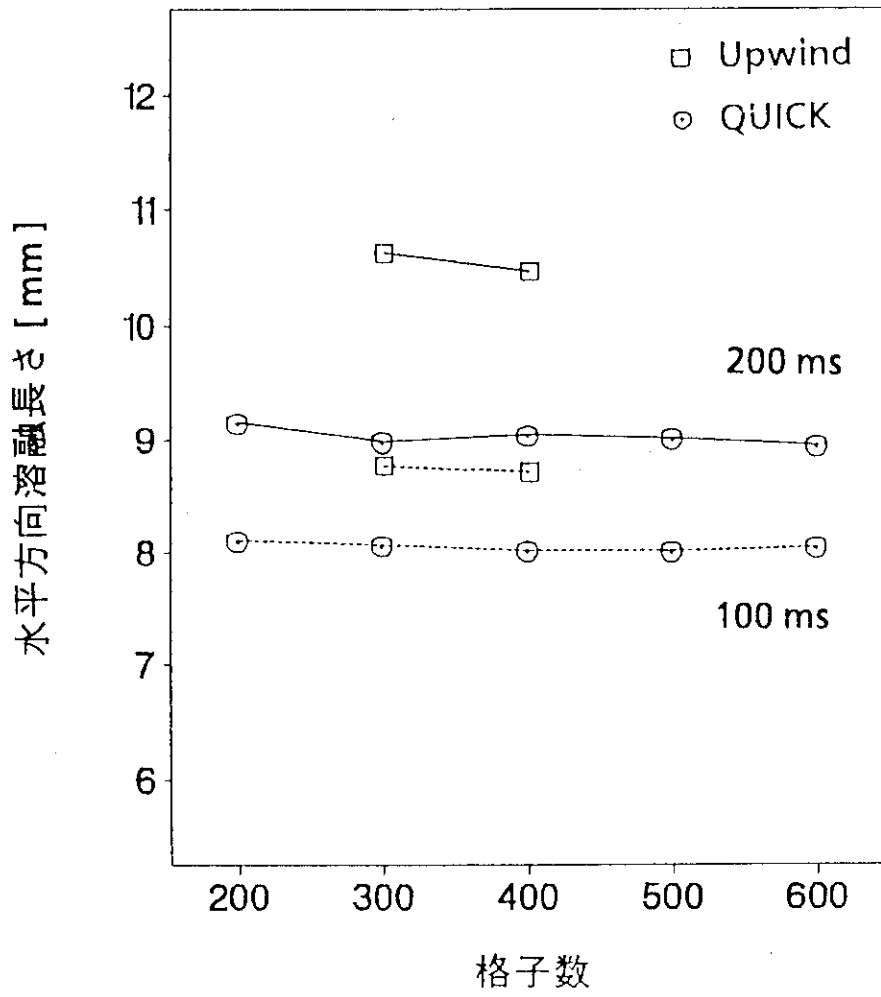


図 2.12 水平方向溶融長さ と 格子数 の 関係



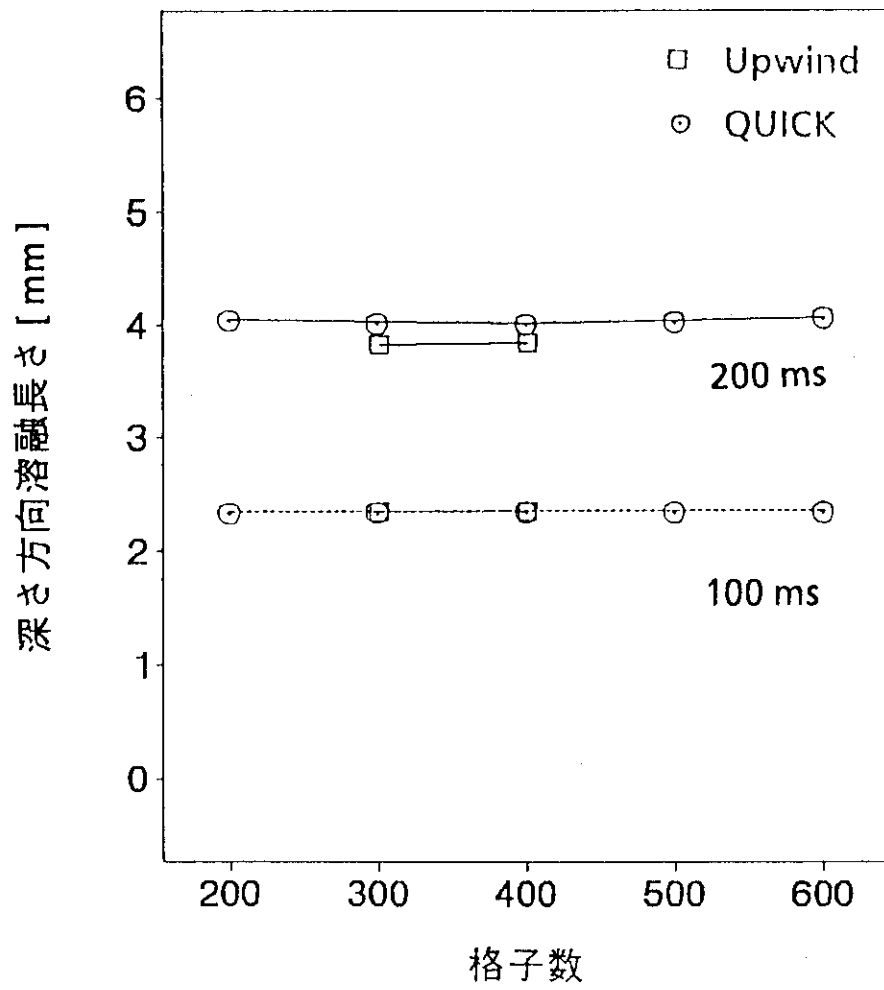


図 2.13 深さ方向溶融長さ と 格子数 の 関係

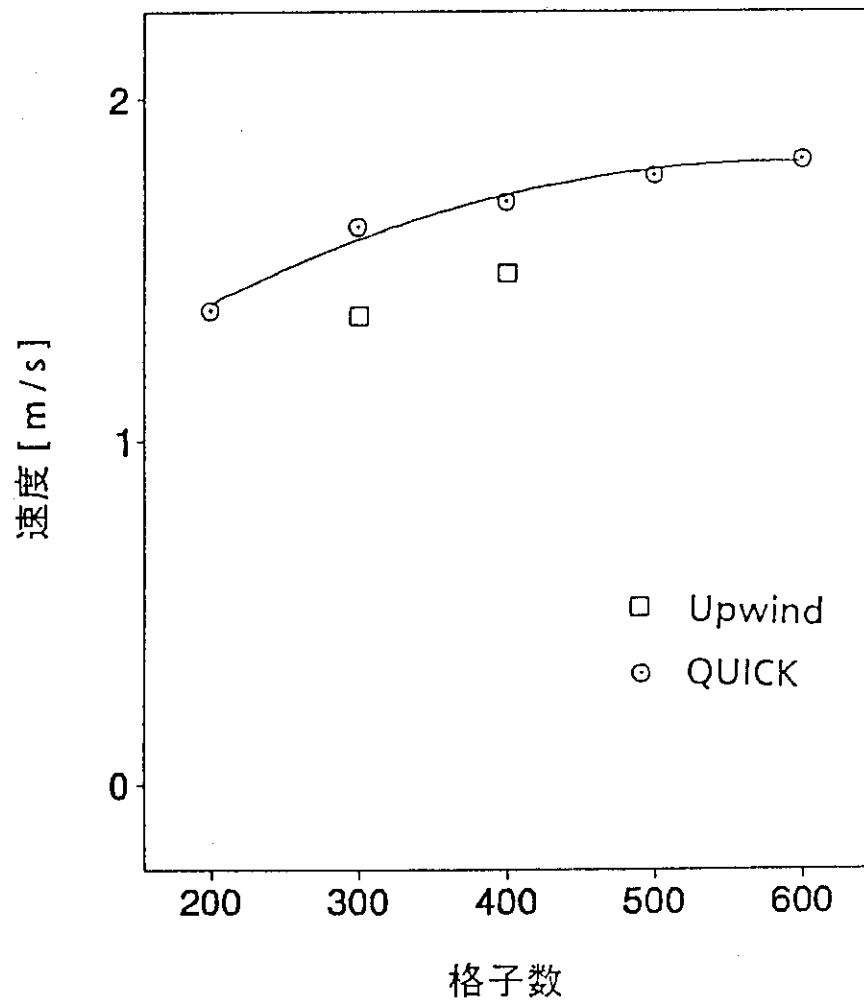


図 2.14 溶融層表面の最大速度 ( $t = 200\text{ms}$ )

## 第3章 浅いキャビティ内のマランゴニ対流の 数値シミュレーション

キャビティ内でのマランゴニ対流(Thermocapillary Convection)に関しては、自然対流(Natural Convection)の効果も含めた数値シミュレーションが様々な角度から行われている [15, 17, 18, 26, 27, 28, 29, 30, 31]。これらの数値シミュレーションは、ほとんどが正方形キャビティかキャビティの横の長さよりも縦の長さが大きい場合のものであり、マランゴニ対流よりもむしろ自然対流による流れの解析に主眼点がある。一方1990年には、Laure, Roux, Hadidは浅いキャビティ内のマランゴニ対流に関して分岐解の局所解析を行い [16]、その流れが無次元量マランゴニ数の増加と共に、低マランゴニ数でのクエット流れからしだいにキャビティの両側の壁付近に2種類の異なった流れを生じることを明らかにした。

この章では、第2章の数値シミュレーションの結果に見られた金属の溶融層表面に局在する特徴的な流れを浅いキャビティ内のマランゴニ対流としてモデル化し、その数値シミュレーションを行った結果について述べる。また、対流項の高次精度差分QUICK法についても、その適用性に関し詳しく検討する。

### 3.1 モデル化

高熱流束下における溶融層内の流れは、第2章の数値シミュレーションの結果からも分かるように溶融層表面付近の薄い層内に流れを形成する(図3.1)。この薄い層内の流れは、長さ9mm、高さ0.58mmの領域に限定され、表面の温度勾配によって引き起こされていると言える。この流れの特徴は、溶融層表面付近の低温側に2つの渦ができることであり、溶融層全体に広がる大きな渦とならないために表面付近の溶融層を広げる傾向がある。したがって、この特徴的な流れを調べておくことは、金属溶融層の解析に対しても重要である。

この流れを検討するために、図3.2に示す2次元の解析モデルを考えた。解析モデルでは、幅 $L$ 、高さ $H(H < L)$ のキャビティを考え、両側面に一定の温度 $T_H, T_L(T_H > T_L)$ を与えている。キャビティ内はすべて流体であるとする。溶融層内の数値シミュレーション結果は、上部表面に熱流束が入ってくるためこのモデルとは若干異なるが、表面温度勾配による流れの影響を見るモデルとしては適当である。この解析モデルに対して、ブシネ近似を考慮した非圧縮性ナビエーストークス方程式とエネルギー方程式を解く。エネルギー方程式に対する境界条件は、両側面で一

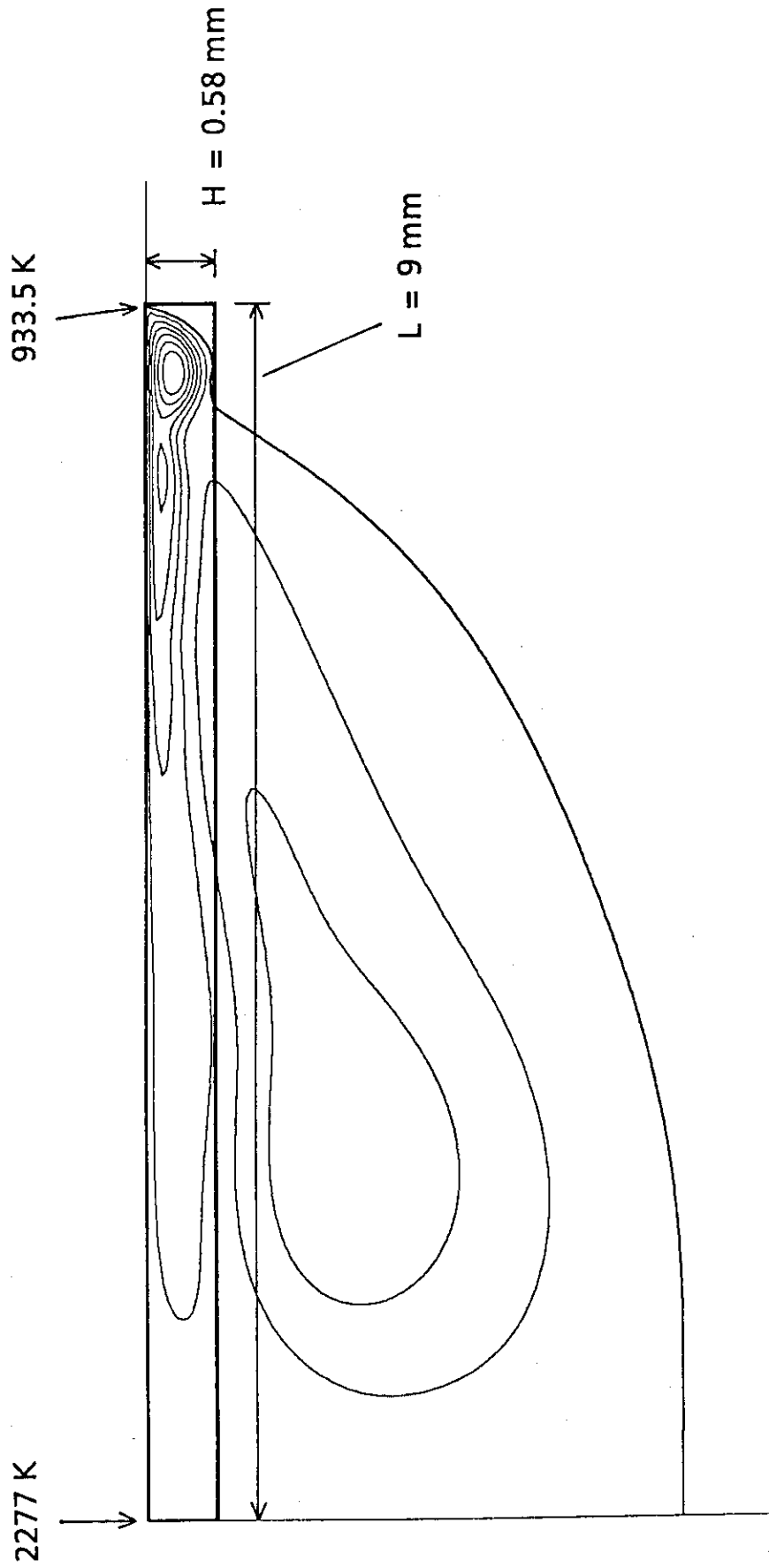


図 3.1 溶融層表面付近の流れ

定の温度を与えるディリクレ条件，上下面では断熱条件とした．また，ナビエーストークス方程式に対しては，側面及び下面では no-slip 条件，上面ではマランゴニ応力条件

$$\rho\nu \frac{\partial u}{\partial y} = - \left( \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (3.1)$$

を与える．ここで， $\sigma$ ， $\rho$ ， $\nu$ はそれぞれ表面張力，密度，粘度である．

問題を一般的にするために，適当な無次元数によってナビエーストークス方程式及びエネルギー方程式を無次元化し，無次元数によってこの流れを特徴付ける．無次元化の方法はいろいろ考えられるが，ここではマランゴニ応力条件(3.1)式の両辺の大きさを比較し，

$$\rho\nu \frac{\partial u}{\partial y} \sim \left( \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (3.2)$$

から代表速度  $u^*$  を導く．

$$u^* = \frac{\gamma H \Delta T}{\rho \nu L} \quad (3.3)$$

ここで， $\gamma = \frac{\partial \sigma}{\partial T}$ (定数)， $\Delta T = T_H - T_L$ である．また，代表長さを  $H$ にとれば，これからつぎの無次元量を得られる．

$$Ma = \frac{\gamma H^2 \Delta T}{\rho \nu \kappa L} \quad (3.4)$$

$$Pr = \nu / \kappa \quad (3.5)$$

$$Re = Ma / Pr \quad (3.6)$$

$$A = L / H \quad (3.7)$$

$$Ra = \frac{\beta g H^3 \Delta T}{\nu \kappa} \quad (3.8)$$

$Ma$ はマランゴニ数(あるいは，レイノルズ・マランゴニ数)， $Pr$ はプラントル数， $Re$ はレイノルズ数， $A$ はキャビティのアスペクト比， $Ra$ はレイリー数である．マランゴニ数とレイリー数の比はボンド数  $Bo(= Ma/Ra)$  と呼ばれる．また，時間のスケールは  $\frac{H^2}{\nu} \frac{Pr}{Ma}$  となる．

この無次元量を用いたとき，図 3.1 の薄い層内の流れは次の値で特徴付けられる．

$$Ma = 110.6$$

$$Pr = 0.054$$

$$Re = 2048.1$$

$$A = 15.5$$

$$Ra = 4.3$$

浅いキャビティ内のマランゴニ対流の数値シミュレーションでは，プラントル数，ボンド数，アスペクト比を一定にして，マランゴニ数を変化させたときの流れの特性を明らかにする．これは，物性値一定の場合にキャビティ両端の温度差を変化させたときの結果に対応している．

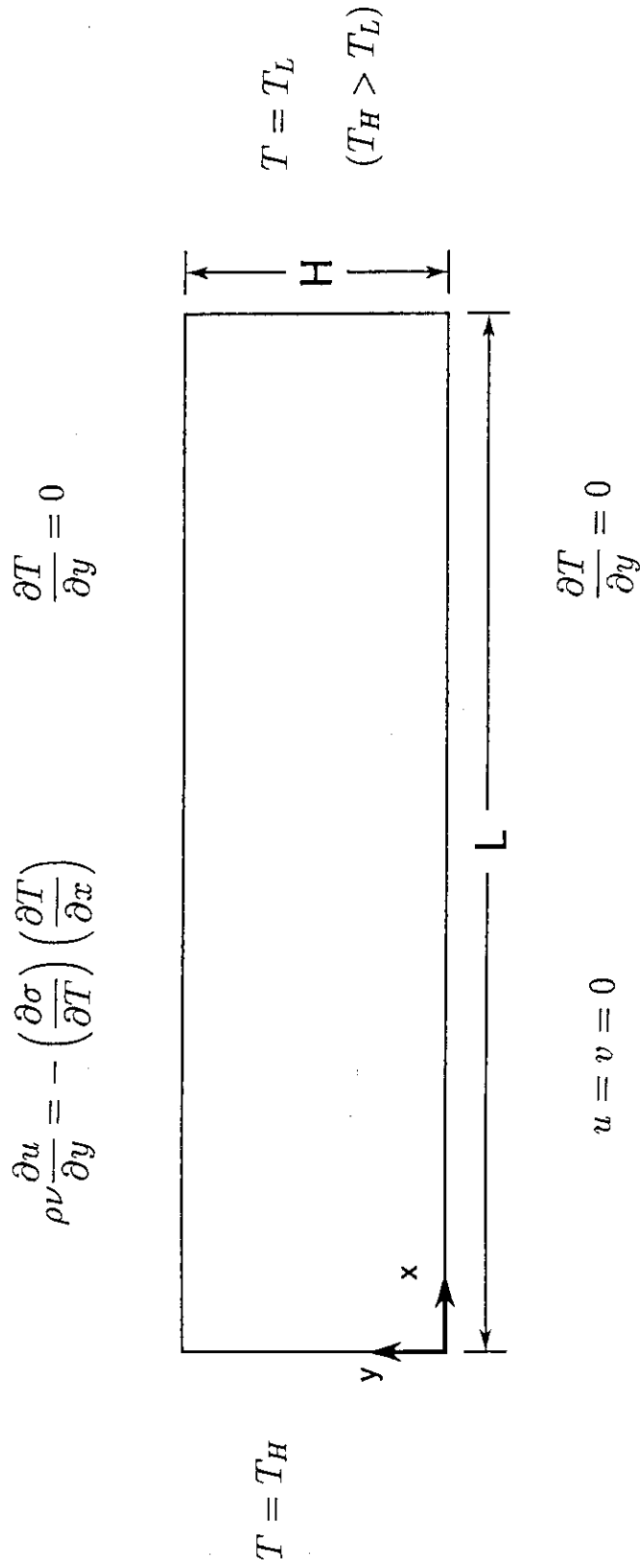


図 3.2 解析モデル

### 3.2 無次元化方程式

前節で導入した無次元量を用いて、ナビエーストークス方程式とエネルギー方程式を無次元化すると以下ようになる。

- 連続方程式

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.9)$$

- ナビエーストークス方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left( \frac{1}{A^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left( \frac{1}{A^2} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{Ra}{Re \cdot Ma} T \quad (3.11)$$

- エネルギー方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{1}{Ma} \left( \frac{1}{A^2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (3.12)$$

ここで、 $u$ 、 $v$ 、 $T$ はそれぞれ無次元化された  $x$  方向の速度、 $y$  方向の速度、温度を表わしている。また、境界条件は次の様に無次元化される。

$$u = 0, \quad v = 0, \quad T = 1 \quad (x = 0) \quad (3.13)$$

$$u = 0, \quad v = 0, \quad T = 0 \quad (x = 1) \quad (3.14)$$

$$u = 0, \quad v = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad (y = 0) \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{A} \frac{\partial T}{\partial x}, \quad v = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad (y = 1) \quad (3.16)$$

第2章と同様に、時間項はエネルギー方程式に関し前進オイラー法、ナビエーストークス方程式に関し時間分割法で離散化する。対流項については主にQUICK法を用い、比較のために1次風上差分法を用いている。圧力に関するポアソン方程式は5点差分で離散化し、得られた連立1次方程式をICCG法で解いた。このとき、解析モデルの流体領域の形状が一定であるため、連立1次方程式の係数行列は時間に関係なく一定である。したがって、係数行列は初期設定の時に1回作れば良く、またICCG法の前処理も初期設定の時にすれば良い。ICCG法の超平面法によるベクトル処理のためのリストベクトルも初期設定のときに1度作成すれば良い。

### 3.3 QUICK法について

拡散項よりも移流項の寄与が大きい移流拡散方程式を解く場合には、対流項に対する差分法がその数値解に大きな影響を与える。従来、流れの計算に良く用いられている1次風上差分法は、離散化によって生じる数値粘性の影響が無視できず、数値シミュレーションで求めたい流体の動粘度に対する計算ではなく、より粘度の大きい流体の計算をしている。最近では、高次精度の差分法が良く用いられるようになって来ているが、その特性についてはよく分かっておらず検討の余地を残している。

本節では、コントロール・ボリュームによる定式化で良く用いられる対流項差分QUICK法についてその適用条件を明らかにする。QUICK法は、Leonardによって提案された方法であり、その論文の中では移流拡散方程式に対しての安定性条件を導いている[6]。しかし、QUICK法を適用すると解は振動すること等が報告されているが、その原因は明らかにされていない。ここでは、なるべく対流項を誤差なく計算するという立場に立って、ナビエーストークス方程式の対流項のみを評価するために、1次元及び2次元の移流方程式を解析の対象とし、その計算安定領域について議論する。

#### 3.3.1 1次元移流方程式

スカラー量  $\phi$  に関する1次元移流方程式は、 $x$  方向の速度を  $u (> 0)$  とすると次の式で表わされる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (3.17)$$

この式に対して、時間項について前進オイラー法、移流項についてQUICK法を用いて差分化すると次の式が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} &= -\frac{u}{\Delta x} \cdot \frac{-\phi_{i+2}^n + 10\phi_{i+1}^n - 10\phi_{i-1}^n + \phi_{i-2}^n}{16} \\ &\quad + \frac{u}{\Delta x} \cdot \frac{\phi_{i+2}^n - 4\phi_{i+1}^n + 6\phi_i^n - 4\phi_{i-1}^n + \phi_{i-2}^n}{16} \end{aligned} \quad (3.18)$$

ここで、 $\Delta t$ 、 $\Delta x$  はそれぞれ時間刻み幅と空間刻み幅である。この差分化方程式の右辺に対して、テイラー展開による誤差評価をすると次の式が得られる。

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{u\phi^{(3)}}{24} \Delta x^2 - \frac{u\phi^{(4)}}{16} \Delta x^3 + O(\Delta x^4) \quad (3.19)$$



$\phi^{(3)}$ ,  $\phi^{(4)}$ は $\phi$ の3階, 4階微分である。この式から, 主要誤差項は空間刻み幅に対し2次精度であり, またその係数は3階の微分係数をもっているため解は振動的であることが分かる。QUICK法は, コントロール・ボリューム境界面において2次関数近似しているためその補間値は3次精度であると言えるが, コントロール・ボリュームによる定式化では結局のところ中心差分を行っているために2次精度になることは明らかである。

さらに, ノイマンの安定性解析を行った[33, 34]。ノイマンの安定性解析は, スカラ量 $\phi$ が1時間ステップ進められる時に各フーリエ係数がどう振る舞いをするか見る方法である。いま, 第 $n$ 時間ステップの値 $\phi^n$ の波数 $k$ のフーリエ係数を $\xi^n$ とする。このとき,  $\xi^n$ と $\xi^{n+1}$ との比を増幅係数 $g$ と呼び, その絶対値 $|g|$ を増幅率と呼ぶ。 $|g| < 1$ となることがノイマンの安定性条件である。式(3.18)に対する増幅係数は次の式で表わされる。

$$g = \frac{\xi^{n+1}}{\xi^n} = \left\{ 1 - \frac{c}{8}(\cos 2\beta - 4\cos\beta + 3) \right\} - \frac{ic}{8}(-\sin 2\beta + 10\sin\beta) \quad (3.20)$$

ここで,  $\beta = k\Delta x$ ,  $c = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$ である。 $c$ は1時間ステップの移動距離と計算格子幅との比を表わし, クーラン数と呼ばれている。クーラン数を0.1~1.0まで0.1づつ変化させてQUICK法の増幅率 $|g|$ と相対位相誤差をプロットしたのが図3.3(a), (b)である。図3.3(a)からクーラン数が0.1以下でなければ, 中間の波数成分が時間と共に増大し安定でないことが分かる。ただし, 同じ格子幅でクーラン数を小さくするためには時間刻み幅を小さくしなければならない。また, 図3.3(b)から相対位相誤差は高周波成分ほど大きいことが分かる。この位相のずれが解の振動を引き起こす。

ここで, 1次風上差分法と3次精度風上差分法UTOPIA (Uniformly Third-Order Polynomial Interpolation Algorithm)法の増幅率と相対位相誤差をQUICK法のものと比較してみる。それぞれの差分方程式は以下の式で与えられる。

- 1次風上差分法

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} = -u \frac{\phi_i^n - \phi_{i-1}^n}{\Delta x} \quad (3.21)$$

- 3次精度風上差分法

$$\begin{aligned} \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} = & -\frac{u}{\Delta x} \cdot \frac{-\phi_{i+2}^n + 8\phi_{i+1}^n - 8\phi_{i-1}^n + \phi_{i-2}^n}{12} \\ & -\frac{u}{\Delta x} \cdot \frac{\phi_{i+2}^n - 4\phi_{i+1}^n + 6\phi_i^n - 4\phi_{i-1}^n + \phi_{i-2}^n}{12} \end{aligned} \quad (3.22)$$

したがって, それぞれの増幅係数は以下の式で与えられる。

- 1次風上差分法

$$g = (1 - c + c \cos \beta) - i(c \sin \beta) \quad (3.23)$$

• 3次精度風上差分法

$$g = \left\{ 1 - \frac{c}{6}(\cos 2\beta - 4 \cos \beta + 3) \right\} - \frac{ic}{6}(\sin 2\beta + 8 \sin \beta) \quad (3.24)$$

図3.4, 3.5に, 1次風上差分法と3次精度風上差分法の増幅率と相対位相誤差を示す. 図3.4を見ると, 1次風上差分法はクーラン数が1.0以下の範囲内では増幅率が1.0以下となって常に安定である. これは, 数値粘性によって見掛け上の拡散項が加わるためであると考えられる. 位相のずれは, クーラン数に対して高周波成分が進んだり, 遅れたりする. 3次精度風上差分法の増幅率と相対位相誤差は, QUICK法のものによく似ている. テイラー展開による方法によってQUICK法は2次精度であることが確かめられたが, その挙動は3次精度風上差分法に似ていることが分かる.

### 3.3.2 2次元移流方程式

前節では, QUICK法を用いた時の移流項の近似誤差を小さくするためには, クーラン数を0.1以下にすることが必要であることが分かった. この結果を確認するために2次元の移流方程式を考え, 剛体回転場におけるスカラ輸送の問題を取り上げる.

2次元移流方程式は以下の式で与えられる.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \quad (3.25)$$

$[-1, 1] \times [-1, 1]$  を計算領域とし, 速度場として  $(u, v) = (-y, x)$  を与える. これは剛体回転を与える速度場であり, この領域上のスカラ量  $\phi(x, y, t)$  は時間と共に原点を中心とした円運動をする. この領域の上に, 次の式で表わされる座標  $(\frac{1}{2}, 0)$  を中心とした円錐形のスカラ量を初期値として与え, 原点の回りで1周させた後の形状がどのように変化するか調べた(図3.6).

$$\phi(x, y, 0) = \begin{cases} \sqrt{(x - \frac{1}{2})^2 + y^2} & (x - \frac{1}{2})^2 + y^2 \leq \frac{1}{16} \\ 0 & \text{その他} \end{cases} \quad (3.26)$$

式(3.25)の2次元移流方程式は, 時間項を前進オイラー法, 移流項をQUICK法で離散化した. クーラン数を円錐中心の半径  $r = 1/2$  で定義するとき, クーラン数を変化させて剛体回転場を1周させた後の円錐の形状を見たのが, 図3.7(a)~(d)である. クーラン数が小さくなるほど, 円錐後部の振動は小さくなっていくことが明らかである. クーラン数0.13以上では, 解が発散してしまい計算が安定に進まない. これらの図から, クーラン数0.1以下であれば, ほぼ上流側の振

動がおさまりに安定に解けていることが分かり、2次元でも1次元の結果と同様のことが言えることが分かった。図3.8に、1次風上差分法の結果を示す。数値粘性により、解が拡散していることが分かる。この比較により、移流項を近似する場合はクーラン数を小さくとしたQUICK法が良いことが分かった。

移流方程式は、ナビエーストークス方程式の対流項だけを考えていることになるから、ナビエーストークス方程式の対流項を振動なく計算するためには、最大速度点におけるクーラン数を評価しそれが0.1以下となるように時間刻み幅、空間刻み幅を設定すれば良い。一般に流速が大きい場合には、前進オイラー法の安定条件よりもきびしい条件となる。

- 0.1
- 0.2
- 0.3
- 0.4
- 0.5
- 0.6
- 0.7
- 0.8
- 0.9
- 1.0

クーラン数

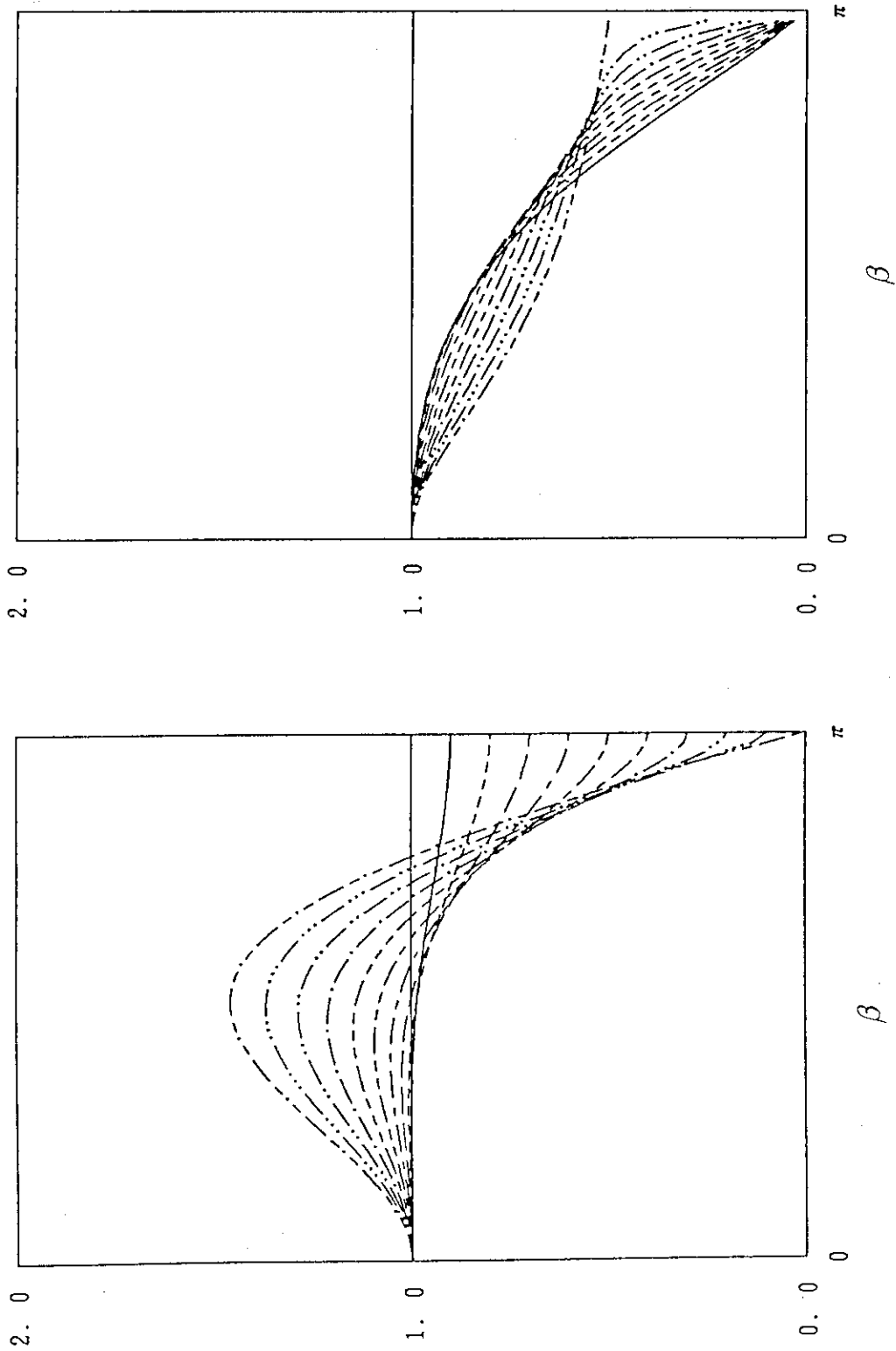


図 3.3 QUICK法の増幅率と相対位相誤差

- 0.1
- 0.2
- 0.3
- 0.4
- 0.5
- 0.6
- 0.7
- 0.8
- 0.9
- 1.0

クーラン数

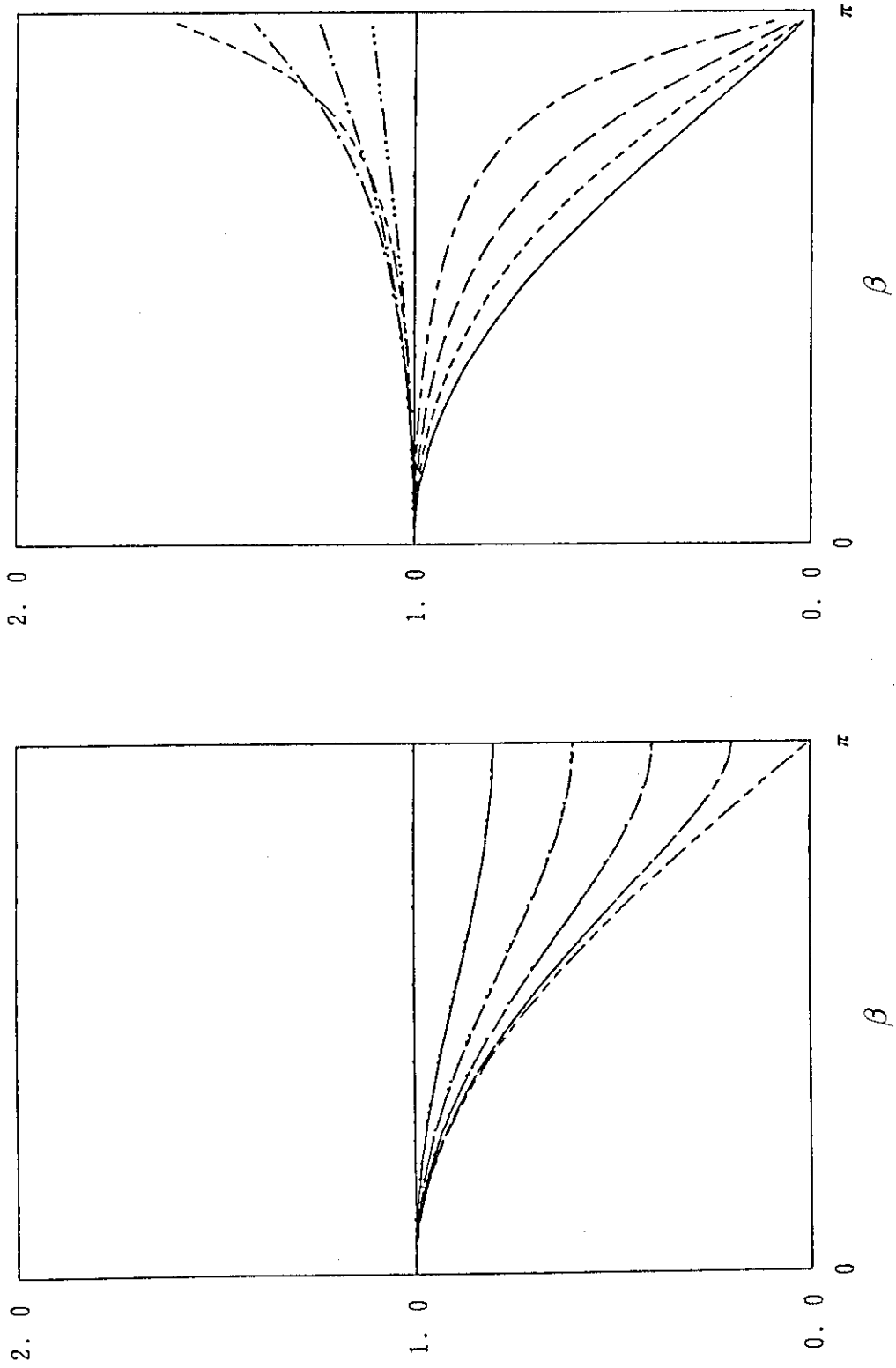


図 3.4 1次風上差分法の増幅率と相対位相誤差

- 0.1
- 0.2
- 0.3
- 0.4
- 0.5
- 0.6
- 0.7
- 0.8
- 0.9
- 1.0

クーラン数

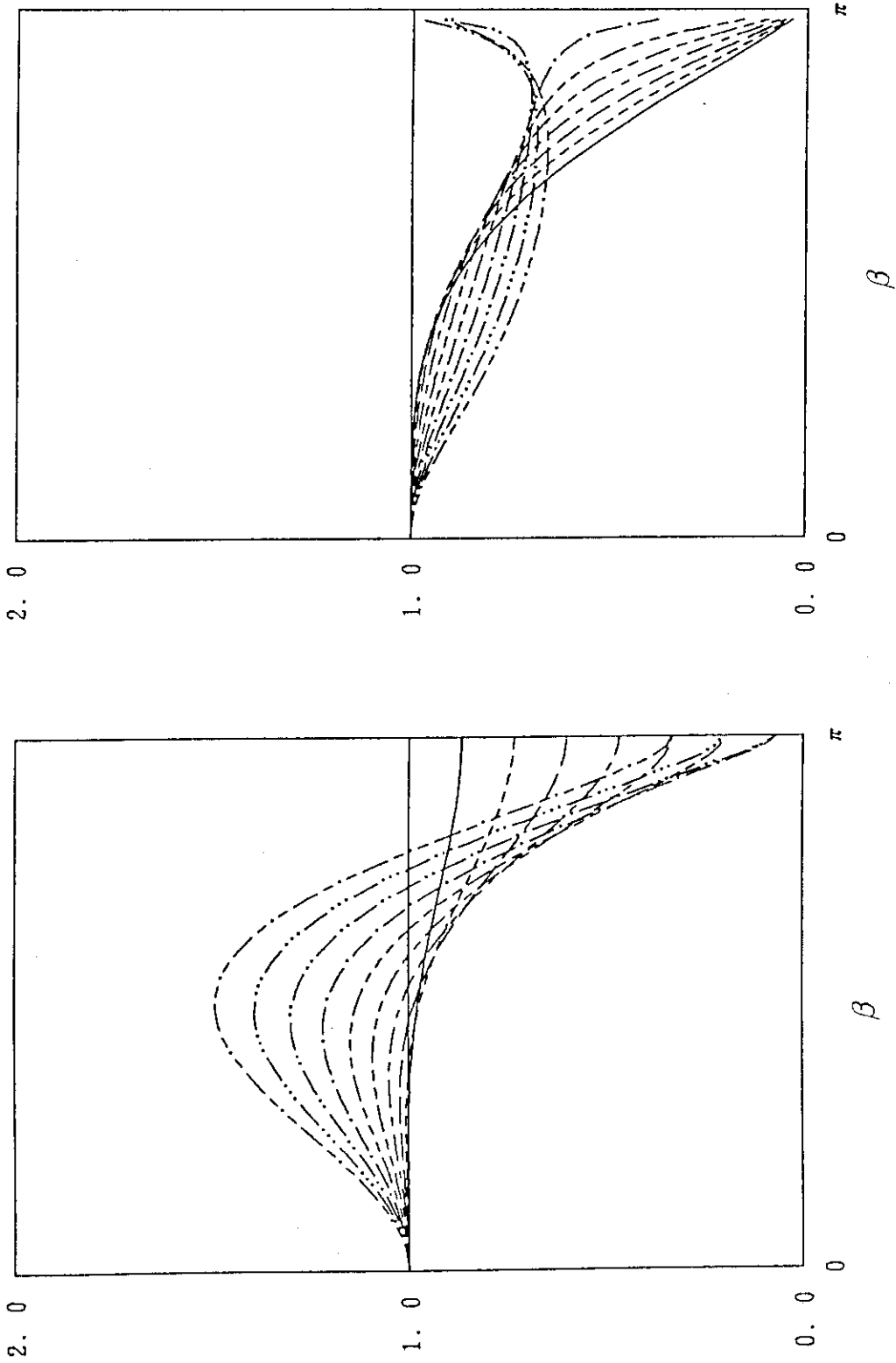


図 3.5 3次精度風上差分法の増幅率と相対位相誤差

MESH = 40\* 40

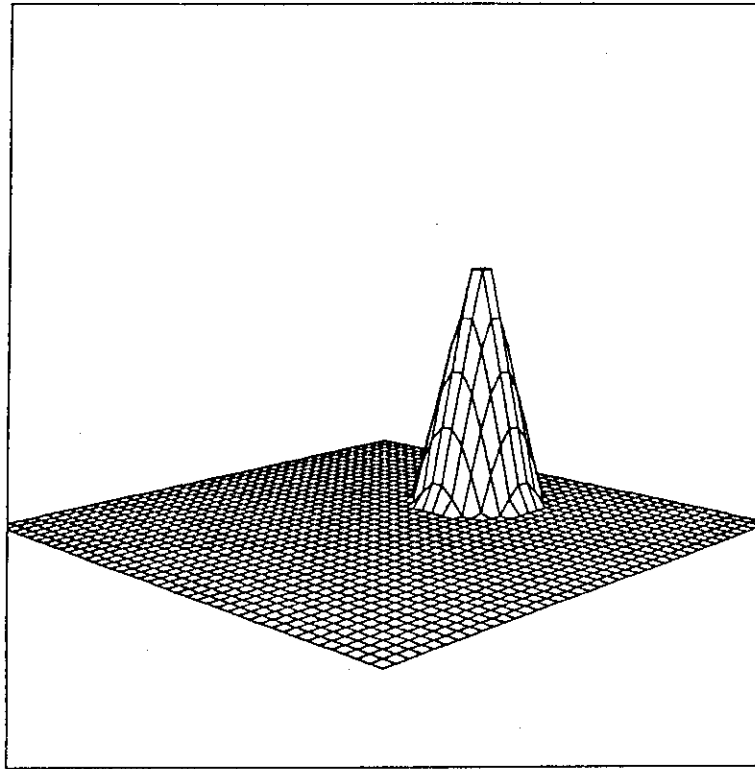
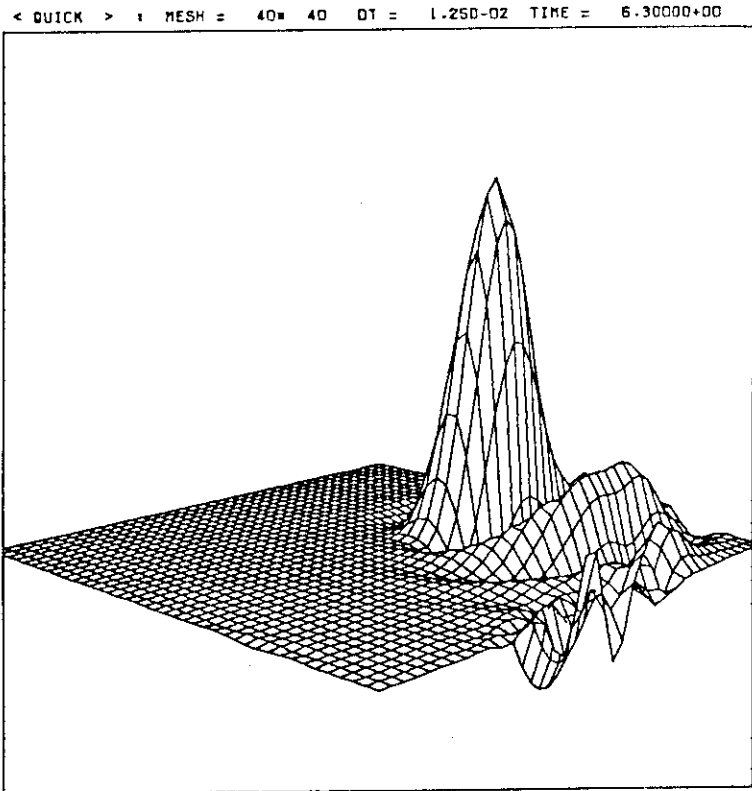
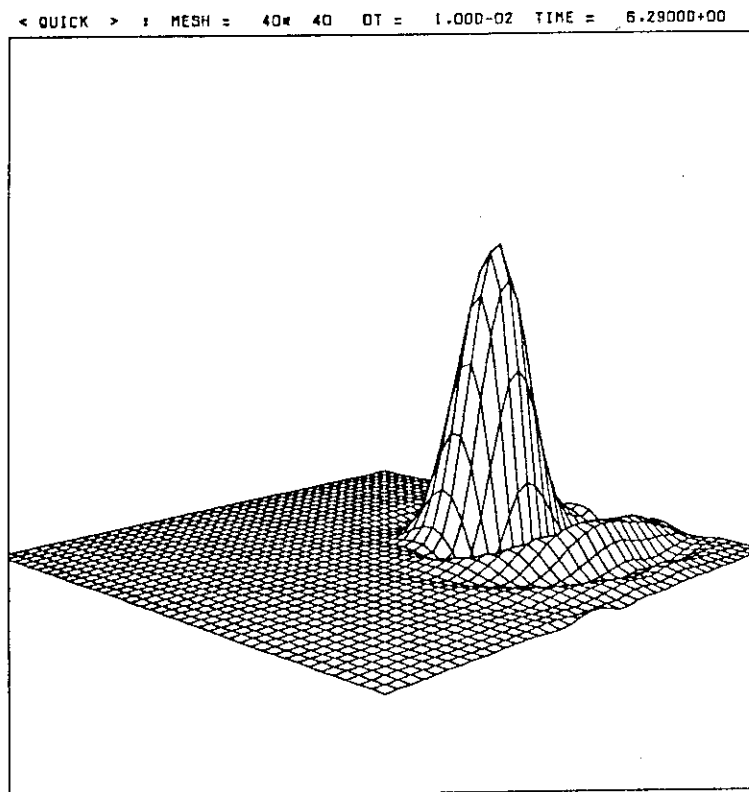


図 3.6  $\phi$ の初期値



(a)  $c = 0.125$

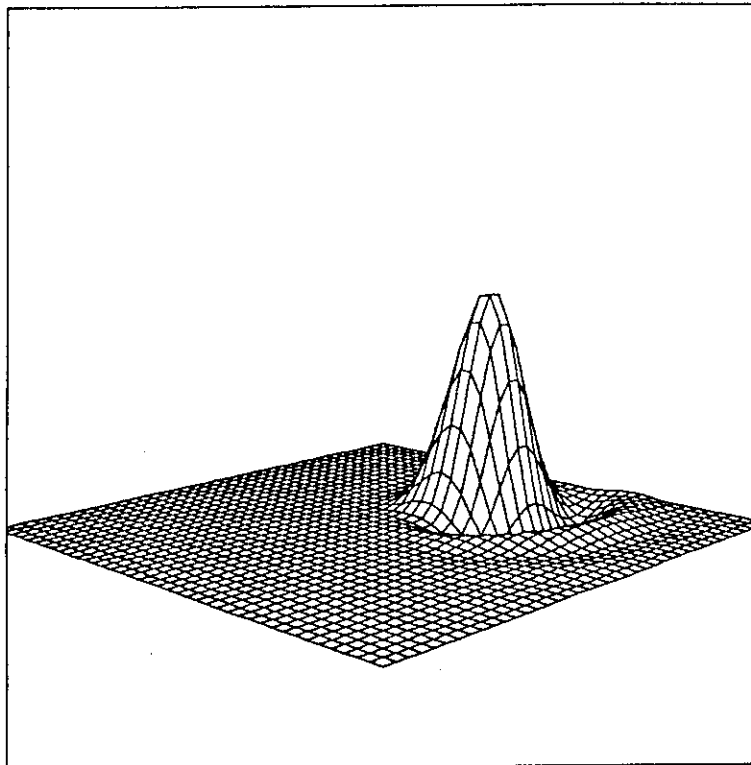


(b)  $c = 0.1$

図 3.7 QUICK法による数値解(その1)

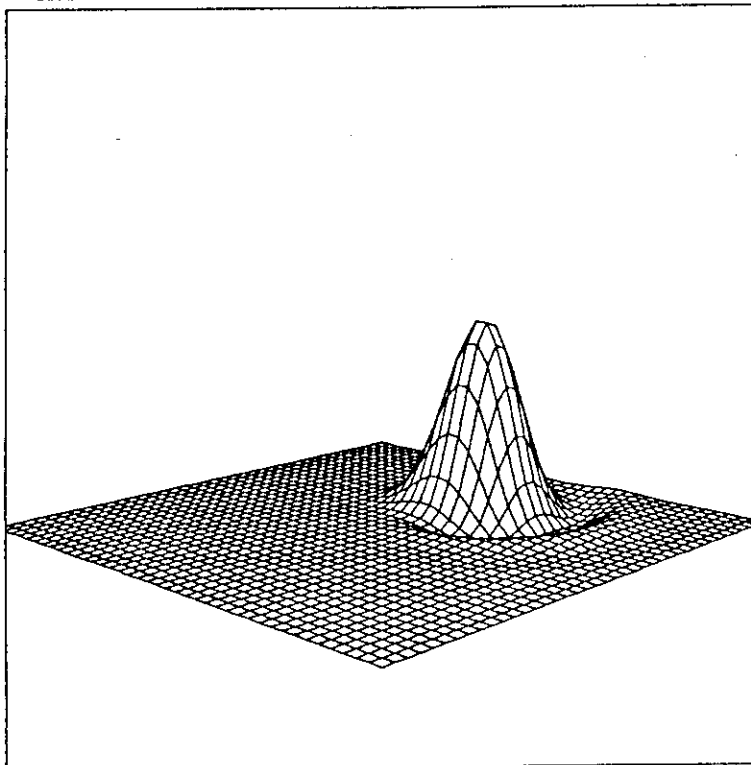


< QUICK > ; MESH = 40\* 40 DT = 5.000-03 TIME = 6.29000+00



(c)  $c = 0.05$

< QUICK > ; MESH = 40\* 40 DT = 1.000-03 TIME = 8.28200+00



(d)  $c = 0.01$

図 3.7 QUICK法による数値解(その2)

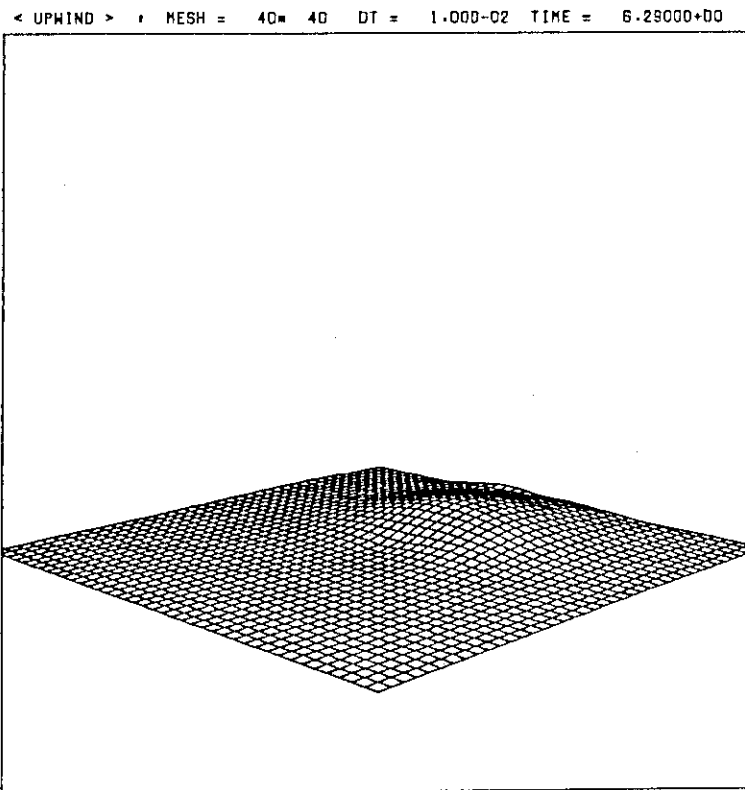


図 3.8 1次風上差分法による数値解

### 3.4 数値シミュレーション結果と考察

この節では、浅いキャビティ内のマランゴニ対流の定常状態の数値シミュレーションの結果について述べる。この流れは、3.1節で述べたように金属溶融層内の表面付近の流れをモデル化したものである。浅いキャビティ内の流れについては、ほとんど数値シミュレーションが行われておらず、その意味でも重要である。

#### 3.4.1 レイノルズ数による流れの変化

格子数  $40 \times 40$ ，アスペクト比 10，プラントル数 0.05，ボンダ数 0.04 に対し，レイノルズ数を 100，1000，2000，5000，10000 の場合について数値計算した。このときのマランゴニ数は，5，50，100，250，500 となる。温度の初期条件は， $x$  方向に線形の温度分布を与えた。速度の初期条件は全領域で 0 とした。レイノルズ数 2000 のケースが無次元数でみると第 2 章の溶融層内の流れにほぼ対応するが，温度の境界条件が違いため必ずしも一致しているとは言えない。数値シミュレーション時間は，十分長い時間を取り定常状態に達するまで行われた。

図 3.9 に各ケースの流線を示す。レイノルズ数が小さいときには，領域全体でほぼクエット流に近い流れを示しているが，レイノルズ数が増加するとともに，中心部の渦が低温側に近寄っていき，レイノルズ数 2000 以上では低温側の壁付近に 2 つの渦が生じていることが分かる。

図 3.10 にキャビティ中央 ( $x = 0.5$ ) の無次元速度の分布を示す。縦軸は  $y$  方向の位置，横軸は無次元速度を示している。レイノルズ数の増加とともに，クエット流れが次第に変化していき，また表面の無次元速度は小さくなっていくことが分かった。図 3.11，3.12 にはキャビティ表面の速度分布および温度分布が示されている。横軸は  $x$  方向の無次元位置，縦軸はそれぞれ無次元速度と無次元温度を表わしている。表面の速度分布をみると，低温側の壁付近に最大速度が現れているのが分かる。また，レイノルズ数の増加によって，2 つの極大値が生じてくることが分かる。表面の温度分布はレイノルズ数の増加とともに，キャビティ中央付近の温度勾配が小さくなり，低温側付近の温度勾配が大きくなっていることが分かる。

これらの図から，レイノルズ数の増加とともにキャビティ中央付近の速度が小さくなっているのは，温度勾配が小さくなるためにマランゴニ応力が小さくなるためであることが明らかとなった。また，低温側の壁付近の温度勾配が大きくなるためマランゴニ応力が大きくなり，速度を増大させる。このために 2 つの渦が形成されることが明らかとなった。また，溶融層内のマランゴニ対流の数値シミュレーションで見られた 2 つの渦が再現されており，薄い層内の本質的な流れであることが明らかとなった。これらは，Roux らの結果とも一致している。

### 3.4.2 1次風上差分法との比較

格子数  $40 \times 40$ ，プラントル数 0.05，アスペクト比 10，レイノルズ数 100，5000 のケースについて，対流項に 1 次風上差分法を用いたときの計算結果と，QUICK法による計算結果を図 3.13，3.14 に示す．レイノルズ数 100 のケースではほぼ同様の流線が得られ，低レイノルズ数では 1 次風上差分法の数値粘性の効果が小さく，1 次風上差分法を用いても良いことが分かる．しかし，レイノルズ数 5000 のケースでは，QUICK法で計算されている 2 つの渦が 1 次風上差分法では捉えられていない．これは，レイノルズ数の増加とともに 1 次風上差分法の数値粘性の効果が大きくなるためである．

この結果から，移流項の効果の大きい流れの解析では，対流項に高精度差分法を用いる必要があることが分かった．

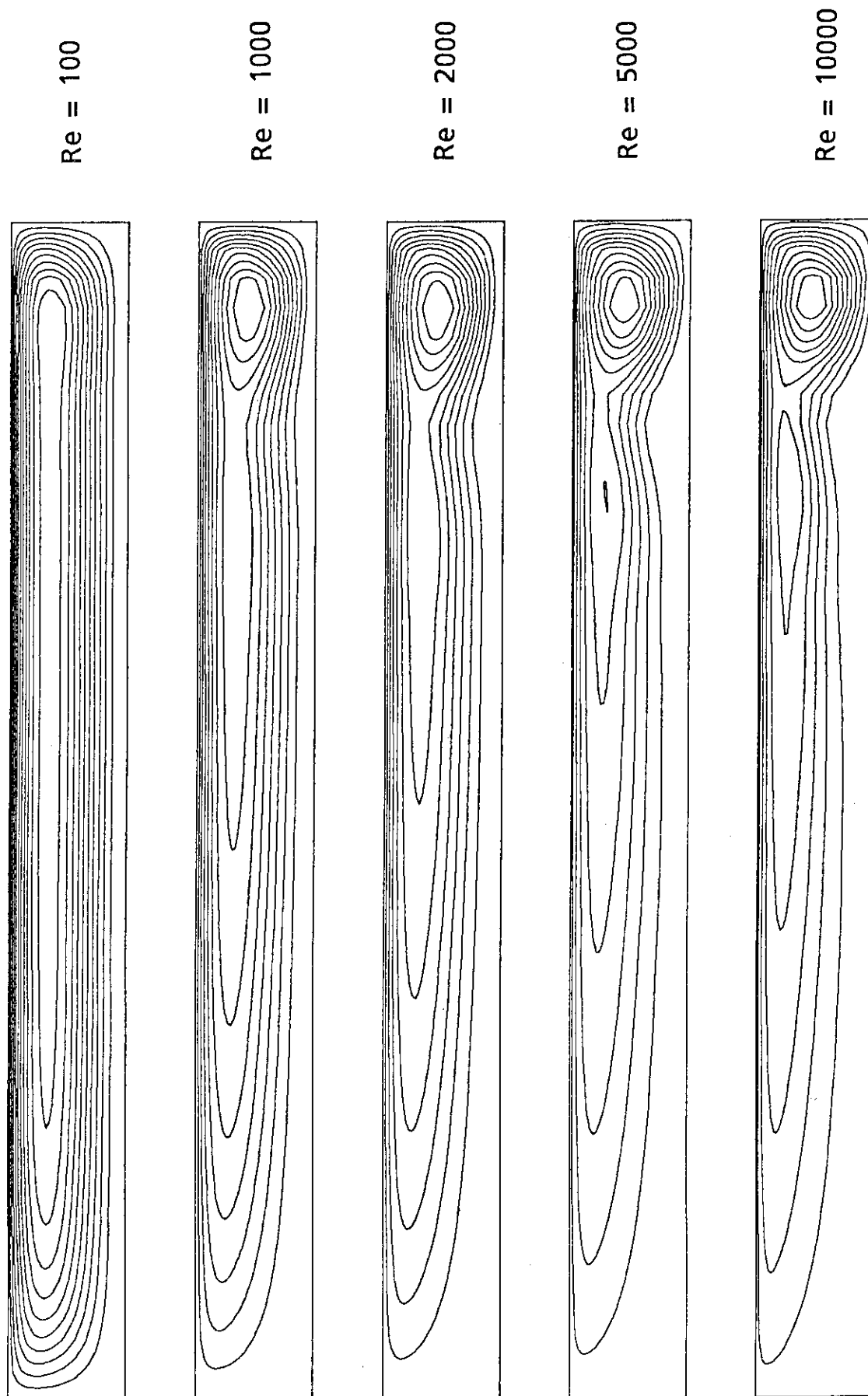


図 3.9 流線のレイノルズ数に対する変化

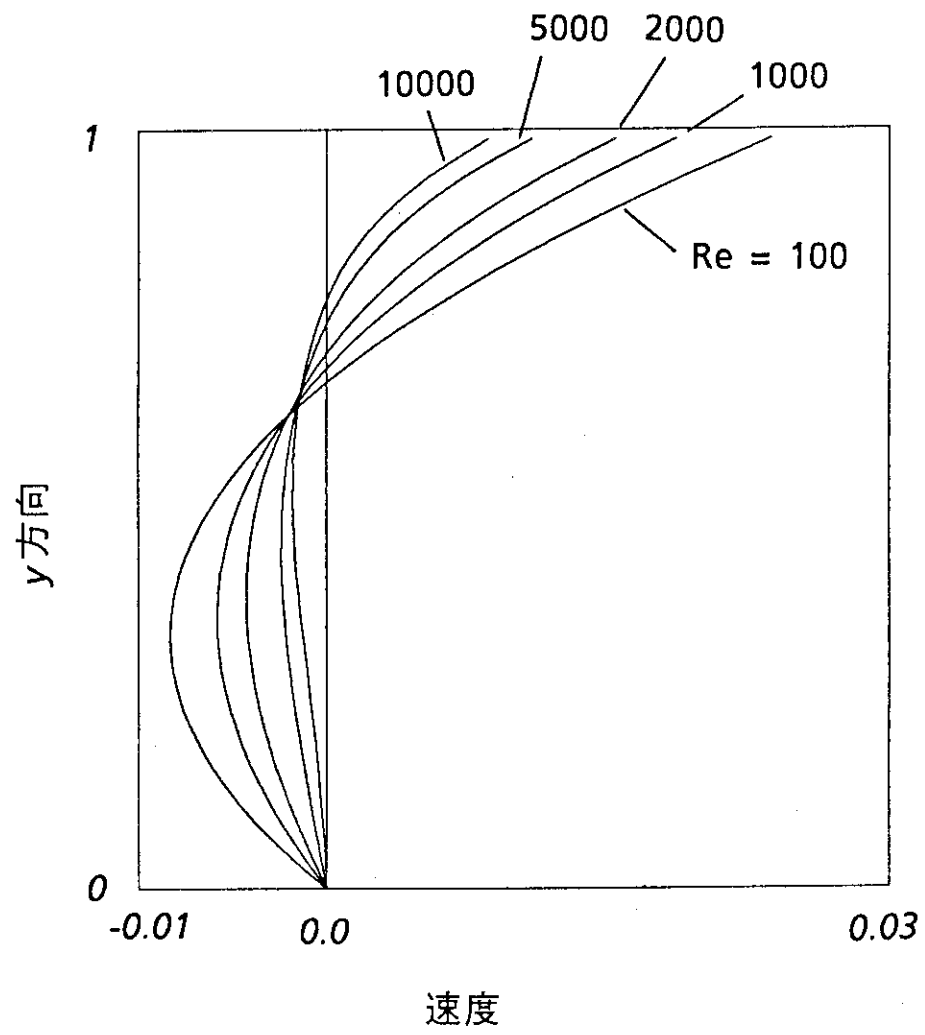


図 3.10 キャビティ中央の無次元速度分布

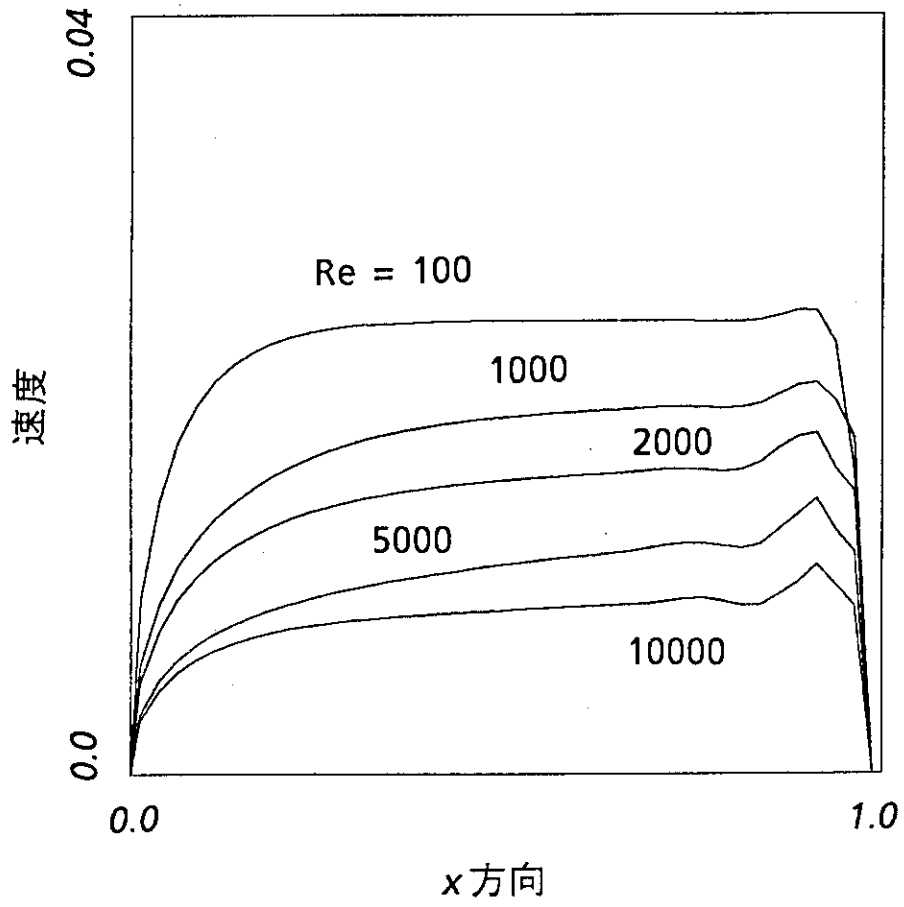


図 3.11 キャビティ表面の無次元速度分布

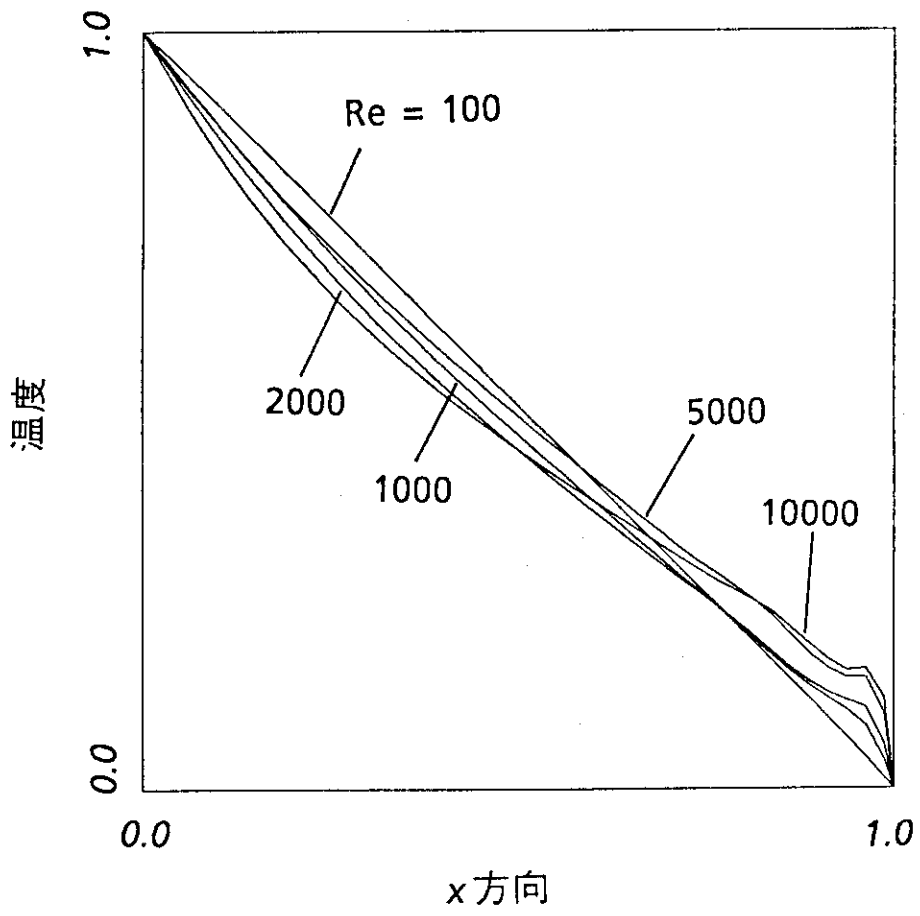
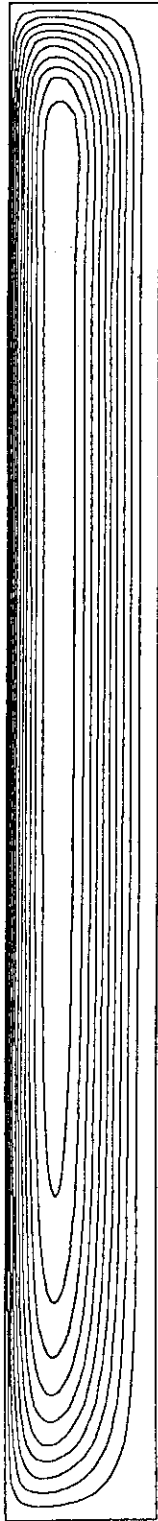
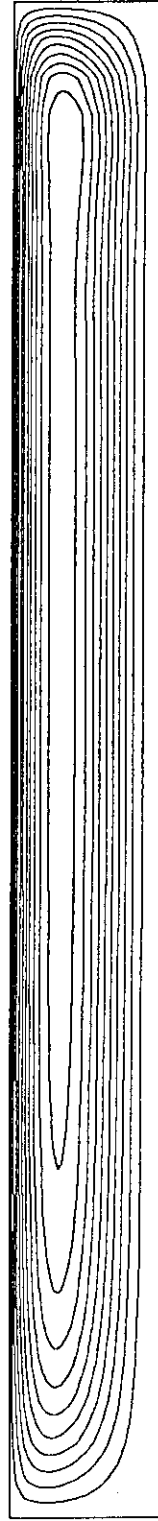


図 3.12 キャビティ表面の無次元温度分布



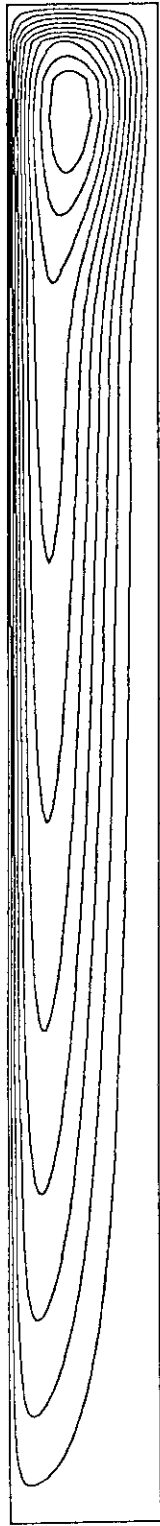


(a) 1次風上差分法

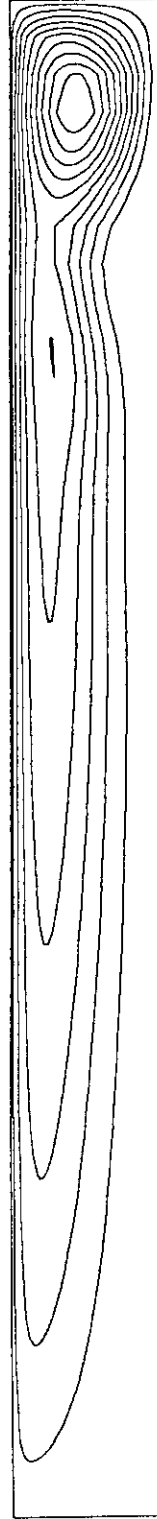


(b) QUICK法

図 3.13 1次風上差分法とQUICK法の流線 ( $Re = 100$ )



(a) 1次風上差分法



(b) QUICK法

図 3.14 1次風上差分法とQUICK法の流線 ( $Re = 5000$ )

## 第 4 章 自由境界問題

一般に、融解現象のような移動境界をもつ問題はステファン問題として定式化され、様々な解法が提案されている [3, 35, 36]。しかし、境界が複雑な場合に差分法を適用する簡単な方法は見当たらない。工学的には、境界面を大まかに予測できれば良いことが多いので、固液境界部分に比熱が大きい物質が入っているものとして潜熱の効果を取り込むモデルを使う場合がある。この方法を用いれば、固体液体の区別なくひとつの差分方程式で解くことができるので有利である。

この章では、第 2 章の数値シミュレーションで用いた融解熱モデルを 1 次元 2 相ステファン問題に適用し、ステファン条件を陽に考慮した移動座標による解法と比較をする。

### 4.1 1 次元 2 相ステファン問題

固体と液体の両方を含む領域での熱伝導問題を考えるためには、固液境界面で潜熱(融解熱)を考慮しなければならず、潜熱を取り込んだ移動境界モデルを用いる必要がある。ここでは、水と氷の相の熱伝導問題を記述する次の 1 次元 2 相ステファン問題を考える(図 4.1)[3]。

いま、計算領域を  $x = [0, 1]$  とし、両端に境界条件を与えて時間  $t = [0, 1]$  の範囲で温度分布  $\theta(x, t)$  を求める。このとき、1 次元 2 相ステファン問題は次のように定式化される。

$$0 < s(t) < 1 \quad (0 \leq t < 1), \quad s(0) = s_0 \quad (4.1)$$

$$c_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \quad (0 < x \leq s(t)) \quad (4.2)$$

$$c_2 \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \quad (s(t) < x \leq 1) \quad (4.3)$$

$$\theta(0, t) = f_1(t) > 0 \quad (0 < t \leq 1) \quad (4.4)$$

$$\theta(1, t) = f_2(t) < 0 \quad (0 < t \leq 1) \quad (4.5)$$

$$\theta(x, 0) = \varphi(x) \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (4.6)$$

$$\theta(s(t), t) = 0 \quad (0 \leq t \leq 1) \quad (4.7)$$

$$\lambda \frac{ds}{dt} = - \left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{s(t)-0} + \left. \frac{\partial \theta}{\partial x} \right|_{s(t)+0} \quad (0 \leq t \leq 1) \quad : \quad \text{ステファン条件} \quad (4.8)$$

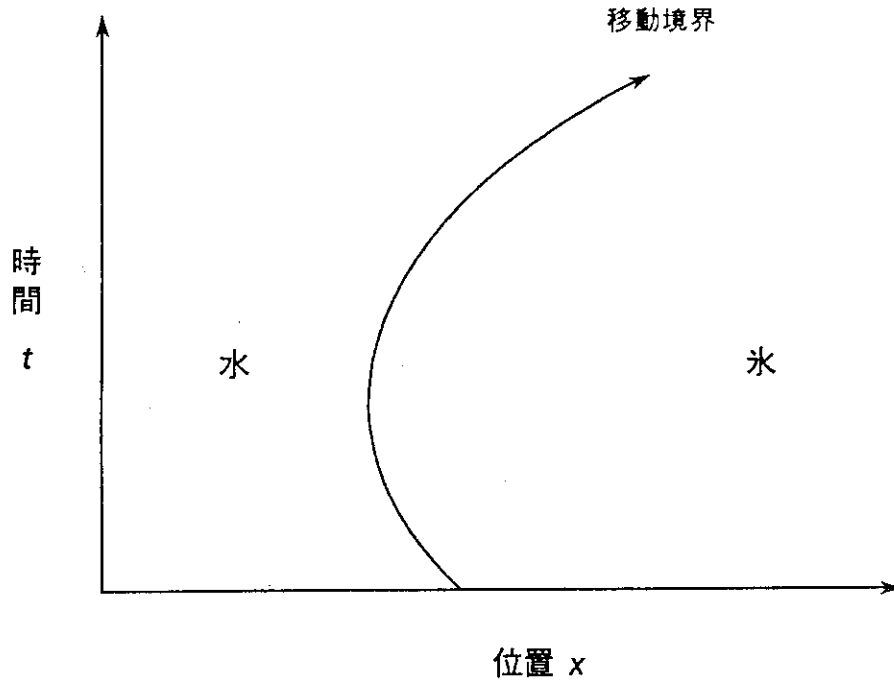


図 4.1 水と氷の移動境界

式(4.1)の条件は、移動境界  $s(t)$  が計算領域内に入っているための条件である。初期境界は  $s_0$  で表わされる。式(4.2), (4.3)は、それぞれ液体と固体相の熱伝導方程式である。また、 $c_1, c_2$ はそれぞれ液体の比熱、固体の比熱を表わす正のパラメータである。式(4.4), (4.5)は両端の境界条件であり、時間の関数として与える。式(4.6)は温度の初期条件である。式(4.7)は移動境界上で温度が0となる条件である。式(4.8)はステファン条件とよばれ、固体と液体からの熱流束の総和が融解熱と等しくなる条件である。 $\lambda$ は単位体積あたりの融解熱である。

## 4.2 移動座標系による差分化

1次元2相ステファン問題を移動座標系を用いて解くことを考える。これは、液体、固体それぞれの領域を  $[0, 1]$  区間に写像し、それぞれの領域で熱伝導方程式を解き、1時間ステップ進めた後の温度分布からステファン条件を考慮して境界を移動させるものである。

液体領域  $[0, s(t)]$  を  $[0, 1]$  に、固体領域  $[s(t), 1]$  を  $[0, 1]$  に写像する変換式は、次の式で与えられる。

$$\xi = \frac{x}{s(t)} \quad (4.9)$$

$$\eta = \frac{x - s(t)}{1 - s(t)} \quad (4.10)$$

$\xi, \eta$ は、液体、固体それぞれの新しい座標系であり、時間に依存している。この式(4.9), (4.10)を用いて、式(4.2), (4.3)を $\xi, \eta$ 座標系にそれぞれ変換すると次の式が得られる。

$$c_1 \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial t} = \frac{1}{s(t)^2} \frac{\partial^2 \hat{\theta}}{\partial \xi^2} \quad (0 \leq \xi \leq 1) \quad (4.11)$$

$$c_2 \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial t} = \frac{1}{(1 - s(t))^2} \frac{\partial^2 \tilde{\theta}}{\partial \eta^2} \quad (0 \leq \eta \leq 1) \quad (4.12)$$

$\hat{\theta}, \tilde{\theta}$ は、それぞれ液体領域、固体領域での温度である。また、式(4.8)のステファン条件は、次のように変換される。

$$\lambda \frac{\partial s}{\partial t} = -\frac{1}{s(t)} \left. \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \xi} \right|_{\xi=1-0} + \frac{1}{1-s(t)} \left. \frac{\partial \tilde{\theta}}{\partial \eta} \right|_{\eta=0+0} \quad (4.13)$$

これらの方程式を後退オイラー法によって離散化した。 $\xi, \eta$ の $[0, 1]$ 区間をそれぞれ $K$ 等分, $L$ 等分したときの離散点 $k, l$ での離散化式はつぎの式で与えられる。

$$\frac{\hat{\theta}_k^{n+1} - \hat{\theta}_k^n}{\Delta t} = \frac{1}{c_1 (s^n)^2 (\Delta \xi)^2} (\hat{\theta}_{k+1}^{n+1} - 2\hat{\theta}_k^{n+1} + \hat{\theta}_{k-1}^{n+1}) \quad (k = 1, \dots, K) \quad (4.14)$$

$$\frac{\tilde{\theta}_l^{n+1} - \tilde{\theta}_l^n}{\Delta t} = \frac{1}{c_2 (1 - s^n)^2 (\Delta \xi)^2} (\tilde{\theta}_{l+1}^{n+1} - 2\tilde{\theta}_l^{n+1} + \tilde{\theta}_{l-1}^{n+1}) \quad (l = 1, \dots, L) \quad (4.15)$$

ここで、 $s^n$ は第 $n$ ステップの移動境界の位置である。 $\hat{\theta}_0^{n+1}, \tilde{\theta}_{L+1}^{n+1}$ は境界条件より与えられる。また、 $\hat{\theta}_{K+1}^{n+1}, \tilde{\theta}_0^{n+1}$ は固液境界上の値であるから常に0である。ステファン条件も同様に離散化すると、次の式が得られる。

$$\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} = \frac{1}{\lambda} \left[ -\frac{1}{s^n} \frac{\hat{\theta}_{K+1}^{n+1} - \hat{\theta}_K^{n+1}}{\Delta \xi} + \frac{1}{1-s^n} \frac{\tilde{\theta}_1^{n+1} - \tilde{\theta}_0^{n+1}}{\Delta \eta} \right] \quad (4.16)$$

$K = L = 400$ としたときの数値解を基本ケースとし、次節に示す融解熱モデルの数値解との比較に用いた。離散化された3重対角行列をもつ連立1次方程式(式(4.14), (4.15))は、通常の漸化式による方法によって解いた。計算はすべて倍精度で行った。

### 4.3 融解熱モデルによる差分化

第2章で用いた融解熱モデルは、融点( $\theta_{melt}$ )近傍の温度幅( $\theta_w$ )で比熱を大きくすることによって融解熱を取り入れている。これは、液体と固体の間に比熱の大きい物質を挟んだことと対応している。いま、比熱を大きくする領域を中間層とよぶことにすれば、中間層は次の集合で定義される。

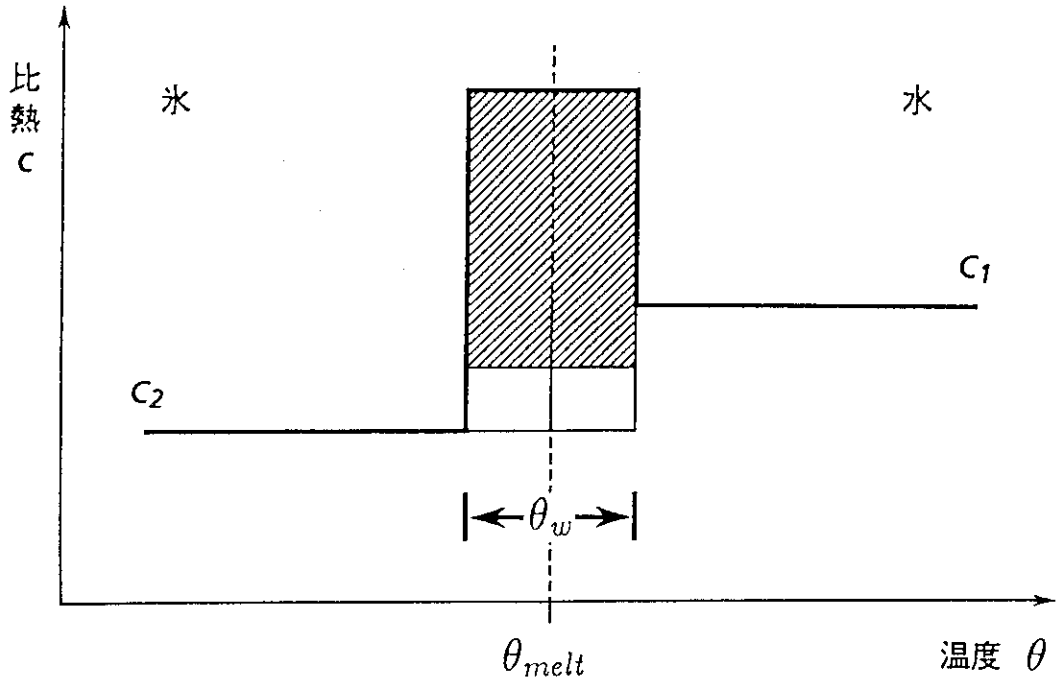


図 4.2 温度と比熱の関係

$$M = \left\{ x ; |\theta(x) - \theta_{melt}| \leq \frac{\theta_w}{2} \right\} \quad (4.17)$$

これは、融点 $\theta_{melt}$ の上下 $\frac{\theta_w}{2}$ の範囲に含まれる温度をもつ格子点の集合である。計算領域の温度分布が単調に変化すると仮定すれば、計算領域は液体層、中間層、固体層の3つの領域に分けることができる。したがって、それぞれの層で比熱を変化させることによって、計算領域全体で次の方程式を解けば良い。

$$c \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (4.18)$$

ここで、 $c$ は比熱であり図4.2に示すように温度に依存する。

式(4.18)を前進オイラー法で差分化すると次の離散化式が得られる。

$$\frac{\theta_j^{n+1} - \theta_j^n}{\Delta t} = \frac{1}{c_j^n (\Delta x)^2} (\theta_{j+1}^n - 2\theta_j^n + \theta_{j-1}^n) \quad (4.19)$$

ここで、 $c_j^n$ は時刻  $n$  ステップにおける位置  $j$  での温度から与えられる比熱であり、次の式で与えられる。

$$c_j^n = \begin{cases} c_1 & \theta_j^n < \theta_{melt} - \frac{\theta_w}{2} \\ \frac{c_1 + c_2}{2} + \frac{\lambda}{\theta_w} & |\theta_j^n - \theta_{melt}| \leq \frac{\theta_w}{2} \\ c_2 & \theta_j^n > \theta_{melt} + \frac{\theta_w}{2} \end{cases} \quad (4.20)$$

中間層の比熱は、固体と液体の平均値に融解熱 $\lambda$ を温度幅 $\theta_w$ で割った値を加えている。また、 $c_j^n$ は、位置 $j$ での第 $n$ ステップでの温度の値によって与えられる。

## 4.4 数値計算結果と考察

### 4.4.1 テスト問題

融解熱モデルを検討するために、移動座標による方法と融解熱モデルによる方法を用いて数値計算を行った。

まず、水と氷の比熱はそれぞれ $c_1 = 1$ 、 $c_2 = 0.5$ とした。また、融解熱は $\lambda = 1$ とした。初期の固液境界は $s(0) = 0.5$ としている。初期、境界条件は次の2つのケースを設定した。

- ケース 1

$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{2}{10} - \frac{2}{5}x & (0 \leq x \leq 0.5) \\ 1 - 2x & (0.5 \leq x \leq 1.0) \end{cases} \quad (4.21)$$

$$f_1(t) = t + 2/10 \quad (4.22)$$

$$f_2(t) = (4t - 5)/5 \quad (4.23)$$

- ケース 2

$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{1}{100} - \frac{1}{50}x & (0 \leq x \leq 0.5) \\ \frac{1}{2} - x & (0.5 \leq x \leq 1.0) \end{cases} \quad (4.24)$$

$$f_1(t) = t + 1/100 \quad (4.25)$$

$$f_2(t) = (t - 1)/2 \quad (4.26)$$

$\varphi(x)$  は初期温度分布,  $f_1(t)$ ,  $f_2(t)$  は境界条件である. ケース 1 とケース 2 の違いは, 初期条件の温度勾配がケース 1 の方が大きいことである. これは, 温度勾配が小さいほど中間層に含まれる格子が多くなるため, その影響を見るのが目的である. 図 4.3 にケース 1 とケース 2 の初期温度分布を示す.

#### 4.4.2 格子数と $\theta_w$ 依存性

図 4.4 にケース 1 について格子数 200, 融解熱を取り込む温度幅  $\theta_w$  を 0.01, 0.001, 0.0001 と変化させたときの移動境界の時間変化を示す. 横軸に計算領域, 縦軸に経過時間を取っている.  $\theta_w$  が 0.01, 0.001 のときは, ほぼ基本ケースの解に近い解が得られた. しかし,  $\theta_w$  が 0.0001 の場合, 時間があまり立たない初期の時刻の移動境界は基本ケースの解と大きく外れている. この結果より, あまり温度幅を小さくしても良い近似が得られないことが分かった. また, 境界の移動は,  $\theta_w$  が小さくなるほどなめらかに変化していない.

図 4.5 にケース 1 について  $\theta_w = 0.001$ , 格子数を 100, 200, 400 と変化させたときの移動境界の時間変化を示す. 横軸には計算領域, 縦軸には経過時間を示した. この  $\theta_w = 0.001$  の結果からは, 融解熱モデルの数値解に対する格子数の依存性が見られない. しかし, 格子数が大きい場合には, 境界の移動がなめらかに変化しないことが分かった.

中間層に含まれる格子数は, 各時間ステップで変化する. これは, 中間層を温度分布によって定義しているためである. 格子幅が大きい場合や  $\theta_w$  が小さいときは, ある時刻での温度分布によって中間層に含まれる格子がなくなることがあり, 境界の移動がなめらかに変化しない. なめらかに変化する解を得るためには, 中間層に含まれる格子数が常に 1 つ以上あることが条件となる. これは, 次の式で与えられる.

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{\text{melt}} \Delta x < \frac{\theta_w}{2} \quad (4.27)$$

すなわち, 融点から少なくとも 1 メッシュ離れたところの温度は, 中間層に含まれているという条件である. 移動境界がなめらかに変化している境界ではこの条件が満たされている.

#### 4.4.3 初期温度勾配の依存性

図 4.6 にケース 1 とケース 2 に対し, 格子数を 200, 温度幅  $\theta_w$  を 0.01 と取った場合の移動境界の計算結果について示す. 横軸は計算領域であり, 縦軸は経過時間である. ケース 2 のように初期温度勾配が小さい場合には, 中間層を表現する格子数が多くなり, 計算時間の初期の方で境界が大きく移動してしまい, その後基本ケースの解と離れている. 一方, ケース 1 は初期の中間層があまり大きくないために, 基本ケースの解に近い値が得られている.



この結果、融解熱モデルでは、融点付近の温度勾配があまり小さいか、または中間層に含まれる格子数が多い場合に良い数値解が得られないことが分かった。

#### 4.4.4 溶融層内対流の数値シミュレーション結果の考察

第2章の数値シミュレーションでは、融解熱を取り込む温度幅を20度としている。200msでの固液境界面での温度分布から、この幅に格子が含まれていることが分かった。また、温度幅を10度、5度として数値シミュレーションを行った結果、溶融層形状、計算領域内の温度分布の変化はほとんど見られなかった。したがって、融解熱モデルを用いた溶融層内のマランゴニ対流のシミュレーションは妥当であることが分かった。

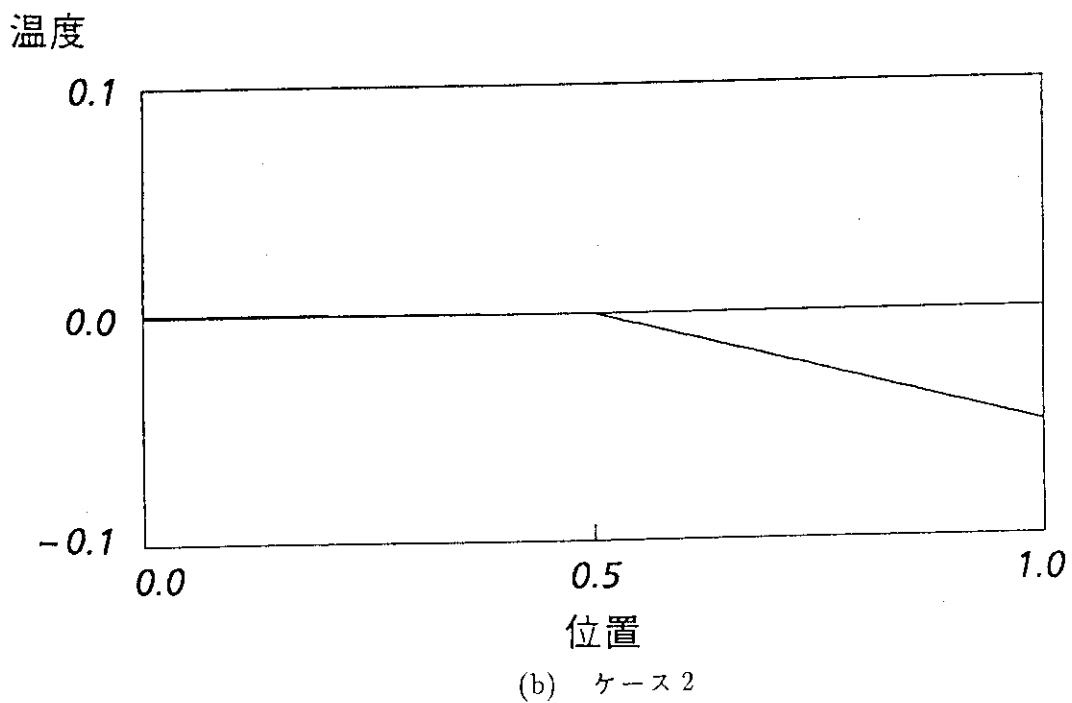
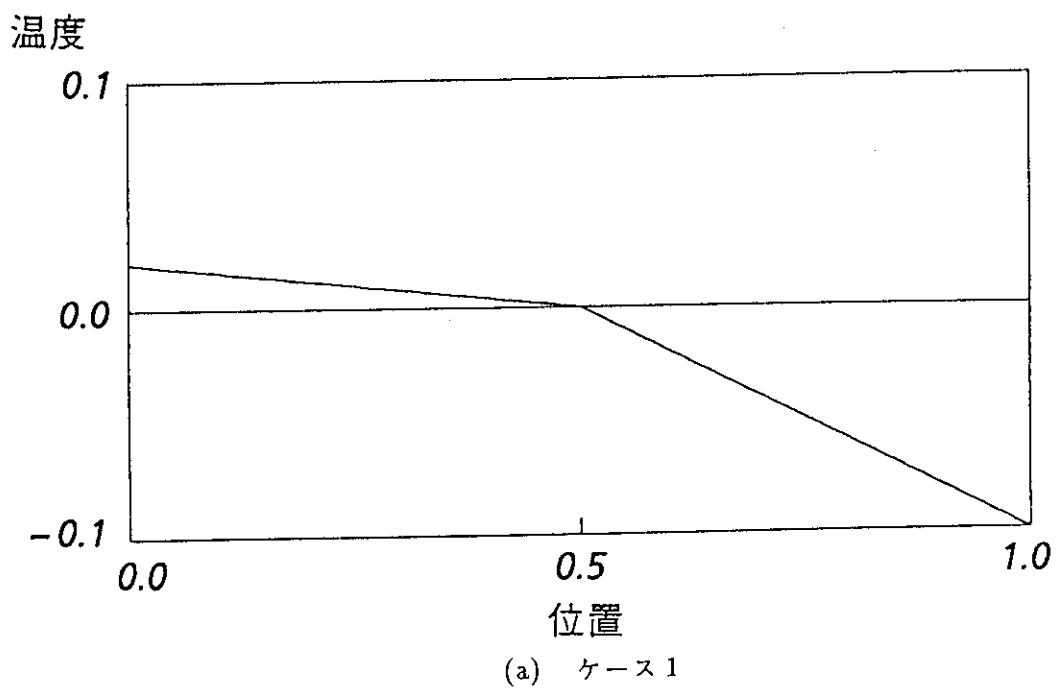


図 4.3 初期温度分布

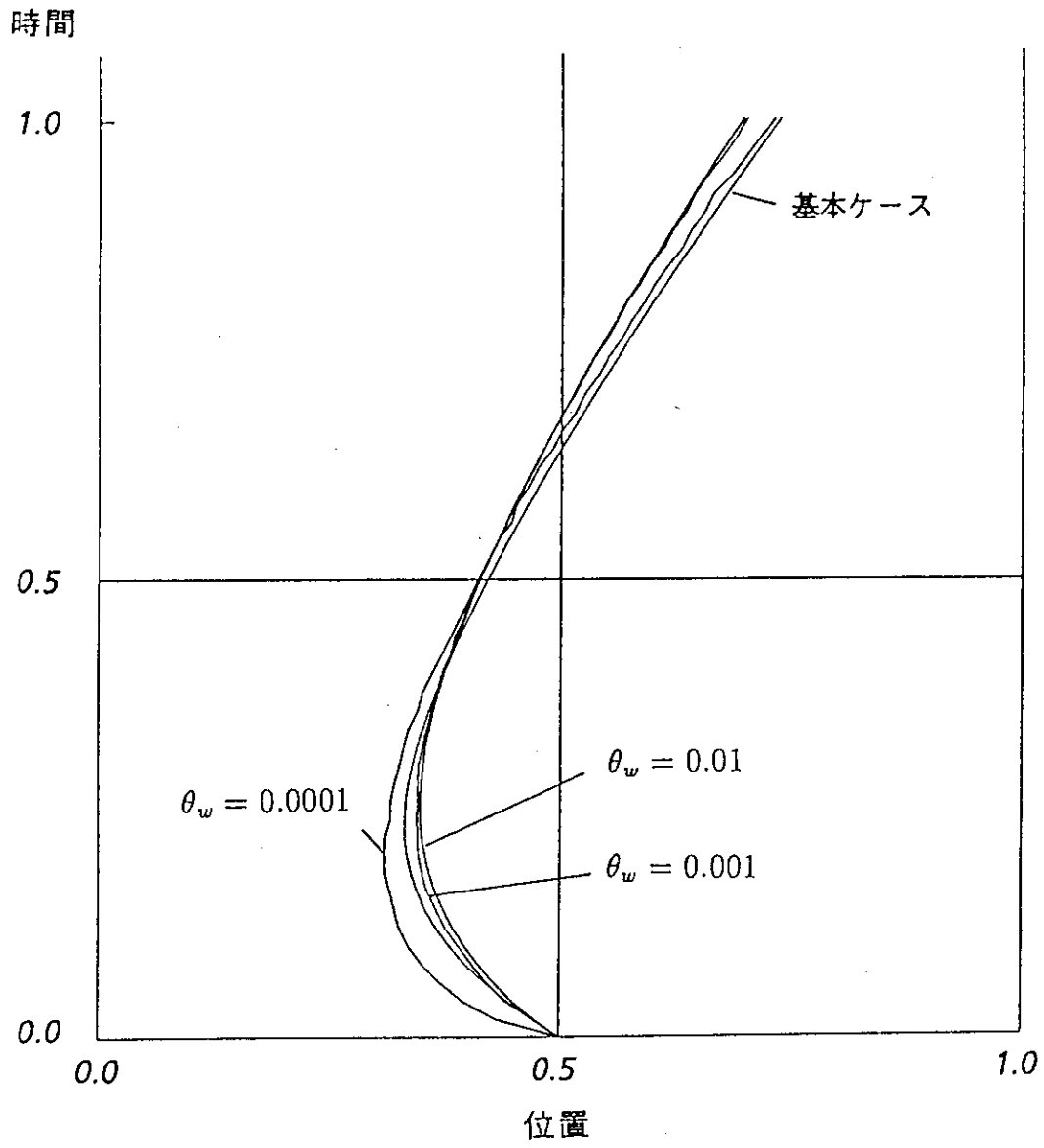


図 4.4 移動境界の $\theta_w$ 依存性

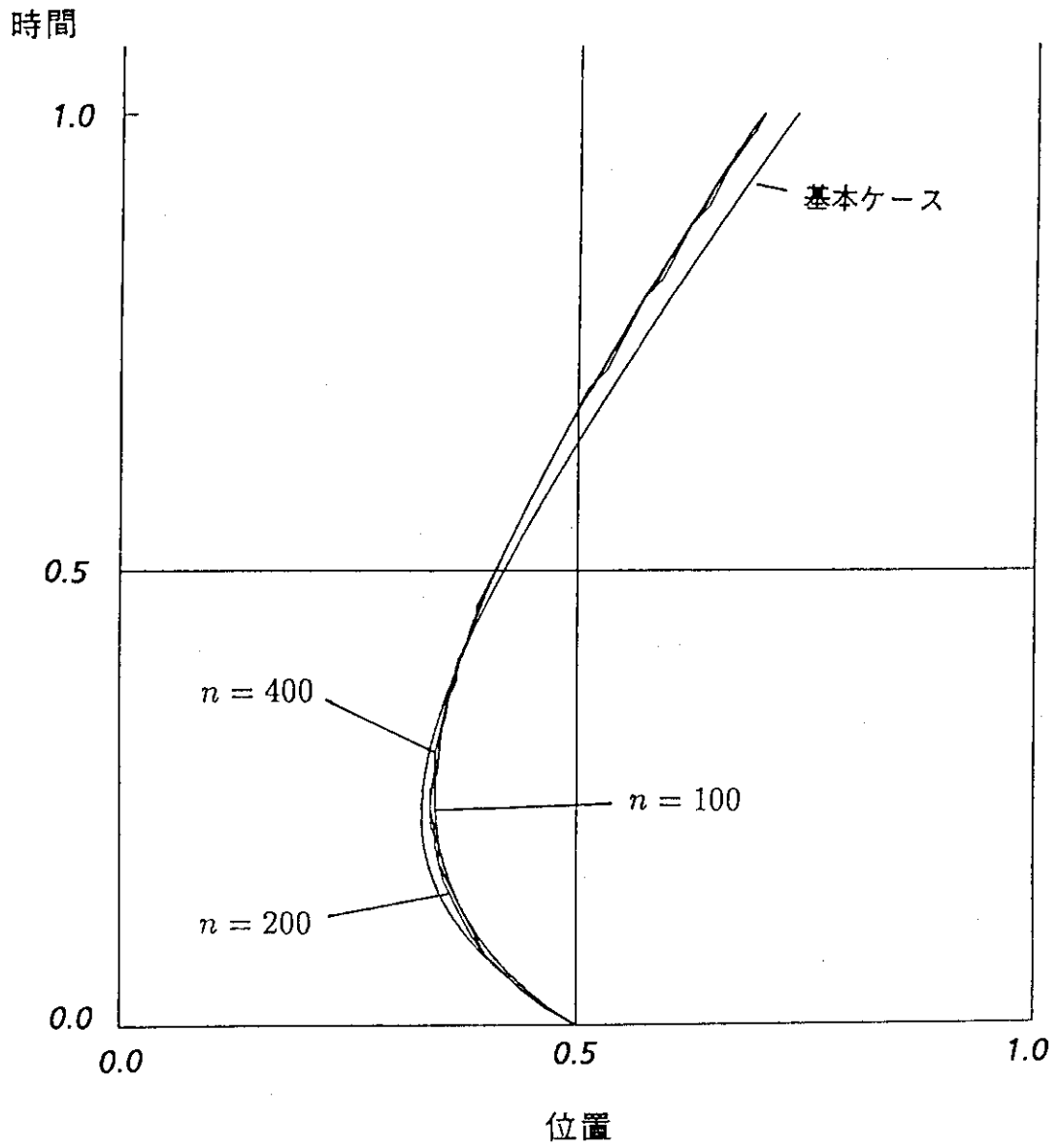


図 4.5 移動境界の格子数依存性

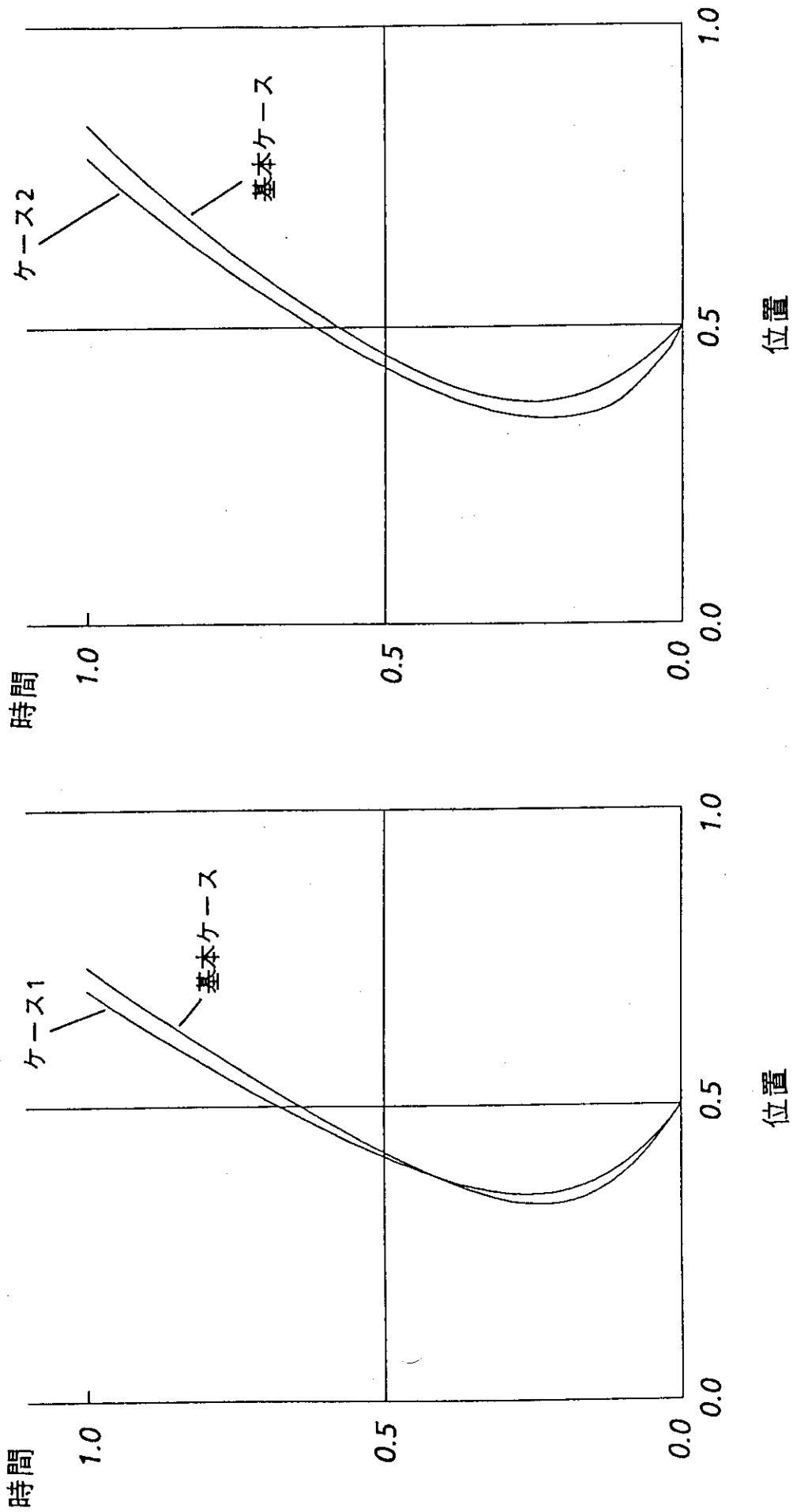


図 4.6 初期温度勾配と移動境界の関係

## 第 5 章 結 論

本研究では、金属の高熱流束下における溶融過程の数値シミュレーションを中心に、移流拡散方程式の移流項差分法の評価、溶融層内の特徴的な流れの数値シミュレーション、融解熱モデルの検討を行った。本研究の結果は以下のようにまとめられる。

- 金属の高熱流束下における溶融過程の数値シミュレーションを行い、溶融層の大きさ、溶融層内の流れを明らかにした。
- 対流項を含む時間発展方程式において、時間項に前進オイラー法、対流項にQUICK法を用いて差分化した場合、解の振動を防ぐためにはクーラン数を0.1以下にしなければならないことを安定性解析から明らかにした。
- 従来流れの計算に良く用いられている1次風上差分法を適用した結果とQUICK法を比較した結果、速度の大きい流れにおいては、1次風上差分法は数値粘性のために良い数値解を与えないことを確かめた。
- 溶融層内の流れの特徴をとらえた浅いキャビティ内のマランゴニ対流の数値シミュレーションでは、レイノルズ数の増加とともにキャビティ中央付近の速度が小さくなり、また低温側の壁付近に2つの渦ができることを明らかにした。これによって、溶融層内の流れの中にみられた周辺部における2つの渦の発生メカニズムを解明できた。
- 融解熱モデルについて、1次元2相ステファン問題を用いてステファン条件を陽に考慮した移動座標系による数値計算結果と比較を行うことにより、妥当な解を得るための条件を明らかにした。溶融層内対流の数値シミュレーションではこの条件が満たされており、数値シミュレーションの妥当性を示すことができた。

この結果、本数値シミュレーションの手法を用いて、マランゴニ対流を評価しなければならない他の工学上の問題を解析することができる。

しかし、細部にわたりまだ考慮されていない条件等が残されている。

- まず、溶融層の数値シミュレーションでは、速度の大きい流れは溶融層表面付近に局在しているため、その部分をより精度良く求める必要がある。また、より高い熱流束が与えられる場合を考慮し、小さい幅の格子を溶融層表面にのみ適用したより精度の高い数値シミュレーションを行うことが重要である。

- また、実験で得られている溶融層の表面形状は平らではないことが分かっているが、溶融層表面の形状を把握するためには付録に示した自由表面の定式化を用い、自由表面を含んだ解析を行うが必要である。
- 浅いキャビティ内のマランゴニ対流のシミュレーションでは、さらに詳しくレイノルズ数、マランゴニ数、アスペクト比依存性を調べ、薄い層での流れの特性を把握することが重要である。さらに、乱流領域へ遷移するより高いレイノルズ数の流れについても、遷移点の臨界レイノルズ数や乱流の特性を解析することは興味深い。このためには、より細かなメッシュやより精度の高い数値解法が必要である。

これらは本研究では行われなかったが、今後の課題として考慮されるべきである。

## 謝 辞

本研究全般にわたり有意義な討論と貴重な助言をして頂きました日本原子力研究所燃料・材料工学部同位体分離研究室蕪木英雄氏に深く感謝致します。

本研究の機会を与えて頂き、また暖かい励ましとご指導を頂いた日本原子力研究所情報システムセンター室長浅井清氏、実験結果を使わせて頂き、また数値シミュレーション結果に対してご意見を頂いた日本原子力研究所核融合研究部加熱工学第1研究室長関昌弘氏、流体の数値シミュレーションに興味をもたせて頂いた日本原子力研究所高温工学部高温熱工学研究室功刀資彰氏、いろいろな面でご協力を頂いた日本原子力研究所情報システムセンターの方々に厚くお礼申し上げます。

また、学生時代から今日に至るまで数多くのご指導を頂き、また本論文をまとめるにあたり貴重なご意見とご指導を頂きました筑波大学電子・情報工学系小柳義夫教授に深く感謝致します。

- また、実験で得られている溶融層の表面形状は平らではないことが分かっているが、溶融層表面の形状を把握するためには付録に示した自由表面の定式化を用い、自由表面を含んだ解析を行うが必要である。
- 浅いキャビティ内のマランゴニ対流のシミュレーションでは、さらに詳しくレイノルズ数、マランゴニ数、アスペクト比依存性を調べ、薄い層での流れの特性を把握することが重要である。さらに、乱流領域へ遷移するより高いレイノルズ数の流れについても、遷移点の臨界レイノルズ数や乱流の特性を解析することは興味深い。このためには、より細かなメッシュやより精度の高い数値解法が必要である。

これらは本研究では行われなかったが、今後の課題として考慮されるべきである。

## 謝 辞

本研究全般にわたり有意義な討論と貴重な助言をして頂きました日本原子力研究所燃料・材料工学部同位体分離研究室蕪木英雄氏に深く感謝致します。

本研究の機会を与えて頂き、また暖かい励ましとご指導を頂いた日本原子力研究所情報システムセンター室長浅井清氏、実験結果を使わせて頂き、また数値シミュレーション結果に対してご意見を頂いた日本原子力研究所核融合研究部加熱工学第1研究室長関昌弘氏、流体の数値シミュレーションに興味をもたせて頂いた日本原子力研究所高温工学部高温熱工学研究室功刀資彰氏、いろいろな面でご協力を頂いた日本原子力研究所情報システムセンターの方々に厚くお礼申し上げます。

また、学生時代から今日に至るまで数多くのご指導を頂き、また本論文をまとめるにあたり貴重なご意見とご指導を頂きました筑波大学電子・情報工学系小柳義夫教授に深く感謝致します。



## 参 考 文 献

- [1] L. E. Scriven and C. V. Sternling : The Marangoni Effects, *Nature*, 187, 4733, 186-188 (1960).
- [2] 村田健郎, 小国力, 三好俊郎, 小柳義夫 : 工学における数値シミュレーション, 丸善 (1988).
- [3] 山口昌哉, 野木達夫 : ステファン問題, 産業図書 (1977)
- [4] R. Peyret and T. D. Taylor : *Computational Methods for Fluid Flow*, Springer-Verlag (1983).
- [5] 小林敏雄, 森西洋平 : 2次元正方形キャビティ内流れの数値解析における対流項差分の影響, *生産研究*, 40, 1, 9-15 (1988).
- [6] B. P. Leonard : A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation, *Comp. Meths. Appl. Mech. Eng.*, 19, 59-98 (1979).
- [7] B. P. Leonard : A Survey of Finite Differences with Upwinding for Numerical Modelling of the Incompressible Convective Diffusion Equation, *Computational Techniques in Transient and Turbulent Flow* (C. Taylor and K. Morgan eds.), Pineridge Press, 1-35, (1981).
- [8] C. Chan, J. Mazumder, and M. M. Chen : A Two-Dimensional Transient Model for Convection in Laser Melted Pool, *Metallurgical Trans. A*, 15A, 2175-2184 (1984).
- [9] B. Basu and J. Srinivasan : Numerical Study of Steady-State Laser Melting Problem, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 31, 11, 2331-2338 (1988).
- [10] B. Basu and A. W. Date : Numerical Study of Steady State and Transient Laser Melting Problems—I. Characteristics of Flow Field and Heat Transfer, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 33, 6, 1149-1163 (1990).
- [11] S. Kou and D. K. Sun : Fluid Flow and Weld Penetration in Stationary Arc Welds, *Metallurgical Trans. A*, 16A, 203-213 (1985).
- [12] A. Služalec : *Flow of Metal Undergoing Laser Irradiation*, Hemisphere (1988).

- [13] H. Kaburaki, M. Yokokawa, M. Seki, and T. Arisawa : Numerical Analysis of Transient Behavior of Molten Metals Heated by Electron Beam, Proc. ASME Winter Meeting, San Francisco, Book No. H00522 (1989).
- [14] S. Yamazaki and M. Seki : Proceedings of 12th Symposium on Fusion Engineering, IEEE Catalog No. 87CH2507-2, 1301-1304 (1987).
- [15] A. G. Kirdyashkin : Thermogravitational and Thermocapillary Flows in a Horizontal Liquid Layer under the Conditions of a Horizontal Temperature Gradient, Int. J. Heat Mass Transfer, 27, 8, 1205-1217 (1984).
- [16] P. Laure, B. Roux, and H. B. Hadid : Nonlinear Study of the Flow in a Long Rectangular Cavity Subjected to Thermocapillary Effect, Phys. Fluids A, 2, 4, 516-524 (1990).
- [17] B. M. Carpenter and G. M. Homsy : Combined Buoyant-Thermocapillary Flow in a Cavity, J. Fluid Mech., 207, 121-132 (1989).
- [18] A. Zebib, G. M. Homsy, and E. Meiburg : High Marangoni Number Convection in a Square Cavity, Phys. Fluids, 28, 12, 3467-3476 (1985).
- [19] ランダウ=リフシッツ : 流体力学 1, 東京図書 (1979).
- [20] 今井 功 : 流体力学, 裳華房 (1980).
- [21] G. Comini, S. D. Guidice, R. W. Lewis, and O. C. Zienkiewicz : Finite Element Solution of Non-Linear Heat Conduction Problems with Special Reference to Phase Change, Int. J. Num. Meths. in Eng., 8, 613-624 (1974).
- [22] S. Schiller, U. Heisig, and S. Panzer : Electron Beam Technology, John Wiley and Sons, New York (1982).
- [23] S. V. Patankar : Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere (1980).
- [24] 機械工学便覧, 日本機械学会 (1988).
- [25] H. Schlichting : Boundary Layer Theory (Translated by J. Kestin), McGraw-Hill (1979).
- [26] N. D. Kazarinoff and J. S. Wilkowski : A Numerical Study of Marangoni Flows in Zone-Refined Silicon Crystals, Phys. Fluids A, 1, 4, 625-627 (1989).
- [27] B. M. Carpenter, G. M. Homsy : High Marangoni Number Convection in a Square Cavity: Part II, Phys. Fluids A, 2, 2, 137-149 (1990).

- [28] M. Strani, R. Piva, and G. Graziani : Thermocapillary Convection in a Rectangular Cavity: Asymptotic Theory and Numerical Simulation, *J. Fluid Mech.*, 130, 347-376 (1983).
- [29] T. L. Bergman and J. R. Keller : Combined Buoyancy, Surface Tension Flow in Liquid Metals, *Numerical Heat Transfer*, 13, 49-63 (1988).
- [30] H. Wilke and W. Löser : Numerical Calculation of Marangoni Convection in a Rectangular Open Boat, *Crystal Res. and Technol.*, 18, 6, 825-833 (1983).
- [31] A. K. Sen and S. H. Davis : Steady Thermocapillary Flows in Two-Dimensional Slots, *J. Fluid Mech.*, 121, 163-186 (1982).
- [32] J. Srinivasan and B. Basu : A Numerical Study of Thermocapillary Flow in a Rectangular Cavity during Laser Melting, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 29, 4, 563-572 (1986).
- [33] R. D. Richtmyer and K. W. Morton : *Difference Methods for Initial-Value Problems*, 2nd Ed., John Wiley and Sons (1967).
- [34] D. A. Anderson, J. C. Tannehill, and R. H. Pletcher : *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, McGraw-Hill (1984).
- [35] 河原田秀夫:自由境界問題-理論と数値解法, 東京大学出版会 (1989)
- [36] 須賀伸介 :自由境界問題に対する有限要素法の研究, 筑波大学工学研究科博士論文 (1985)
- [37] A. E. Dukler : Characterization, Effects and Modeling of the Wavy Gas-Liquid Interface, *Progress in Heat and Mass Transfer*, 6, 207-234 (1972).
- [38] B. D. Nichols and C. W. Hirt : Improved Free Surface Boundary Conditions for Numerical Incompressible-Flow Calculations, *J. Comp. Phys.*, 8, 434-448 (1971).
- [39] R. K.-C. Chan and R. L. Street : A Computer Study of Finite-Amplitude Water Waves, *J. Comp. Phys.*, 6, 68-94 (1970).
- [40] C. W. Hirt and J. P. Shannon : Free-Surface Stress Conditions for Incompressible-Flow Calculations, *J. Comp. Phys.*, 2, 403-411 (1968).
- [41] 宮内敏雄, 川野浩一郎 : 流下液膜自由界面挙動の数値シミュレーション, 第25回日本伝熱シンポジウム講演論文集, 76-78 (1988-6).

## 付録 A 自由表面モデル

ここでは、自由表面をもつ溶融層内のマランゴニ対流をシミュレーションするために、自由表面の方程式を導出する [37, 38, 39, 40, 41]。ただし、自由表面は図 A.1 に示すように  $x$  に関して一価関数であると仮定する。

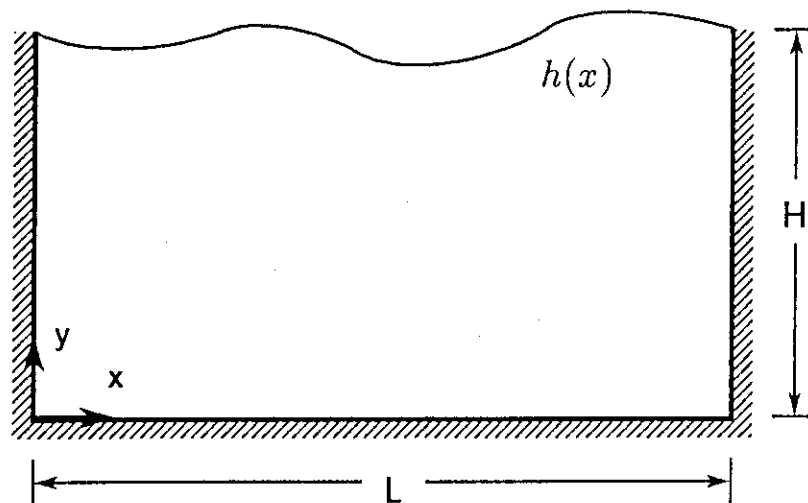


図 A.1 自由表面モデル

### A.1 基礎方程式

$u$ ,  $v$  をそれぞれ  $x$ ,  $y$  方向の速度,  $T$  を温度,  $h$  を表面の位置とすると, 基礎方程式は, 次の非圧縮性ナビエーストークス方程式, エネルギー方程式, 自由表面の方程式である。

- 連続方程式

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{A.1})$$

- ナビエーストークス方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(vu)}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \Delta u \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial(vv)}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \Delta v - g \quad (\text{A.3})$$

- エネルギー方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \kappa \Delta T \quad (\text{A.4})$$

- 自由表面の方程式

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v_s - u_s \frac{\partial h}{\partial x} \quad (\text{A.5})$$

$$h(0) = h(L) = H \quad (\text{A.6})$$

ここで、 $\rho$ ,  $\nu$ ,  $\kappa$ ,  $g$  はそれぞれ密度、動粘度、熱拡散率、重力加速度を表わしている。また、 $(u_s, v_s)$  は表面での速度を表わしている。式 (A.5) は、流体粒子が微小時間内では自由表面上に沿って動くための条件である。自由表面の両端は固定されているものとする (式 (A.6))。

## A.2 自由表面での境界条件

ある時刻での表面の方程式を  $y = h(x)$  とし、点  $\mathbf{x}_0 = (x_0, y_0)$  での接線方向を  $\tau$ 、法線方向を  $n$  とする。このとき、接線方向と法線方向の単位ベクトルは、

$$\mathbf{e}_\tau = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 \\ h_x \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{e}_n = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} -h_x \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

$$h_x = \frac{\partial h}{\partial x}, \quad N = \sqrt{1 + (h_x)^2}$$

で表わされる。したがって、座標系  $(x, y)$  から  $(\tau, n)$  への座標変換行列は、

$$A = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & h_x \\ -h_x & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

で表わされる。

一般に、 $(x, y)$  系での応力テンソル  $\Pi$  は次の行列で表わされる。

$$\Pi = \begin{pmatrix} -p + 2\mu u_x & \mu(v_x + u_y) \\ \mu(v_x + u_y) & -p + 2\mu v_y \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

ここで、 $p$  は大気圧  $p_0$  を基準にした表面の圧力差  $p = p_s - p_0$  である。この応力テンソルを  $(\tau, n)$  系に変換すると次のようになる。

$$\begin{aligned} \Pi' &= A \Pi A^{-1} & (A.11) \\ &= \frac{1}{N^2} \begin{pmatrix} -(1+h_x^2)p + 2\mu\{u_x + h_x(v_x + u_y) + h_x^2 v_y\} & 2\mu h_x(v_y - u_x) + \mu(v_x + u_y)(1-h_x^2) \\ 2\mu h_x(v_y - u_x) + \mu(v_x + u_y)(1-h_x^2) & -(1+h_x^2)p + 2\mu\{u_x h_x^2 - h_x(v_x + u_y) + v_y\} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

法線方向と接線方向の力の釣り合いの式を考えると、次の2つの式が得られる。

### 1. 法線方向の釣り合い

法線方向の応力は表面張力と釣り合うので次の等式が成立つ。

$$\begin{aligned} -p + 2\mu \left\{ \frac{u_x h_x^2 - (u_y + v_x)h_x + v_y}{N^2} \right\} &= \sigma \frac{h_{xx}}{N^3} \\ p_s - p_0 &= 2\mu \left\{ \frac{u_x h_x^2 - (u_y + v_x)h_x + v_y}{N^2} \right\} - \sigma \frac{h_{xx}}{N^3} & (A.12) \end{aligned}$$

ただし、張力  $\sigma = \sigma_0 - \sigma_T(T - T_{melt})$ , ( $\sigma_T > 0$ ) であり、温度に関して線形であると仮定する。 $h_{xx}$  は  $h$  の2階微分である。

### 2. 接線方向の釣り合い

接線方向の応力はマランゴニ力と釣り合うので次の等式が成立つ。

$$\begin{aligned} \frac{1}{N^2} \left\{ 2\mu h_x(v_y - u_x) + \mu(1-h_x^2)(v_x + u_y) \right\} &= -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial \tau} \\ &= -\frac{\sigma_T}{N} \left( \frac{\partial T}{\partial x} + h_x \frac{\partial T}{\partial y} \right) & (A.13) \end{aligned}$$

これらの条件を、ナビエーストークス方程式の表面での境界条件とする。

第2章で用いた表面が平らなときの表面での境界条件は、式(A.12), (A.13)において自由表面の方程式  $h(x) = \text{一定}$ , 表面の  $y$  方向の速度  $v = 0$  とおくことによって得られる。