



多相一多成分熱流動場の実用的数値予測手法に関する研究

田中, 正博

(Degree)

博士 (工学)

(Date of Degree)

2010-03-25

(Date of Publication)

2011-09-12

(Resource Type)

doctoral thesis

(Report Number)

甲4926

(URL)

<https://hdl.handle.net/20.500.14094/D1004926>

※ 当コンテンツは神戸大学の学術成果です。無断複製・不正使用等を禁じます。著作権法で認められている範囲内で、適切にご利用ください。



博士論文

多相－多成分熱流動場の実用的数値予測手法
に関する研究

2010年1月

神戸大学大学院工学研究科
田中 正博

目 次

第 1 章 序論	1
1.1 研究の背景	1
1.2 従来の研究	1
1.2.1 気泡塔の概要	1
1.2.2 気泡塔内混相流の巨視的描像	3
1.2.3 気泡塔特性に影響を与える巨視的変数	5
1.2.4 気泡塔の総合的計算手法	7
1.3 本研究の目的と方法	12
1.4 本論文の構成	17
第 1 章の参考文献	20
第 2 章 混合モデルと人工ニューラルネットワークの組合せによる進化型計算手法	23
2.1 はじめに	23
2.2 ANN 相関器を組込んだ混合モデルの構築	24
2.2.1 Fischer-Tropsch(FT)合成反応に対する混合モデル	24
2.2.2 人工ニューラルネットワークによる巨視的変数評価	28
2.2.3 実験相関式	31
2.3 ANN 相関器および混合モデルの性能検証	34
2.3.1 気相体積率予測精度の検証	34
2.3.2 CO 転換率の各種パラメータ依存性	36
2.3.3 ANN の汎化能力と学習機能の検証	38
2.4 第 2 章のまとめ	40
第 2 章の参考文献	42

第3章 埋め込み境界法による複雑構造物内気泡流計算手法	44
3.1 はじめに	44
3.2 計算手法	46
3.2.1 場の方程式	46
3.2.2 相間運動量輸送に関する相関式	48
3.2.3 数値解法	50
3.2.4 埋め込み境界法	51
3.3 実験方法	55
3.4 計算手法の検証	58
3.4.1 単一構造物周りの単相流	58
3.4.2 単一構造物周りの気泡流	60
3.4.3 4つの円柱周りの気泡流	63
3.4.4 多数のロッドが存在する気泡塔内流れ	64
3.4.5 様々な形状の気泡塔内気泡流	65
3.5 課題	67
3.6 第3章のまとめ	68
第3章の参考文献	69
第4章 乱流計算機能の追加	71
4.1 はじめに	71
4.2 計算方法	72
4.2.1 乱流の取扱い	72
4.2.2 境界層の取扱い	75
4.3 計算方法の検証	77
4.3.1 二次元円柱周りの流れの Re 数依存性	77
4.3.2 三次元球周りおよび円柱周りの流れの Re 数依存性	84
4.4 第4章のまとめ	86
第4章の参考文献	88

第5章 気泡の合体・分裂モデルの検証	89
5.1 はじめに	89
5.2 計算方法	90
5.2.1 基礎方程式	90
5.2.2 気泡の合体・分裂モデル	94
5.3 気泡塔内多分散気泡流の実験	95
5.3.1 低気相空塔速度気泡流	95
5.3.2 大型気泡塔内気泡流	96
5.4 気泡合体・分裂モデルの検証	97
5.5 第5章のまとめ	101
第5章の参考文献	103
第6章 結論	105

主な使用記号

英文字

A	単位スラリー体積当たりの伝熱面積 [1/m]
a	スラリー体積に対する気液界面積濃度 [1/m]
a_{INT}	界面積濃度 [1/m]
Bo_S	Bodenstein 数 [-]
C	モル濃度 [mol/m ³]
C_G^i	気相中の化学種 i のモル濃度 [mol/m ³]
$C_{G, sb}^i$	小気泡中の化学種 i のモル濃度 [mol/m ³]
$C_{G, lb}^i$	大気泡中の化学種 i のモル濃度 [mol/m ³]
$C_{G, inlet}^i$	気泡流入口での気相中の化学種 i のモル濃度 [mol/m ³]
C_{SL}^i	スラリー中の化学種 i のモル濃度 [mol/m ³]
C_S	スラリー中の触媒濃度 [kg/m ³]
C_p	定圧比熱 [J/(kg K)]
C_D	抗力係数
C_{VM}	仮想質量係数
C_{LF}	揚力係数
C_{TD}	乱流分散係数
D_{ref}	液相中の代表拡散係数 [m ² /s]
d	ザウター平均気泡径 [m]
d_H	気泡長軸長さ [m]
d_V	気泡短軸長さ [m]
D_{SL}^i	スラリー中の化学種 i の拡散係数 [m ² /s]
E	混合拡散係数 [m ² /s]
Eo	エトベス数

F_v	分子粘性力 [N/m ³]
F_S	表面張力 [N/m ³]
Fr	Froude 数 [-]
g, \mathbf{g}	重力加速度 [m/s ²]
$-\Delta H_{FT}$	FT 反応エンタルピー [J/mol]
He^i	化学種 i のヘンリー定数 [Pa m ³ /mol]
h	スラリーと冷却管壁間の熱伝達係数 [W/(m ² K)]
IR	ガス流入口での水素に対する一酸化炭素の比率 [-]
k_{FT}	FT 反応率の式中の係数 [1/s]
k	物質移動係数 [m/s]
k_L	連続液相の乱流エネルギー [m ² /s ²]
L_H	気泡塔高 [m]
L_D	気泡塔径 [m]
M	モルトン数
M_D	抗力 [N/m ³]
M_{VM}	仮想質量力 [N/m ³]
M_{LF}	揚力 [N/m ³]
M_{TD}	乱流分散力 [N/m ³]
M_{Lm}	気泡グループ m の分散相と連続液相間の相間運動量輸送 [N/m ³]
M_{Rm}	合体・分裂による正味の体積率輸送に伴う運動量輸送 [N/m ³]
N	気泡個数, 気泡グループ数
P	圧力 [Pa]
P_B	気泡の分裂確率
P_C	気泡の合体確率
r_{FT}	FT 反応速度 [mol/(kg _{catalyst} s)]
r^i	物質 i の消費速度 [mol m ³ /s]

R	気体定数 [J/(K mol)]
Re	レイノルズ数
R_m	気泡の合体・分裂によるグループ m への正味の体積率 輸送率 [1/(m ³ s)]
S	ニューロンの重み付け総和 [-]
T	温度 [K]
t	時間 [s]
Ta	Tadaki 数
U	空塔速度 [m/s]
u, \mathbf{u}	速度 [m/s]
u_m	グループ m の分散相の速度 [m/s]
u_c	連続相の速度 [m/s]
UR	水素に対する一酸化炭素の使用比率 [-]
V	体積 [m ³]
w	ニューロン間の結合加重係数 [-]
X^{CO+H_2}	合成ガス転換率 [-]
X^{H_2}	水素ガス転換率 [-]
x, y	ニューロンの出力値 [-]
z	高さ位置成分 [m]

リシヤ文字

α	体積率 [-]
ε	contraction factor [-]
Γ_{Gm}	気泡グループ m から連続気相への体積率輸送率 [1/(m ³ s)]
μ	粘性係数 [Pa s]
μ_{eL}	連続液相の実効粘性係数 [Pa s]

μ_{TB}	せん断乱流粘性 [Pa s]
ρ	密度 [kg/m ³]
σ	表面張力 [N/m]
θ	ニューラルネットワークのバイアス値 [-]
κ	気液界面の平均曲率 [-]
δ_s	異相界面上以外でゼロとなるデルタ関数
n_s	異相界面の単位法線ベクトル

上付添字

—	平均値
i	化学種の水素または一酸化炭素
T	転置

下付添字

c	連続相混合体
G	気相
<i>inlet</i>	入口
L	液相
\varnothing_b	大気泡
m	気泡グループ番号($m = 1, 2, \dots, N$)
sb	小気泡
S	触媒
SL	スラリー
<i>trans</i>	遷移点
<i>wall</i>	冷却管壁

第1章 序論

1.1 研究の背景

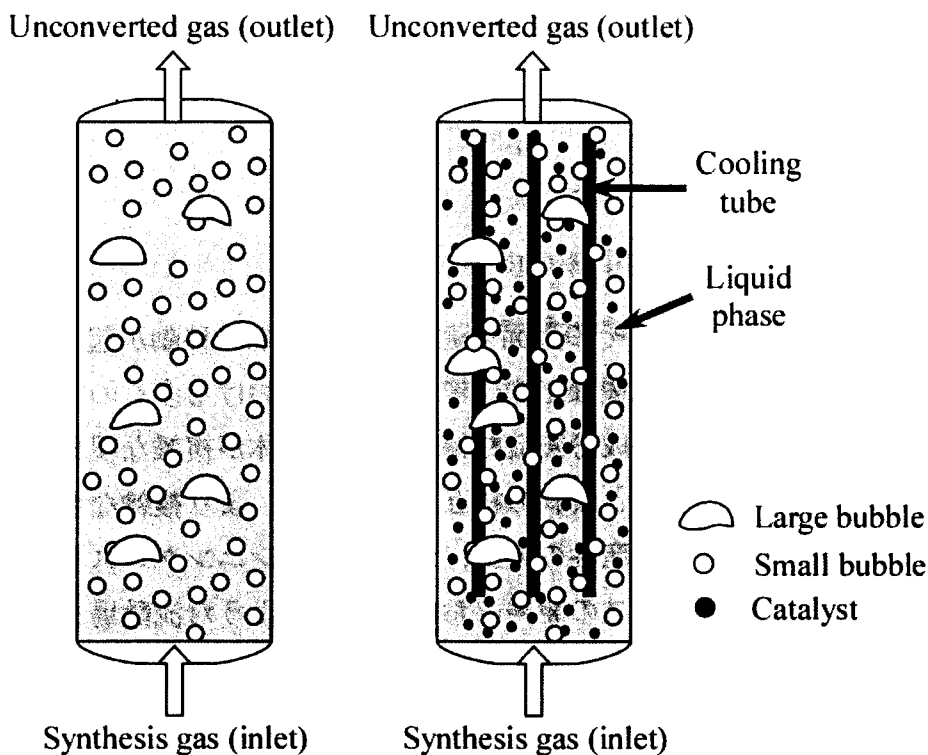
気相，液相，固相が混在し，その界面を通して物質や熱の移動が起こる多相－多成分熱流動場は，化学，製鉄，発電などの工業プラントにおける多くの工業設備内に見られる．工業設備内の多相－多成分熱流動場は，それ自体が複雑な現象であるのみでなく，設備内部の複雑な構造物と流れの相互作用により，より複雑な現象となっている．製品の品質・歩留まり・生産性の向上，および，ランニングコストや設備コストの低減を目的とした工業プロセスの開発において，このような流動場を最適に制御することは重要な課題の一つである．この課題解決のために，信頼性の高い実験技術とともに，計算による数値予測技術が必須となってきている．

数値予測技術には，高い予測精度が求められる詳細設計技術としての役割に加えて，多くのケーススタディーやパラメータの感度解析により実験条件や設備基本仕様の絞り込みを行い，開発期間の短縮や開発コストを低減するという役割も求められている．一般的には計算精度と計算コストはトレードオフの関係にあるため，工業プロセスの開発においては，計算精度と計算コストのバランスが取れた実用的な手法の開発が必要である．本研究は，気泡塔型反応装置を一つの具体的な設備対象として，装置内部に複雑な構造物を有する大型工業設備の設計，スケールアップ，最適操業条件の検討に活用できる，実用的な多相－多成分熱流動場の数値予測手法に関するものである．

1.2 従来の研究

1.2.1 気泡塔の概要

気泡塔型反応装置およびスラリー気泡塔型反応装置(以後どちらも“気泡塔”と呼ぶ)は，その内部で気相と液相が混合し，気液界面を通して物質移動が起こり，その物質と液相自体，あるいは液相に溶解している成分や混濁している粒子との間で反応が起こることによって生成物を得る装置である．図 1.1 に気泡塔の概略図を示す．ガスは



(a) 気泡塔 (b) スラリー気泡塔(除熱管あり)

図 1.1 気泡塔型反応装置の概要図

装置下部から吹き込まれ、反応に寄与しなかったガスは装置上方より出ていく。装置内には、反応熱を除去するための多数の冷却管(図 1.1 (b))や、流れを制御するための整流板などが設けられる場合がある。

気泡塔は、攪拌型または充填床型反応装置に対して、次のような利点がある([1]-[5])ため、石油、化学、水処理プラントをはじめとする様々な工業設備で広く使用されている。

- ◆ 気液界面積が大きく、単位気泡塔体積あたりの生成物の収率が高い。
- ◆ 100 μm 以下の細かい触媒粒子を用いることができるため、触媒 - 溶媒界面積が大きく、単位気泡塔体積あたりの生成物の収率が高い。
- ◆ 大量の液相の存在により、温度制御能または除熱能が高い。
- ◆ シンプルなデザインと機械的稼働部がないために、操業コストおよびメンテナンスコストが小さい。

このような利点がある一方で、塔内で起こっている現象(流動、物質・熱移動、反応)は複雑でまだ十分解明されていないため、気泡塔の設計やスケールアップ、操業条件

の最適化は現在でも容易ではない([6]).

気泡塔の設計、スケールアップおよび操作条件の最適化のためには、プロセスに影響を与える律速過程を定量的に明確にする必要がある。物質移動が律速過程になる場合、物質移動速度を大きくするために、大きな気液界面積(小さな気泡径)と十分な固気液混合状態が必要となる[1]。また、反応が律速過程になる場合でも、反応速度は温度に強く依存するため、熱移動という観点から固気液混合状態が重要となる。すなわち、気泡径分布と固気液混相流れを把握し、これらを制御することは、気泡塔を用いたプロセスにおける重要な基本的技術課題である。

1.2.2 気泡塔内混相流の巨視的描像

気泡塔内の液相流速は気相流速に比べて遅いため、流動特性には気相空塔速度がより重要な影響を及ぼす。図1.2は水 - 空気系気泡塔内の気泡流動様式を、気相空塔速度と塔径に対して整理したものである[7]。図1.2中の各条件範囲における流動パターンを図1.3に示す[7]。気相空塔速度が小さい場合は、気泡径はほぼ均一で、気泡は均一に液相中を上昇し、液相中に気泡が均一に分布する均質気泡流動様式(Homogeneous Bubble Flow Regime)となる。しかし気相空塔速度を上げていくと、気泡の合体が起こり

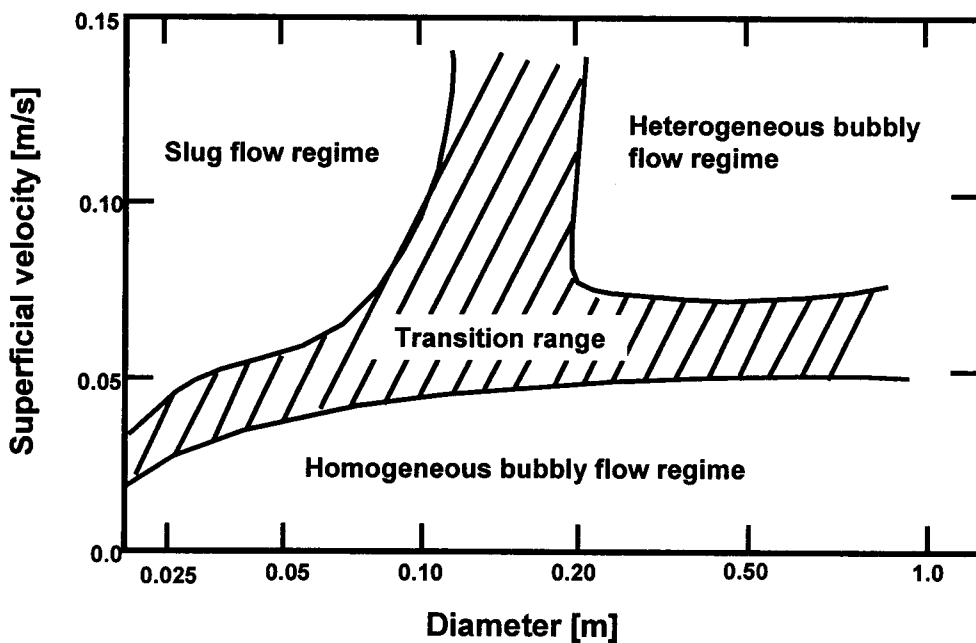


図 1.2 流動様式分類マップ(出典 : Deckwer *et al.* (1980) [7])

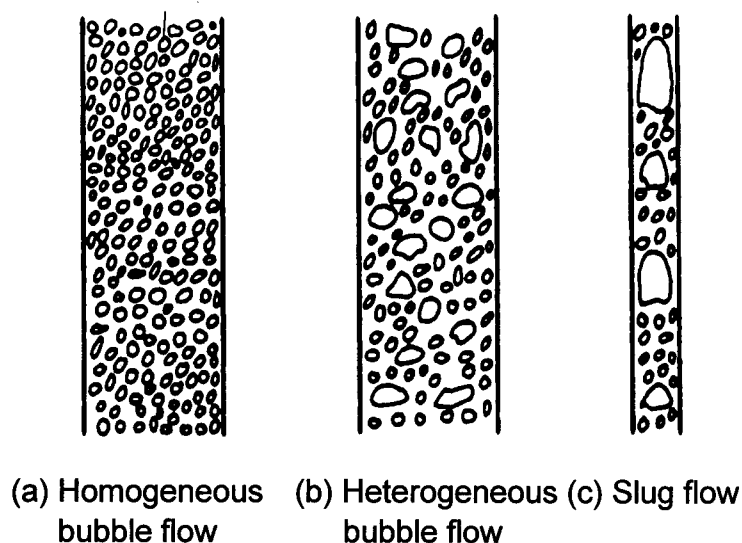


図 1.3 気泡塔内の気泡流動様式(出典 : Deckwer *et al.* (1980) [7])

はじめ、様々な大きさの気泡が混在する非均質気泡流動様式(Heterogeneous Bubble Flow Regime)へと遷移する。小型の実験装置などに見られる塔径が細い気泡塔の場合は、非均質気泡流動様式における大気泡が塔側壁まで広がり、ピストンのような形で塔内を上昇するスラグ流動(Slug flow)様式となる。本研究で対象とするのは、工業設備で用いられる比較的塔径の大きい気泡塔であるので、このスラグ流動様式は本研究の範囲には含めない。

Chen ら[8]は、PIV(Particle Image Velocimetry)システムを用いて、ヨウ化ナトリウム溶液で満たされた気泡塔内の流動パターンを調べ、気相空塔速度の増加によって、①分散気泡流、②旋廻渦流、③乱流流れの三つの状態に遷移することを明らかにした。図 1.4 に旋廻渦流状態における気泡塔内部の液相の流れの様子を示す。塔中央部には、大気泡の上昇により誘起された大気泡と液相の上昇流が存在し、壁付近では、壁に沿って直線状に流れる下降流と、塔中央領域を取り巻くようにらせん状に下降していく旋廻流が存在している。壁付近の気相体積率は小さく、また存在する気泡の径は小さい。

以上の研究は、工業設備に比べて小さな気泡塔における実験によるもので、実際の大型工業設備内の流れをこのように可視化することは非常に困難である。工業設備は、塔径がさらに大きく、内部に複雑な構造物も存在する。気相空塔速度も比較的大きい条件で操業されるため、流れの様子はより複雑なものになると想像される。また、流れの巨視的描像のみからは反応に影響を及ぼす気泡径分布や固気液混合状態を定量的に予測できないため、1.2.3 以降に述べる定量的評価が必要となる。

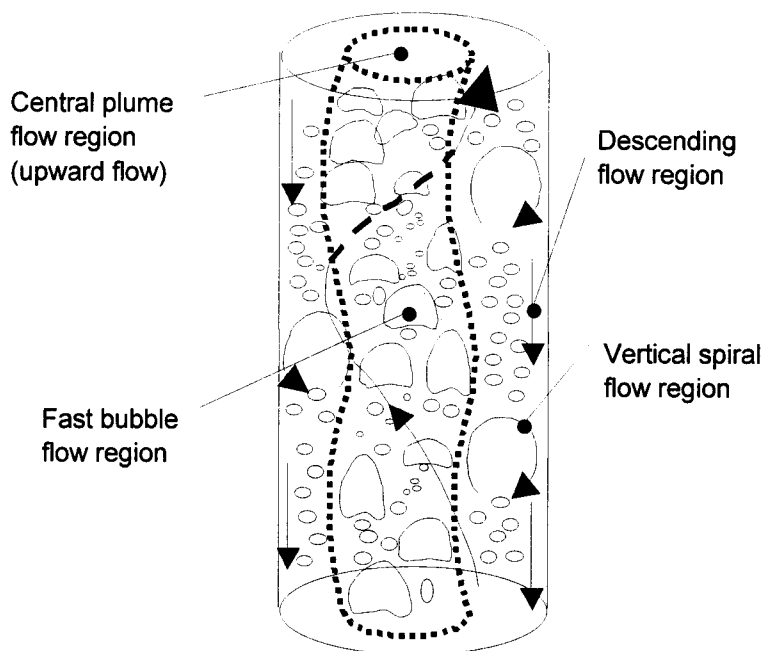


図 1.4 気泡塔内の三次元混相流の巨視的構造(出典 : Chen *et al.* [8])

1.2.3 気泡塔特性に影響を与える巨視的変数

気泡塔内部の巨視的な流動状態とともに、気泡塔特性に影響を与える流動および熱・物質移動に対応する巨視的変数に関する研究が数多く行われてきた(例えば Deckwer [1]). 巨視的変数の重要なものとして、流動に関わるものは気相体積率、異相境界における物質・熱移動に関わるものは物質移動容量係数や熱伝達係数などがある。これらの巨視的変数は、炉構造(塔径、塔長など)、操業条件(気相空塔速度、温度、圧力など)、および物性値(密度、粘性など)に依存し、様々な実験条件に対して研究され、実験相関式として報告されている。

気相体積率 α_G は、気泡塔内の気相、液相、固相全体積に対する気相体積の割合であり、気泡塔内での気相の滞留時間や気液界面積に直接的または間接的に関係する重要な因子である。式(1.1)と式(1.2)に気相体積率の実験相関式の例を示す。また表 1.1 にこれらの式を求めた実験条件を示す。

$$\alpha_G = 0.672 \left(\frac{U_G \mu_L}{\sigma} \right)^{0.578} \left(\frac{\mu_L^4 g}{\rho_L \sigma^3} \right)^{-0.131} \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{0.062} \left(\frac{\mu_G}{\mu_L} \right)^{0.107} \quad (1.1)$$

$$\alpha_G = \frac{U_{trans}}{U_{G, sb}} + \frac{U_G - U_{trans}}{U_{G, lb}}$$

$$U_{G, sb} = 2.25 \frac{\sigma}{\mu_L} \left(\frac{\sigma^3 \rho_L}{\mu_L^4 g} \right)^{-0.273} \left(\frac{\rho_L}{\rho_G} \right)^{0.03}$$

$$U_{trans} = 0.5 U_{G, sb} \exp(-193 \rho_G^{-0.61} \mu_L^{0.5} \sigma^{0.11})$$

$$U_{G, lb} = U_{G, sb} + 2.4 \frac{\sigma}{\mu_L} \left(\frac{\mu_L (U_G - U_{trans})}{\sigma} \right)^{0.757} \left(\frac{\sigma^3 \rho_L}{\mu_L^4 g} \right)^{-0.077}$$
(1.2)

表 1.1 気相体積率の実験相関式の実験条件

Equations	Researchers	Gas/liquid	Conditions
(1.1)	Hikita <i>et al.</i> [9]	Air, H ₂ , CO ₂ , CH ₄ , C ₃ H ₈ / H ₂ O, 30, 50wt% sucrose, methanol, nbutanol, aniline	P: 1 atm U _G : 0.042-0.38 m/s L _D : 0.1 m L _H : 1.5 m
(1.2)	Wilkinson <i>et al.</i> [10]	N ₂ / n-heptane, monoethylene glycol, H ₂ O	P: 1-20 bar U _G : up to 0.2 m/s L _D : 0.158 m L _H : 1.5 m

ここで、 U は空塔速度、 P は圧力、 g は重力加速度、 μ は粘性係数、 ρ は密度、 σ は表面張力、 L_D は気泡塔径、 L_H は気泡塔高、下付き添え字は、 L は液相、 G は気相、 sb は小気泡、 lb は大気泡、 $trans$ は均質気泡流から非均質気泡流への遷移点を表す。これまでの装置設計はこのような実験相関式を駆使して経験的に行われてきた。設計方法は、例えば、気泡塔・三相流動層実用ハンドブック(上山[11])に詳しく解説されている。

実験相関式は、式(1.1)および(1.2)からわかるように、一般的に多くの実験パラメータの関数であり、非常に複雑な式になっている。また、各々の相関式は、それを構築するためにおこなった実験条件に強く依存しており、これを工業設備のような大型で複雑な装置に適用する場合、次のような点に注意し[1]、相関式が適用できるかどうかを検討しなければならない。

実験条件と使用物質

相関式を求めるためのデータは、主に、常温、常圧において、水、水溶液もしくは

は純粋な有機溶媒を用いた実験で得られている。しかし実際の工業設備における気泡塔は、常にこれらとは異なった温度・圧力条件(例:高温, 高圧)で運転されている。また気泡径は表面張力や粘性などの物性値に大きく依存しているため、物性値が異なると気泡径分布も異なる。さらに、これらの物性値は温度や圧力の影響を受けて変化する。

幾何形状

実験で使用されている気泡塔はほとんどが実験室レベルの小さなもので、しかもその内部には構造物が存在しないか、存在しても単純なものである。しかし実際の工業設備はこれより大きく、内部構造も一般的に複雑な場合が多い。除熱管群や整流板などの内部構造物により、巨視的な流動パターンが大きく変わる可能性がある。

非反応実験系

多くの実験は、反応がない条件、すなわち純粋な流体力学的挙動や物質移動を調べるための実験系で行われており、実際の工業設備に適用する場合は反応の影響を考慮する必要がある。例えば、非反応実験系で得られた気相体積率の気相空塔速度依存性を、反応を起こす工業設備に適用する場合、反応による気相体積率の変化をモデル化する必要がある。

混合状態

化学反応速度定数などのデータのほとんどが完全混合状態が成り立つ小型オートクレーブ(加熱圧力釜)における実験データであるため、混合状態が十分でない大型工業設備では、完全混合状態からのずれを考慮する必要がある。

1.2.4 気泡塔の総合的計算手法

前節のような、実験相関式を用いた経験的な設計手法に対して、より高精度な設計を目的とした合理的、定量的な設計手法として、気泡塔内の物質・運動量・エネルギーの保存を数学モデルで取り扱う手法が構築されてきた。手法には大きく分けて、巨視的変数を用いた混合モデルに基づく計算手法と、より基本的な物理変数を用いたCFDに基づく計算手法がある。

1) 混合モデルに基づく計算手法

本手法は、非定常・三次元の実際の気泡塔内移動現象を定常・一次元などに平均化した場の方程式を用いて物質・熱収支を評価する手法であり、混合拡散モデル、逆混合セルモデルなどがある。使用する場の方程式は、初期の頃は、液相あるいはスラリー一相(液相+触媒粒子)と、一種類の分散気相のみを考慮していた(Deckwer and Serpemen [12])。近年は、大型気泡塔で見られる非均質気泡流における大小気泡の挙動の違いから、気相を大小二つの気泡径グループに分類したものへと改良されてきている(Maretto *et al.* [13], van der Laan *et al.* [14], Rados *et al.* [15], Sehabiague *et al.* [5])。本手法では、平均化によって、局所的な気相体積率や気相・液相・固相の混合効果などを、1.2.3 で述べた気相体積率や混合拡散係数などの巨視的変数で置き換え、実験相関式として場の方程式に組み込む。図 1.5 に大小二種類の気泡グループを考慮した混合モデルの概念図を示す。本モデルでは、大気泡と小気泡はそれぞれ別の空塔速度で気泡塔内を移動し、大気泡相-液相間、小気泡相-液相間でそれぞれ別の速度で物質移動が起こる。

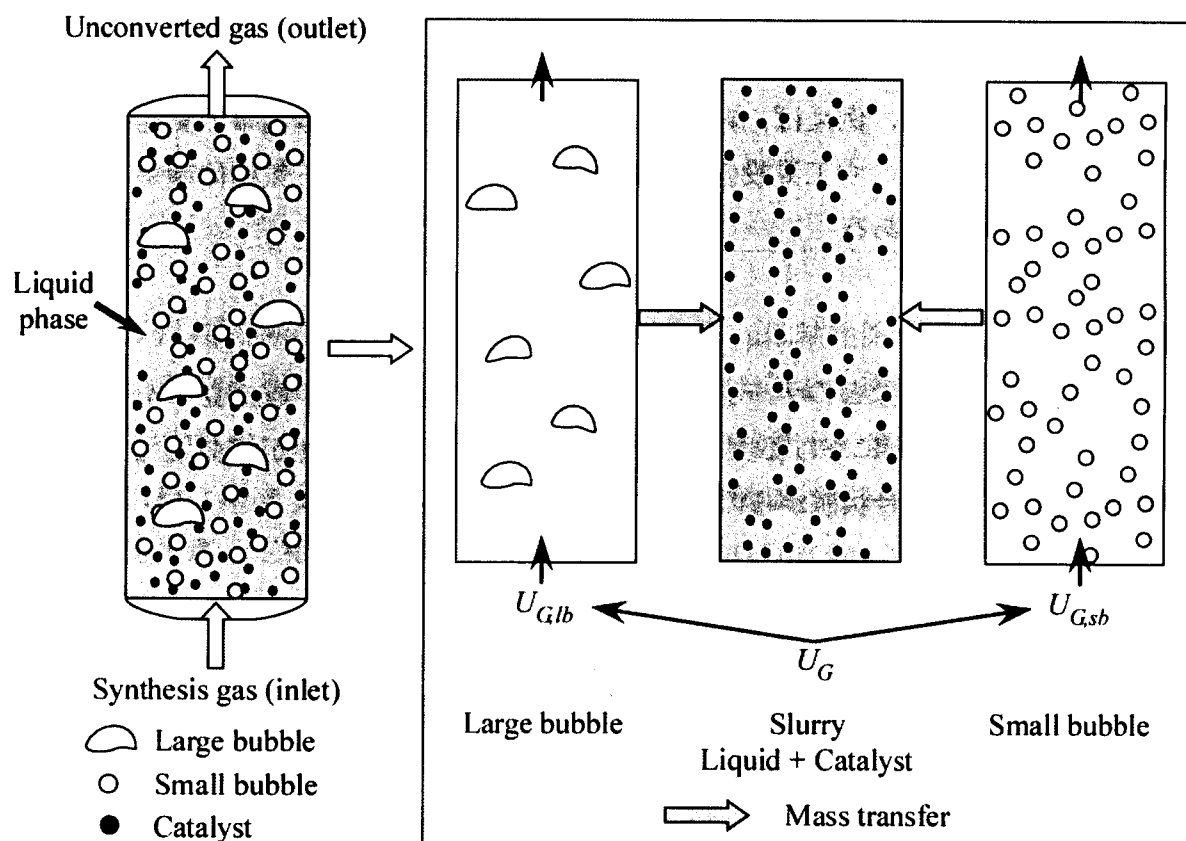


図 1.5 大小二種類の気相とスラリー相を考慮した混合モデルの概念図

混合モデルに基づく計算手法における最も大きな課題は、実験相関式の適用範囲に関することである。多くの実験相関式は、1.2.3 で述べたように、常温、常圧下の小型気泡塔実験で求められており、気相空塔速度や触媒濃度の範囲も限定されている[16]。工業設備の運転条件の計算においては、このような実験相関式をその適用範囲外であっても使用せざるを得ない場合が多く、計算精度が著しく低下する可能性がある。種々の条件に適用できる汎用性の高い実験相関式を構築することが望ましいが、そのような相関式は装置構造や反応物物性などに関する変数を数多く含まねばならず、構築そのものが極めて困難である。また、新たな実験データを取り込んで相関式の適用範囲を拡張し、かつ精度を向上させるためには、必然的に相関式を再構築する必要があるが容易ではない。例えば、現実の流れの中では、様々な大きさの気泡が合体・分裂を起し、様々な気泡径分布を持つため、反応に大きな影響を及ぼす界面積濃度の予測精度は十分でない。また、混合拡散係数のモデル化に、乱流や構造物の影響を十分に反映されていない可能性がある。

混合モデルのもう一つの課題は、平均化の適切性である。多くの混合モデルでは、定常・一次元の場合の方程式を用いているが、計算対象によっては、非定常性や二次元性を考慮しないと、予測精度が大きく損なわれる可能性がある。

2) CFD に基づく計算手法

最近、コンピュータの高性能化および低価格化を背景にして、より微視的で基本的な現象の物理モデルを組み込んだ CFD に基づく高精度な計算手法の構築が進められている。現時点では個々の現象のモデルがまだ十分整備されておらず、以下のような課題がある([17], [18])。

(1) 構造物の流れへの影響

装置内部の複雑な構造物の影響を計算する場合、これまでは、計算格子として構造物表面に沿った境界適合格子(図 1.6 (a))が多く用いられてきた。境界適合格子を用いると、構造物の形状を正確に計算に取り込めるとともに、境界層の厚さに応じて計算格子を構造物表面付近に密集させることも可能であり、より高精度な境界条件の設定ができる。しかし、境界適合格子は格子生成に多大な時間が必要であり、構造物が複雑になると格子生成できない場合もある。そこで、計算領域を、構造物の内部も含めて固定で等間隔な直交格子(図 1.6 (b))で分割する方法が最近注目され始めている。このような計算格子では複雑な格子生成は必要ない。た

だし、流体部と固体部を同じ方程式で解くため、方程式の修正が必要となる。また、構造物表面と計算格子が一致しない部分のモデル化が複雑になる場合があり課題となっている。

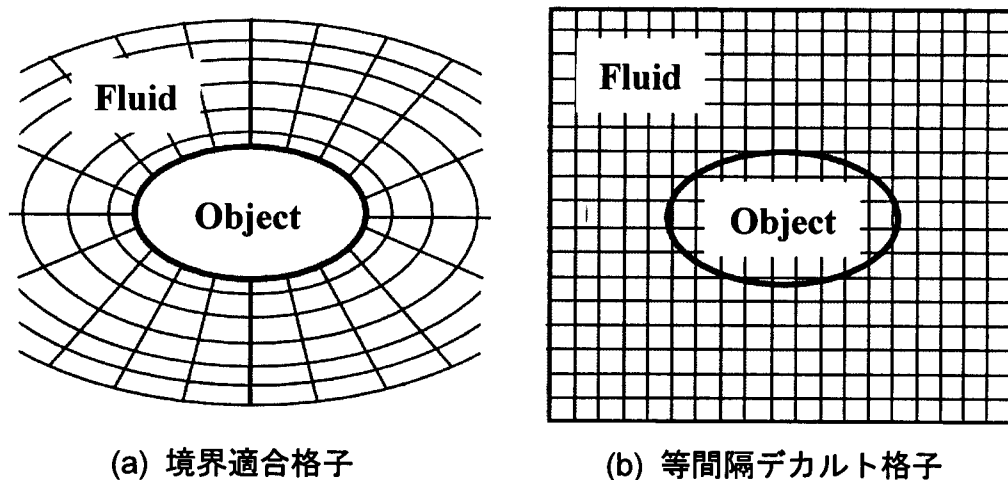


図 1.6 埋め込み境界法の概要図

(2) 混合状態への乱流の影響

気泡流乱流の複雑さの原因は、浮力による装置スケールの運動からコルモゴロフスケールの運動までのスケールの幅広さと、気液界面の存在による乱れの生成である。様々な方法が報告されているが、代表的なものとして、以下の三つがあげられる。

(a) 直接数値計算法(DNS : Direct Numerical Simulation)

+界面追跡法

(b) ラージエディシミュレーション法(LES : Large Eddy Simulation)

+多流体モデル

(c) レイノルズ平均シミュレーション法

(RANS : Reynolds Averaged Navier-Stokes Simulation)

+多流体モデル

(a)は、計算格子をコルモゴロフスケール近傍まで細かくし、乱流モデルを用いないで、かつ全ての気泡界面を詳細に計算する方法である。最も精度が高いが計算コストが非常に高く、現在の計算機能力では、低レイノルズ(Re)数で、かつ少数の気泡を含む流れしか取り扱えないため、工業設備内の流れの実用的な

計算には適用できない。また、(c)は、計算コストが最も低いが、RANS 自体が基本的に定常計算のためのモデルであるため、非定常現象が本質的な対象には適用できない。また、粒子、気泡、液滴などの分散相を含む二相流の場合、乱流変動をレイノルズ平均するスケールと二相流の平均値を求めるスケールの関係がどのようになっているのかははっきりしない[19]。最も有望な方法は(b)であるが、LES で必要とされる計算格子サイズはDNS ほどではないが小さく、工業設備内の流動計算としては計算コストがまだ大きすぎる。また、LES で導入されるフィルター幅と二相流の平均値を求めるスケールとが独立で決められるため、LES と多流体モデル間で整合性が保てない。このように、大スケールの気泡乱流に関しては、まだ決定的な乱流計算の方法は確立されていない状況である。

また、大きなサイズの計算格子を使用する場合、固体表面近傍の境界層を解像できないため、計算格子サイズより薄い境界層のモデル化も重要な課題である。境界適合格子を用いると、境界層厚みに応じて固体表面近傍の計算格子密度を変えて、境界層内を詳細に計算することが可能である。しかし、計算領域に層流 - 遷移流 - 乱流の全てを含む流れや、流れが層流と乱流間を非定常に遷移する計算では、最も高い格子密度が必要となる乱流計算にあわせた計算格子を作成する必要があり、層流部分の高密度な計算格子は無駄になる。また、乱流域では対数則などの壁関数を設定して計算格子より薄い乱流境界層を模擬する方法もあるが、摩擦速度をニュートン法などで解く必要があり、計算コストが増加する。層流 - 遷移流 - 乱流全ての領域に適用できる計算コストの小さな簡易な代数式で表された境界層モデルはみあたらない。

(3) 気泡の合体・分裂

気泡の合体・分裂に関しては、前川ら[20]は、小型気泡塔内の気相空塔速度が 0.035 m/s の気泡流において、気泡塔内気泡流に及ぼす入口気泡径の影響を実験的に調べ、合体・分裂頻度が高い多分散気泡流における気相体積率分布、気泡径分布のデータを取得している。本データには、①気泡合体が支配的な流れ、②気泡分裂が支配的な流れ、③合体と分裂がほぼ同等な流れのデータが含まれている。このデータを用いて前川ら[21]は既存の合体・分裂モデルの検証を行い、上記三つの条件における全ての流れに適用可能な合体・分裂モデルを選定している。前川らによって検証および選定されたこれらの合体・分裂モデルは、様々な合体・分裂頻度に対して良好な予測を与えるモデルではあるが、合体・分裂

が殆ど生じない流れも良好に予測できなければ、適正なモデルとはいえない。さらに、構造、サイズ、気相空塔速度の異なる気泡塔内気泡流を良好に予測できなければ汎用性のあるモデルとはいえない。特に、大型気泡塔における高気相空塔速度条件における気泡流を良好に予測できることは、工業設備の検討で重要となるスケールアップ問題に活用するための必要条件である。しかし、合体・分裂モデルの検証に用いる、合体・分裂が殆ど生じない低気相空塔速度条件における気泡塔内気泡流の気相体積率分布と気泡径分布の実験データはみうけられない。また、高気相空塔速度条件における大型気泡塔内気泡流の実験データもみあたらない。

1.3 本研究の目的と方法

工業設備の設計支援ツールは次のような機能を有する必要がある。

- ◆ 反応生成物を定量的に評価(生成物収率や生産効率など)できる。
- ◆ 設備に設置されたセンサーで測定できる状態変数(温度など)を評価できる。
- ◆ 大型で複雑な設備内の現象の予測ができる。
- ◆ 計算精度と計算コストのバランスがとれている。

さらにこれらに加えて、次の機能は設計効率を高める。

- ◆ 多くの実験条件に対応できる広い適用範囲をもつ。
- ◆ 最新の実験結果を取り込み、予測精度を向上させることが容易である。

本研究の目的は、装置内部に複雑な構造物を有する大型工業設備の設計、スケールアップ、最適操業条件の検討に活用できる、上記設計支援ツールの機能を有する多相一多成分熱流動場の数値予測手法の一つの雛型を構築することである。そのために、まず、反応生成物を定量的に評価でき、計算コストが小さい、混合モデルに基づく計算手法の構築を検討する。現状の混合モデルの課題である実験相関式の適用範囲の制約に対して、人工ニューラルネットワーク(Artificial Neural Network: ANN)による巨視的変数の評価を試み、ANNを組み込んだ混合モデルの構築を図る。次に、混合モデルでは計算できない非定常・三次元の現象の予測のために、CFDに基づく計算手法の構築を検討する。ただし、従来よりも計算コストの小さな計算手法の確立を目指す。図1.7に本研究で構築する二つの計算手法の概要を示す。本シミュレータの入力は、炉構造、材料物性値、操業条件などに関する情報で、出力は、炉特性に関する情報(反応生成物、流動状態など)である。混合モデルに基づく計算手法は、多くのケーススタディーや各

パラメータの感度解析などに、CFD に基づく計算手法は、詳細な構造設計，操業条件最適化のための計算に適しており，必要な計算解像度に応じて使い分けることができる．以下に二つの計算手法の構築方法をより詳しく説明し，最後に二つの計算手法の関係を示す．

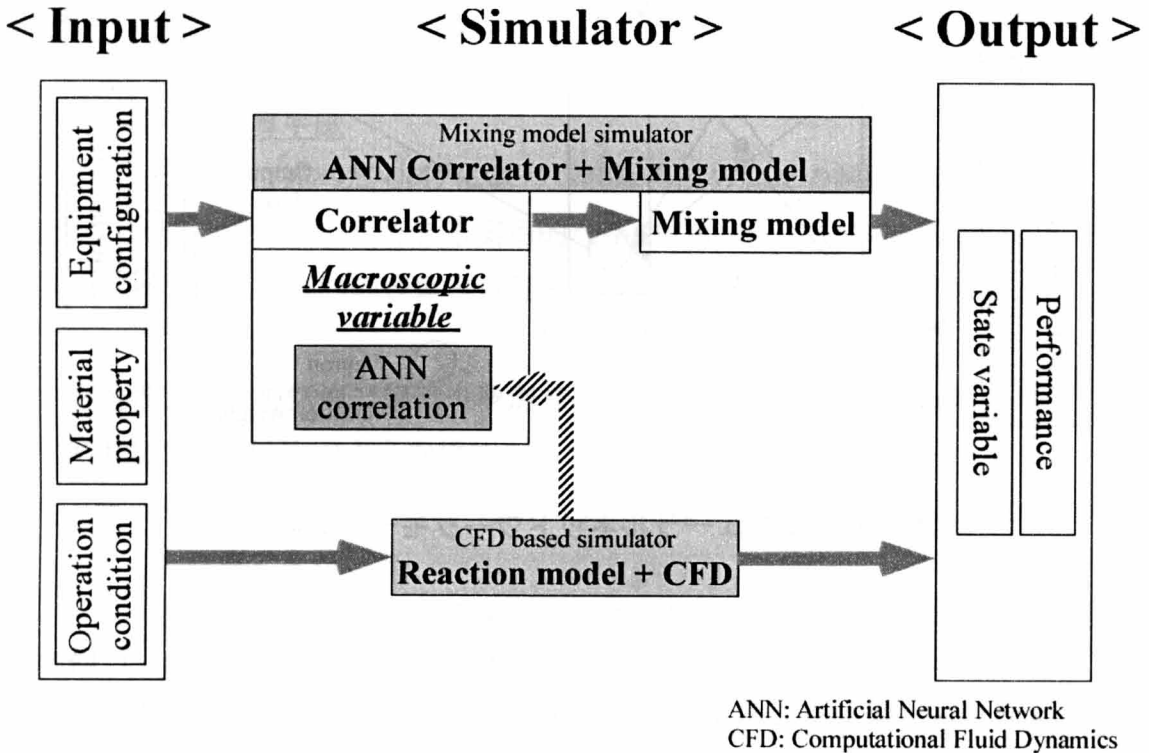


図 1.7 構築するシミュレータの鳥瞰図

1) 混合モデルに基づく計算手法

本研究では，物質と熱の移動，および反応を計算し，反応生成物の定量的評価ができる計算手法を構築する．巨視的変数の適用性に関する課題を解決するために，実験相関式の代わりに，ANN による巨視的変数評価法(これを ANN 相関器と呼ぶ)を組み込んだ混合モデルによる計算手法を検討する．

ANN は、図 1.8 に示すように、生体の神経細胞(ニューロン)を模擬した人工の素子を相互に接続して構成するネットワークのことである．素子間には生体の細胞間作用(シナプス結合)に類似した相互作用が組み込まれている．ANN は入力層，出力層およびその間にある複数の隠れ層(図では一層のみ記述)からなる．各層にはいくつかの人工ニュー

< Input >

< Output >

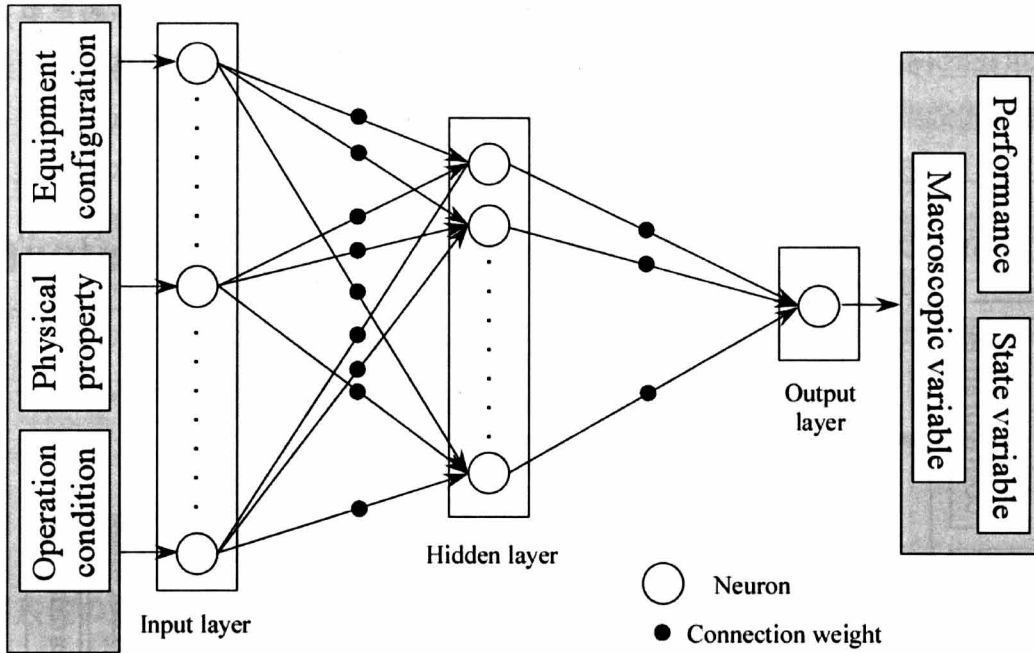


図 1.8 人工ニューラルネットワークモデルの概要図

ーロンユニット(以後“ニューロン”と呼ぶ)があり、それぞれのニューロンは隣の層の全てのニューロンと繋がっており、同じ層内では繋がりはない。そして情報は、図中左から右に一方向に伝わる。重み付け連結ユニット(図 1.8 中黒丸)の機能は、ニューロン間の信号伝達効率の違いを付加することである。各ニューロン内では、前層のニューロンの出力値に伝達効率(結合加重係数)をかけたものが合計され、その値があるしきい値を超えると情報が次のニューロンに伝達される。ANN は、入力値(装置構造、物性値、操業条件など)から、重み付け連結ユニットとニューロンを経て、最終の出力値(反応生成物濃度、気相体積率など)が計算される非線形写像と考えられ、その写像は、ANN の構造(隠れ相の数と各相におけるニューロンの数)と結合加重係数により規定される。

結合加重係数は、既知の入出力関係を“教師データ”として、“学習”というプロセスを通して決定される。様々な学習プロセスが存在するが、誤差逆伝搬法という手法が多く用いられている[23,24]。一方、ANN の構造の決め方にはまだ任意性があり、経験的に決める必要がある。例えば、ニューロンの数を増やすとネットワークが学習する概念の一般化が損なわれる。逆に少ないと判断能力が無くなってくるとともに、学習の

収束も悪くなってくる[25].

ANNによれば, 学習プロセスで用いた入力値以外の未知の入力に対しても良好な巨視的変数評価が期待でき(この性能を汎化能力という), また, 実験データベースが拡充された際には, 再学習機能により予測精度の向上も可能である. ANN 相関器を混合モデルと組み合わせた計算手法が構築できれば, 予測精度が進化する計算手法の雛型となる.

2) CFDに基づく計算手法

本研究では, 1.2.4 で述べた CFD に基づく計算手法の個々の課題に取り組む; (1)複雑構造物内の気液二相流を予測できる実用的な手法の構築. (2)実用的乱流予測手法の構築. (3)適用範囲の広い気泡の合体・分裂モデルの選別および予測精度の検証.

(1) 複雑構造物内の気液二相流を予測できる実用的な手法の構築

実用的な手法は次のような機能を有する必要があると考える.

- ◆ 非常に多くの計算格子を用いることなく複雑な大規模工業設備内の流れを計算できること.
- ◆ 複雑な計算格子の生成をしなくても幾何的に複雑な構造を取り扱えること.

この条件を満たす手法として, 本研究では, 富山と島田が提案した多流体モデルと界面追跡法のハイブリッド法[26]に, 埋め込み境界法を融合した手法を検討する. 多流体モデルと界面追跡法を融合したハイブリッド法は, 様々なスケールと相を含む混相流れを扱える. 一方, 埋め込み境界法は, 複雑な幾何形状内の流れを, 固定・等間隔・直交格子を用いて計算できる. 埋め込み境界法では, 図 1.9 に示すように, 構造物内も流体部と同じ計算格子で分割し, 場の方程式に外力項を加えることにより流れを制動して固体構造物を模擬する. 埋め込み境界法は, はじめ, 心臓の弁を通る血液の流れをモデル化するために Peskin[27]により提案された. 境界適合格子に比べ面倒な格子生成が必要なく, 構造物が移動する場合でも, 計算格子を作り直す必要がない. このような利点のため, Peskin 以降様々な改良がおこなわれ, 様々な分野で広く適用されてきている[28]. ただし, 構造物表面と計算格子が一致しない部分の外力項のモデル化は一般に複雑であり, 多流体モデルと界面追跡法のハイブリッド法と整合性があり, かつ計算コストの小さな手法の構築には新しいアプローチが必要である.

多流体モデルと界面追跡法のハイブリッド法に埋め込み境界法を融合した手法が構築できれば、液相 - 気泡 - 自由表面 - 構造物間の全ての界面を含む計算を、単純な計算格子で計算できる計算手法となる。

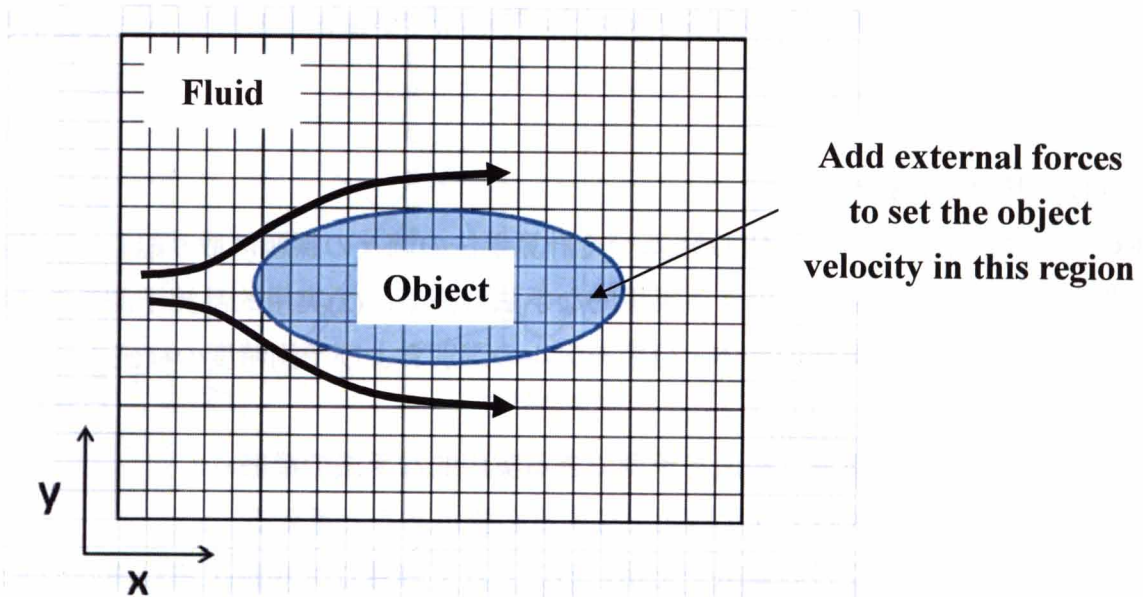


図 1.9 埋め込み境界法の概要図

(2) 実用的乱流予測手法の構築

これまでの乱流モデルは非常に多くの計算格子を必要とし、また、乱流モデルの粗視化のスケールと多流体モデルの平均値を求めるスケールとの間に整合性がない。本研究では、数値粘性を用いて渦粘性をモデル化するアプローチにより、乱流モデルの粗視化のスケールと多流体モデルの平均化のスケールを場の方程式の離散化のスケールと一致させた整合性のある乱流の取扱い方法の構築を検討する。また、境界層に関しては、埋め込み境界法と整合性があり、かつ、境界層厚みに応じて流れへの影響が自動的に変化する、計算コストの小さな境界層の取扱い方法の構築を検討する。

(3) 適用範囲の広い気泡の合体・分裂モデルの選別および予測精度の検証

本研究では、前川ら[21]が検証した合体・分裂モデルを NP2 モデルに組み込み、合体・分裂がほとんど起こらない流れを含む、構造・サイズ・気相空塔速度の異なる流れを対象として数値計算を行い、その妥当性を検証する。このため、低気

相空塔速度条件における小型気泡塔内気泡流を対象とした実験を行い、妥当性検証用の気相体積率分布、気泡径分布のデータを取得する。さらに、高気相空塔速度条件における大型気泡塔内気泡流を対象とした実験も行い、気相体積率分布を取得する。

二つの計算手法の関係

ANN 相関器を組み込んだ混合モデルに基づく計算手法は、未知の入力に対する予測精度を進化させることが可能である。ただし、そのためには教師データとして精度の高い実験データが必要である。しかし、工業装置レベルの現象の高精度なデータを得ることは容易ではない。CFD に基づく計算手法は、このような実行が困難な実験の代わりとなり、ANN の教師データの生成器として用いることができる。また、混合モデルに基づく計算手法では定常・一次元に平均化したモデルを用いているが、設備構造によっては、水平方向の物資・熱移動も考慮しないと、予測精度を大きく低下させる可能性がある。その場合は、例えば、水平方向の混合拡散係数も考慮する必要がある。そこで、CFD に基づく計算手法には、対象となる設備に対して、混合モデルとしてどういった平均化が妥当なのかを評価する機能をもたせることも可能である。このように、CFD に基づく計算手法は、ANN 相関器への教師データの提供、および混合モデルのモデル化レベルの評価という役割をとおして、混合モデルに基づく計算手法と結びついている。

1.4 本論文の構成

本論文は6章より構成される。以下に各章の概要をまとめる。

第1章では、本研究の背景として、気泡塔の設計、スケールアップ、操業条件最適化における課題と、多相-多成分熱流動場の予測手法に関する従来の研究とその課題について述べ、本研究の目的および方法を記した。

第2章では、定常・一次元の混合モデルに基づく計算手法を構築する。従来の実験相関式の課題を解決するために、ANN による相関器を混合モデルに組み込んだ「進化的予測手法」という新しいフレームワークを提案する。本手法によりフィッシャー・トロプシュ(Fischer-Tropsch)合成反応を対象とした計算を行い、既存の実験相関式を組

み込んだ手法と比べて遜色のない予測を与えられるか否かを検証する。また、ANNの汎化能力の検証、および学習プロセスによる進化を確認する。

第3章では、様々な気泡径をもつ非常に多数の気泡と構造物とが相互作用する複雑混相流を計算するための、CFDに基づく計算手法を構築する。従来のCFDに基づく計算手法に対してより小さな計算コストで効率的に計算できる手法として、多流体モデルと界面追跡法のハイブリッド法(N Plus 2 Field法: NP2)に埋め込み境界法を融合させた新しい計算手法のフレームワークを提案する。本手法により、まず、円柱と角柱周りの計算を行い実験値と比較し、比較的粗い計算格子を用いても、必要十分な予測精度が得られることを示す。次に、より複雑な構造物の計算を行い、先行文献と定性的に一致することを示す。最後に、本手法が固相体積率を変更するのみで計算領域を容易に変更(加工)できるという、柔軟性を有することを示す。

第4章では、第3章で構築したNP2法に埋め込み境界法を融合させた新しい計算手法を、層流-遷移流-乱流の全ての領域の流れに適用できる手法へと拡張することを目的とする。ただし、DNSやLESなどのように流れの詳細な挙動を計算するのではなく、むしろ、広い Re 数範囲の流れにおいて、計算コストの小さなモデルと必要最小限の計算格子を無駄なく使い、平均的な流速分布や、構造物からの平均的な抵抗力をできるだけ精度良く予測することを目的として手法を拡張する。本章では、幅広い Re 数範囲の実験および理論解析データが整備されているという理由から、単相流れを対象として、構築したモデルを検証する。はじめに二次元円柱周りの流れ、次に三次元球周りおよび三次元円柱周りの流れを計算し、 Re 数が1~10000の範囲において、流れのパターンとその遷移、および抗力係数とストローハル数を、これまでに報告されている実験および計算と比較する。

第5章では、前川らが検証した合体・分裂モデルをNP2法に組み込み、合体・分裂がほとんど起こらない流れを含む、構造・サイズ・気相空塔速度の異なる流れを対象として数値計算を行い、その妥当性を検証する。このため、低気相空塔速度条件における小型気泡塔内気泡流を対象とした実験を行い、妥当性検証用の気相体積率分布、気泡径分布のデータを取得する。さらに、高気相空塔速度条件における大型気泡塔内気泡流を対象とした実験も行い、気相体積率分布を取得する。

第1章 序論

第6章で、本論文の結論を述べる。

第1章の参考文献

- [1] Deckwer, W.-D., *Bubble Column Reactors*, John Wiley & Sons, Chichester, England, (1992).
- [2] Deckwer, W. D. and Schumpe, A., Improved Tools for Bubble Column Reactor Design and Scale-Up, *Chemical Engineering Science*, 48 (1993), pp. 889-911.
- [3] Nigam, K. D. P. and Schumpe, A., *Three-Phase Sparged Reactors*, GORDON AND BREACH PUBLISHERS (1996)
- [4] Rados, N., Al-Dahhan, M.H. and Dudukovic, M.P., Modeling of the Fischer-Tropsch synthesis in slurry bubble column reactors, *Catalysis Today*, 79-80 (2003), pp. 211-218.
- [5] Sehabiague, L., Lemoine, R., Behkish, A., Heintz, Y. J., Sanoja, M., Oukaci, R., Morsi, B. I., Modeling and optimization of a large-scale slurry bubble column reactor for producing 10,000 bbl-day of Fischer-Tropsch liquid hydrocarbons, *Journal of the Chinese Institute of Chemical Engineers*, 39 (2008), pp. 169-179.
- [6] 川瀬義矩, 清水一弘, 気泡塔設計の現状と課題, *化学工学*, 第62巻, 第4号 (1998), pp. 182-185.
- [7] Deckwer, W. D., Louisi, Y., Zaidi, A. and Ralek, M., Hydrodynamic Properties of the Fischer-Tropsch Slurry Process, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol. 19 (1980), pp.699-708.
- [8] Chen, R. C., Reese, J. and Fan, L.-S., Flow Structure in a Three Dimensional Bubble Column and Three-Phase Fluidized Bed, *Fluid Mechanics and Transport Phenomena*, Vol. 40, No. 7 (1994), pp.1093-1104.
- [9] Hikita, H., Asai, S., Tanigawa, K., Segawa, K., Kitao, M., Gas hold-up in bubble columns, *Chem. Eng. J.* 20. (1980), pp. 59-67.
- [10] Wilkinson, P. M., Spek, A. P. and van Dierendonck, L. L., Design Parameters Estimation for Scale-Up of High-Pressure Bubble Columns, *AIChE Journal* 38. (1992), pp. 544-554.
- [11] 上山惟一, 気泡塔・三相流動層実用ハンドブック, アイピーシー, (1993).
- [12] Deckwer, W. and Serpemen, Y., Modeling the Fischer-Tropsch Synthesis in the Slurry Phase, *Ind. Eng. Chem. Process, Des. Dev.* 21 (1982), pp. 231-241.
- [13] Maretto, C. and Krishna, R., Modelling of a bubble column slurry reactor for

- Fischer-Tropsch synthesis, *Catalysis Today* 52 (1999), pp. 279-289.
- [14] van der Laan, G. P., Beenackers, A. A.C.M., Krishna, R., Multicomponent reaction engineering model for Fe-catalyzed Fischer-Tropsch synthesis in commercial scale slurry bubble column reactors, *Chemical Engineering Science* 54 (1999), pp. 5013-5019.
- [15] Rados, N., Al-Dahhan, M. H., Dudukovic, M. P., Modeling of the Fischer-Tropsch synthesis in slurry bubble column reactors, *Catalysis Today* 79-80 (2003), pp. 211-218.
- [16] Behkish, A., Lemoine, R., Oukaci, R., Morsi, B. I., Novel correlations for gas holdup in large-scale slurry bubble column reactors operating under elevated pressures and temperatures, *Chemical Engineering Journal* 115 (2006), pp. 157-171.
- [17] Troshko, A. A., Zdravistch, F., CFD modeling of slurry bubble column reactors for Fisher-Tropsch synthesis, *Chemical Engineering Science*, 64 (2009), pp 892- 903.
- [18] 島田直樹, 富山明男, 前川宗則, 鈴田哲也, 尾崎達也, 化学反応・ガス吸収・熱輸送を伴う気泡塔内気泡流の数値解法, *化学工学論文集* 第31巻第6号 (2005), pp. 377-387.
- [19] 梶島岳夫, *乱流の数値シミュレーション*, 養賢堂 (1999)
- [20] Maekawa, M., Sou, A., Hosokawa, S., Tomiyama, A., Effects of Inlet Bubble Diameter on Bubbly Flow in a Bubble Column under High Gas Volume Flux Condition, *Transaction of Japanese Society of Mechanical Engineering, Series B*, Vol. 74, No. 742, (2008), pp. 1368-1375.
- [21] 前川宗則, 気泡塔内多分散気泡流の流動特性と数値予測モデルに関する研究, *神戸大学大学院自然科学研究科博士論文*, (2008)
- [22] Luo, H., Svendsen, H. F., Theoretical Model for Drop and Bubble Breakup in Turbulent Dispersions, *AIChE Journal*, Vol. 42, No. 5, (1996), pp. 1225-1233.
- [23] 熊沢逸夫, *学習とニューラルネットワーク*, 森北出版(1998)
- [24] Beale, R. and Jackson, T., *Neural Computing*, IOP Publishing Ltd (1990).
- [25] 平野廣美, *C++とJavaでつくるニューラルネットワーク*, パーソナルメディア (2008).
- [26] Tomiyama, A., Shimada N., (N+2)-Field Modeling for Bubbly Flow Simulation, *Computational Fluid Dynamics Journal*, Vol.9, No.4 (2001), pp. 418-426.
- [27] Peskin, C.S., Numerical Analysis of Blood Flow in the Heart, *J. Comput. Phys.* 25

(1977), pp. 220-252.

- [28] Iaccarino, G., Immersed Boundary Technique for Turbulent Flow Simulations, *Appl Mech Rev*, Vol. 56, No. 3 (2003), pp. 331-347.

第2章 混合モデルと人工ニューラルネットワークの組合せによる進化型計算手法

2.1 はじめに

気泡塔の設計，スケールアップや操業最適化を目的として，気泡塔内の熱・物質移動や反応に関する研究が数多く行われてきた(例えば Deckwer [1])．それらの知見に基づいて，気泡塔設計に利用できる実用的な気泡塔内熱流動計算手法を確立することが重要課題となっている．実用的計算手法には，実機規模の計算対象を扱えること，および計算コストが小さいことが要求される．この観点では，場の方程式に平均操作を施して次元化した，混合拡散モデルや逆混合セルモデルなどの混合モデルが優れている[2-4]．混合モデルでは，気相体積率や混合拡散係数などの巨視的変数を実験相関式で与える．第1章で述べた混合モデルの適用範囲に関する課題を解決し，混合モデルの適用範囲拡張・精度向上を実現するには，巨視的変数評価に関して以下の要件を満たすことが望ましい．

- ◆ 限られた実験データに基づく実験相関式を使用しないこと．
- ◆ 実験データが拡充された際，適用性および評価精度を容易に向上できること．

本章では，上記要件を満たす気泡塔内熱流動の数値予測手法として，装置構造や反応物物性などの多数の独立変数の関数である巨視的変数を，相関式なしに出力する新しい手段として人工ニューラルネットワーク(Artificial Neural Network: ANN)を利用し，これを実験相関式の役割をする相関器ととらえ，混合モデルに組み込んだ新しい手法を提案する．図2.1に本手法の概要を示す．最終的には巨視的変数に関する全ての実験相関式をANN相関器に置き換えることを目標としているが，本研究では，多数の独立変数の関数である巨視的変数の代表例である気相体積率のみをANN相関器に置き換える．本手法によりFischer-Tropsch(FT)合成反応を対象とした計算を行い，既存の実験相関式を組み込んだ手法と比べて遜色のない予測を与えられるか否かを検証する．また，本ANNの汎化能力，すなわち学習プロセスで用いた入力値以外の未知の入力に対しても良好な巨視的変数評価ができる能力，の検証，および学習プロセスによる進化を確認する．

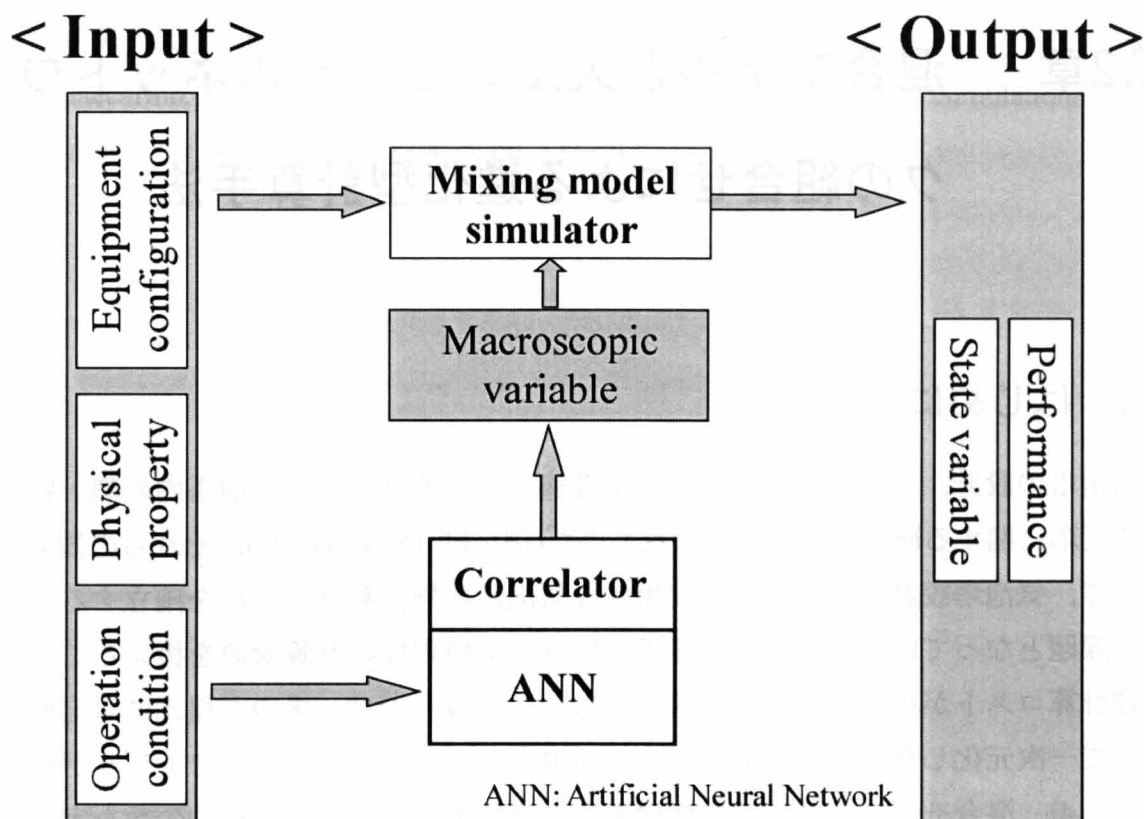


図 2.1 気泡塔シミュレータの概念図

2.2 ANN 相関器を組み込んだ混合モデルの構築

2.2.1 Fischer-Tropsch(FT)合成反応に対する混合モデル

FT 合成反応は、式(2.1)に示すように、水素と一酸化炭素よりなる合成ガスから、鉄またはコバルト系触媒を用いて、直鎖状の炭化水素を得る発熱反応である。



近年の大型 FT 合成プラントでは、充填床型反応器と比較して効率的に反応熱を除去できる気泡塔が採用されている。図 2.2 に FT 合成反応気泡塔の概要を示す。水素と一酸化炭素の合成ガスは気泡塔下部から導入され、それらはスラリー中(液相+触媒)に溶解、触媒表面で反応し、炭化水素と熱が生成する。未反応ガスは気泡塔上部から出ていく。気泡塔内部には反応熱を除去するために多数の冷却管が設けられる。近年の大

型反応器では、流れは大小様々な大きさの気泡が流動する非均質気泡流となっている。

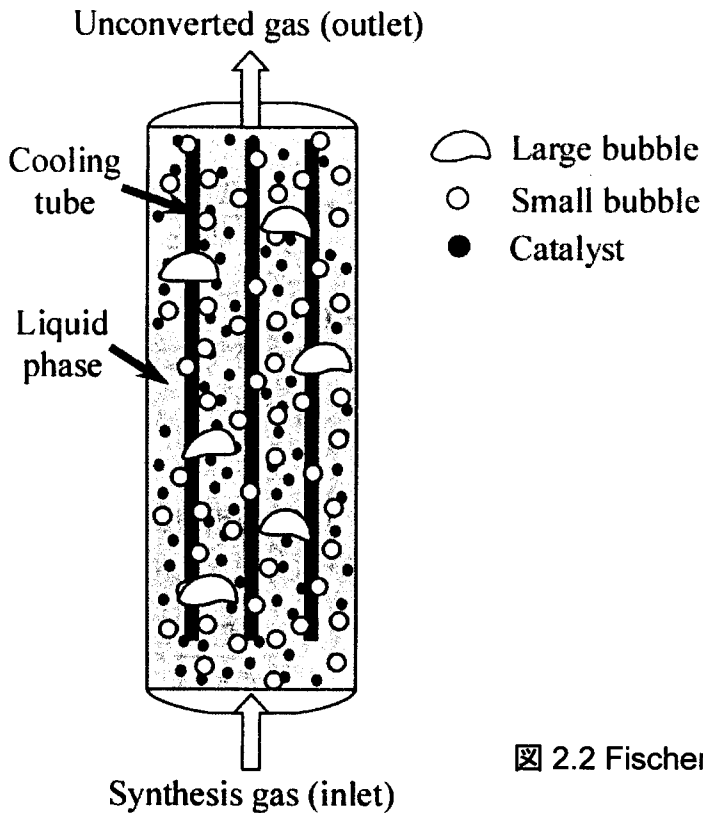


図 2.2 Fischer-Tropsch 反応器の概略図

本章では、以下の仮定、条件の下で図 2.2 の気泡塔内固気液三相流に対する混合モデルを導出した。

<仮定および条件>

- (1) 流れは定常かつ一次元的とする。
- (2) スラリー相(液相+触媒)、小気泡相、大気泡相の3相を考慮する。
- (3) 気相として考慮する化学種は水素と一酸化炭素とする。
- (4) 気相中、液相中および液相-触媒界面における化学種の移動抵抗は気液境膜の移動抵抗に対して小さいとして無視する。
- (5) 逆混合の効果は混合拡散係数によって考慮する。
- (6) 触媒分布は沈降分散モデル[6]で記述する。
- (7) 気泡塔内部の除熱管などの構造物の流れへの影響を無視する。

導出した混合モデルの基礎方程式を以下に示す。

小気泡中の化学種の保存式

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\alpha_{G, sb} E_{G, sb} \frac{\partial C_{G, sb}^i}{\partial z} \right] - \frac{\partial (U_{G, sb} C_{G, sb}^i)}{\partial z} - k^i a_{sb} \left(\frac{C_{G, sb}^i R T_{SL}}{He^i} - C_{SL}^i \right) = 0 \quad (2.2)$$

大気泡中の化学種の保存式

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\alpha_{G, lb} E_{G, lb} \frac{\partial C_{G, lb}^i}{\partial z} \right] - \frac{\partial (U_{G, lb} C_{G, lb}^i)}{\partial z} - k^i a_{lb} \left(\frac{C_{G, lb}^i R T_{SL}}{He^i} - C_{SL}^i \right) = 0 \quad (2.3)$$

スラリー中の化学種の保存式

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left[\alpha_{SL} E_{SL} \frac{\partial C_{SL}^i}{\partial z} \right] - \frac{\partial (U_{SL} C_{SL}^i)}{\partial z} + k^i a_{sb} \left(\frac{C_{G, sb}^i R T_{SL}}{He^i} - C_{SL}^i \right) \\ + k^i a_{lb} \left(\frac{C_{G, lb}^i R T_{SL}}{He^i} - C_{SL}^i \right) - \alpha_{SL} r^i = 0 \end{aligned} \quad (2.4)$$

スラリー中のエネルギーの保存式

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\rho_{SL} C_{P, SL} \alpha_{SL} E_{SL} \frac{\partial T_{SL}}{\partial z} \right] - \frac{\partial (\rho_{SL} C_{P, SL} U_{SL} T_{SL})}{\partial z} - hA(T_{SL} - T_{wall}) + \alpha_{SL} (-\Delta H_{FT}) r_{FT} = 0 \quad (2.5)$$

運動量の保存式

$$\frac{\partial P}{\partial z} + \{ \alpha_{SL} \rho_{SL} + (\alpha_{G, sb} + \alpha_{G, lb}) \rho_G \} g = 0 \quad (2.6)$$

ここで、 z は気泡塔高さ方向座標、 α は体積率、 E は混合拡散係数、 C は濃度、 R は気体定数、 U は空塔速度、 k は物質移動係数、 a は気相-液相の界面積濃度、 r^i は物質 i の消費速度、 ρ は密度、 C_P は比熱、 T は温度、 h は熱伝達係数、 A は単位スラリー体積当たりの伝熱面積、 ΔH_{FT} は FT 反応エンタルピー、 r_{FT} は FT 反応速度、 g は重力加速度、

He^i は化学種 i のヘンリー定数, P は圧力を表す. 下付添字はそれぞれ, G は気相, L は液相, S は触媒, SL はスラリー相, b は大気泡, sb は小気泡を表す. 上付添字の i は化学種の水素または一酸化炭素を表す. 沈降分散モデルによるスラリー中触媒濃度分布は次式で与えられる.

$$C_s = \overline{C_s} \frac{Bo_s \exp(-Bo_s z / L_H)}{1 - \exp(-Bo_s)} \quad (2.7)$$

ここで $\overline{C_s}$ はスラリー中の平均触媒濃度, L_H は気泡塔高さ, Bo_s は Bodenstein 数 ($Bo_s = U_s L_H / E_s$) である.

Bo_s には次式を用いる[6].

$$Bo_s = \frac{U_s L_H}{E_c} = \frac{13 Fr}{1 + 8 Fr^{0.85}} \quad (2.8)$$

ここで Fr は Froude 数であり, 次式で定義される.

$$Fr = \frac{\overline{U_G}}{\sqrt{gL_D}} \quad (2.9)$$

ここで $\overline{U_G}$ は平均気相空塔速度, L_D は気泡塔径である.

従来の混合モデルでは, 基礎方程式を閉じるために, 気相体積率, 混合拡散係数, 物質移動容量係数, 熱伝達係数, 反応係数などに実験相関式を用いるが, 本研究では, 最終的にこれらの諸量を全て ANN 相関器に置換えることを目的にしている. ただし, 本章では, その第一段階として気相体積率のみ ANN 相関器に置換える.

図 2.2 に示す気泡塔底部 ($z = 0$) および上部 ($z = L_H$) において, 表 2.1 に示す流入および流出境界条件を課す.

式(2.2)-(2.6)を差分化し, 一般縮小勾配法により解く.

表 2.1 境界条件

Inlet boundary conditions
Species i in the slurry phase: $U_{SL} C_{SL}^i - \alpha_{SL} E_{SL} \frac{\partial C_{SL}^i}{\partial z} = 0$
Species i in the small bubble phase:
$U_{G, sb} C_{G, sb}^i - \alpha_{G, sb} E_{G, sb} \frac{\partial C_{G, sb}^i}{\partial z} = U_{G, sb} C_{G, inlet}^i$
Species i in the large bubble phase:
$U_{G, lb} C_{G, lb}^i - \alpha_{G, lb} E_{G, lb} \frac{\partial C_{G, lb}^i}{\partial z} = U_{G, lb} C_{G, inlet}^i$
Energy: $U_{SL} \rho_{SL} T_{SL} - \rho_{SL} \alpha_{SL} E_{SL} \frac{\partial T_{SL}}{\partial z} = U_{SL, inlet} \rho_{SL, inlet} T_{SL, inlet}$
Outlet boundary conditions
Species i in the slurry phase: $\frac{\partial C_{SL}^i}{\partial z} = 0$
Species i in the small bubble phase: $\frac{\partial C_{G, sb}^i}{\partial z} = 0$
Species i in the large bubble phase: $\frac{\partial C_{G, lb}^i}{\partial z} = 0$
Energy: $\frac{\partial T_{SL}}{\partial z} = 0$

2.2.2 人工ニューラルネットワークによる巨視的変数評価

ANN 相関器として、図 2.3 に示すような構造をもつ ANN を用いた。ANN は入力層、出力層およびその間にある複数の隠れ層(図では一層のみ記述)からなる。各層にはいくつかの人工ニューロンユニット(以後“ニューロン”と呼ぶ)があり、それぞれのニューロンは隣の層の全てのニューロンと繋がっており、同じ層内では繋がりはない。そして情報は、図中左から右に一方向に伝わる。このような構造をフィードフォワード型多層パーセプトロン構造という。フィードフォワード型とは、一つのニューロンからの出力が、それより前の層の入力値として用いられない構造をいう。またパーセプトロンとは、一つのニューロンとそれに関する入出力回路を合わせた一固まりをいう。

図 2.3 中の黒丸で示された重み付け連結ユニットの機能は、ニューロン間の信号伝達効率の違いを付加することであり、これは結合加重係数(後述)を各ニューロンの出力値にかけることでモデル化される。各ニューロンでは、前層のニューロンの出力値に結合加重係数をかけたものが合計され、その値に伝達関数(後述)を作用させて出力値が計算され、次のニューロンに伝達される。

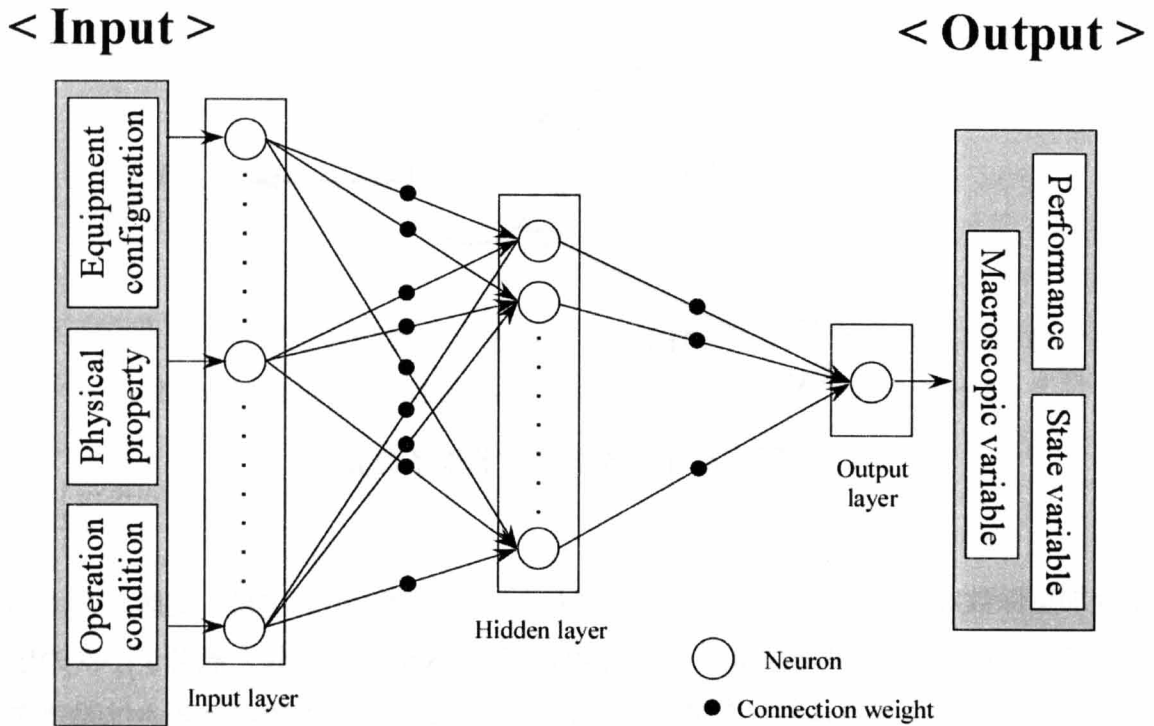


図 2.3 ニューラルネットワークモデルの概要図

図 2.4 に示す一つのパーセプトロンユニットを用いて、ニューロンの出力計算方法を説明する。前層のニューロンからの出力値 x は、結合加重係数 w をかけた後、本層のニューロンの入力値となる。ニューロン内でこの入力値が加算され、式(2.10)の重み付け総和 S が計算される。次に、総和 S から式(2.11)の伝達関数を用いて出力値 y が計算され、次層のニューロンに伝達される。本章では、伝達関数としてシグモイド関数を用いた。

$$S = \sum_{n=0}^N w_n x_n \quad (2.10)$$

$$y = \frac{1}{1 + e^{-s}} \quad (2.11)$$

ここで N は入力値の総数，図 2.4 中の θ はバイアス値を表す。

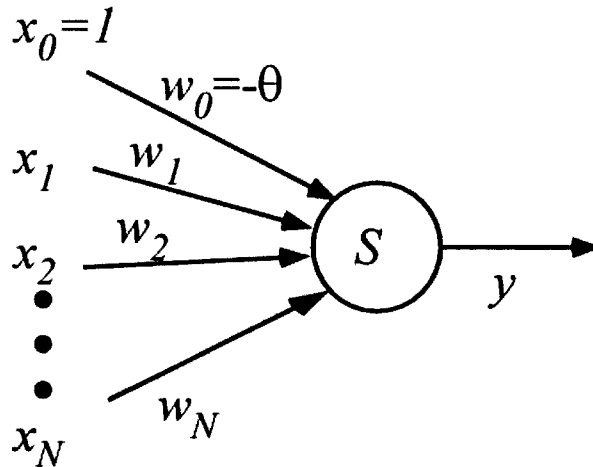


図 2.4 出力を計算する素子の動作

結合加重係数は，“学習”によって決定される。学習プロセスでは，実験などで得られた信頼性のある入出力値(教師データ)を用いて，ANN の出力値と教師データの出力値の差が小さくなるように結合加重係数が修正される。学習アルゴリズムは誤差逆伝播法を用いている。誤差逆伝播法を含む人工ニューラルネットワークの理論的な解説に関しては Beale *et al.*, [7]を参照されたい。

ANN は，入力値(装置構造，物性値，操業条件など)から，重み付け連結ユニットとニューロンを経て，最終的な出力値(反応生成物濃度，気相体積率など)が計算される非線形写像と考えられ，その写像は，ANN の構造(隠れ相の数と各相におけるニューロンの数)と結合加重係数により規定される。ANN は，連続性または二乗可積分の条件を満足するあらゆる関数を近似できる[8]。ANN の構造と結合加重係数を決めるということは，例えば，フーリエ級数における， \sin と \cos の項数と係数を決めることと等価であり，その構造と結合加重係数に対して，ANN はある特定の関数を規定する。この関数は，従来の陽的に表現された実験相関式とは見かけ上異なるが，従来の実験相関式と同じように，その現象に影響を与える特定の独立変数を物理的，化学的な観点から選別し，独立変数の関数として表現したものである。ただし，従来の実験相関式と異な

り、新しい知見の取り込みによる修正が、学習によって極めて容易になる。

本 ANN の入力変数は、気泡塔径、気泡塔高さ、入口気相空塔速度、スラリー物性、ガス物性、触媒濃度などで、巨視的変数相関器としての出力は気相体積率である。ANN 構造と結合加重係数には、気相体積率評価に最適化された値[9]を採用した。

2.2.3 実験相関式

気相空塔速度には Mills *et al.* [3]のモデルを用いる。

$$U_G = U_{G,inlet} \left(\frac{P_{inlet} T_G}{P T_{G,inlet}} \right) (1 + \varepsilon X^{CO+H_2}) \quad (2.12)$$

ここで、 X^{CO+H_2} は合成ガス転換率である。下付添字の *inlet* は気泡塔入口における値を意味する。 ε は contraction factor (Levenspiel [10])であり、次式で与えられる。

$$\varepsilon = \frac{V_G(X^{CO+H_2} = 1) - V_G(X^{CO+H_2} = 0)}{V_G(X^{CO+H_2} = 0)} \quad (2.13)$$

ここで、 $V_G(X^{CO+H_2} = 1)$ は合成ガス転換率が 1 の場合の全気相体積、 $V_G(X^{CO+H_2} = 0)$ は合成ガス転換率が 0 の場合の全気相体積である。 ε は -0.5 から -0.6 程度の値をとる (Deckwer and Serpemen [2])。 X^{CO+H_2} は水素ガス転換率 X^{H_2} により次式で表される。

$$X^{CO+H_2} = \frac{1 + UR}{1 + IR} X^{H_2} \quad (2.14)$$

ここで、 UR は水素に対する一酸化炭素の使用比率、 IR は水素に対する一酸化炭素の流入比率である。 X^{H_2} は次式で与えられる。

$$X^{H_2} = \frac{U_{G,inlet} \frac{C_{G,inlet}^{H_2}}{C_G} - U_G \frac{C_G^{H_2}}{C_G}}{U_{G,inlet} \frac{C_{G,inlet}^{H_2}}{C_G}} \quad (2.15)$$

ここで、 C_G は気相モル濃度である。

小気泡の速度 $u_{G, sb}$ には Wilkinson *et al.* [11]の式を用いる。

$$\frac{u_{G, sb} \mu_{SL}}{\sigma} = 2.25 \left(\frac{\sigma^3 \rho_{SL}}{g \mu_{SL}^4} \right)^{-0.273} \left(\frac{\rho_{SL}}{\rho_G} \right)^{0.03} \quad (2.16)$$

ここで、 μ は粘性、 σ は表面張力である。小気泡の気相体積率には de Swart *et al.* [12]の式を用いる。

$$\alpha_{G, sb} = \alpha_{trans} = 2.16 \exp(-13.1 \rho_G^{-0.1} \mu_L^{0.16} \sigma^{0.11}) \exp(-5.86 C_s) \quad (2.17)$$

ここで、 α_{trans} は、均一な気泡径の気泡流から大小様々な気泡が存在する不均一気泡流へ遷移するときの気相空塔速度における気相体積率である。また、大気泡の気相体積率 $\alpha_{G, \phi}$ は 2.2.2 で述べた方法で ANN により求めた全気相体積率 α_G と小気泡の気相体積率から次式で求める。

$$\alpha_{G, tb} = \alpha_G - \alpha_{G, sb} \quad (2.18)$$

小気泡および大気泡の気相空塔速度は各々以下の諸式で求める。

$$U_{G, sb} = \alpha_{G, sb} u_{G, sb} \quad (2.19)$$

$$U_{G, tb} = U_G - U_{G, sb} \quad (2.20)$$

スラリー相の混合拡散係数には、Baird *et al.* [13]のモデルを用いる。

$$E_{SL} = 0.35 L_D^{4/3} (g U_G)^{0.33} \quad (2.21)$$

小気泡相の混合拡散係数はスラリー相と同じとする(de Swart *et al.* [12]).

$$E_{G, sb} = E_{SL} \quad (2.22)$$

大気泡相の流れはプラグフローと仮定して、混合拡散係数をゼロとする。

$$E_{G,lb} = 0 \quad \text{m}^2/\text{s} \quad (2.23)$$

スラリーと冷却管との間の熱伝達係数には次式を用いる(Cho *et al.*, [14]).

$$h = 680 U_G^{0.445} \mu_{SL}^{-0.06} P^{0.176} \quad (2.24)$$

物質移動容量係数には, Maretto *et al.* [15]のモデルを用いる。

$$k^i a_{lb} = 0.5 \varepsilon_{G,lb} \sqrt{\frac{D_{SL}^i}{D_{ref}}} \quad (2.25)$$

$$k^i a_{sb} = 1.0 \varepsilon_{G,sb} \sqrt{\frac{D_{SL}^i}{D_{ref}}} \quad (2.26)$$

拡散係数 D の値は各々 $D_{ref} = 2 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, $D_{SL}^{H_2} = 17.2 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, $D_{SL}^{CO} = 45.5 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ である。

ヘンリー定数 He には Soriano [16]のモデルを用いる。

$$He = H_0 e^{[A(1/T_{SL})^2 + B(1/T_{SL})]} \quad (2.27)$$

式中の定数 A, B, H_0 は, 水素については $A = -1.929 \times 10^5 \text{ K}^2$, $B = 1345 \text{ K}$, $H_0 = 4.218 \times 10^3 \text{ Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$, 一酸化炭素については $A = -3.651 \times 10^5 \text{ K}^2$, $B = 1873 \text{ K}$, $H_0 = 2.287 \times 10^3 \text{ Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$ である。

スラリーの物性値は以下の諸式で与える(Deckwer and Serpemen [2]).

$$\mu_{SL} = \mu_L (1 + 4.5 \alpha_s) \quad (2.28)$$

$$\rho_{SL} = \alpha_S \rho_S + (1 - \alpha_S) \rho_L \quad (2.29)$$

$$C_{P,SL} = \alpha_S C_{P,S} + (1 - \alpha_S) C_{P,L} \quad (2.30)$$

FT 反応率 r_{FT} には、コバルト系触媒を用いる FT 合成反応用の Langmuir-Hinshelwood タイプのモデル(Yates and Satterfield [17])を用いる。

$$r_{FT} = k_{FT} \frac{He^{H_2} C_{SL}^{H_2} He^{CO} C_{SL}^{CO}}{(1 + a_1 He^{CO} C_{SL}^{CO})^2} \quad (2.31)$$

ここで、係数 k_{FT} および CO の吸着係数 a_1 は各々以下の諸式で与えられる。

$$k_{FT} = A_1 e^{(-E_1/RT_{SL})} \quad (2.32)$$

$$a_1 = A_2 e^{(-E_2/RT_{SL})} \quad (2.33)$$

ここで、 $A_1 = 8.037 \times 10^9 \text{ mol}/(\text{kg}_{\text{catalyst}} \cdot \text{Pa}^2 \cdot \text{s})$, $E_1 = 37369 \text{ J/mol}$, $A_2 = 1.243 \times 10^{-12} \text{ 1/Pa}$, $E_2 = -68478 \text{ J/mol}$ である。CO の消費速度 r^{CO} は次式で与えられる。

$$r^{CO} = C_S r_{FT} \quad (2.34)$$

2.3 ANN 関連器および混合モデルの性能検証

2.3.1 気相体積率予測精度の検証

ANN の気相体積率予測性能を検証するために、常温、常圧の水 - 空気系の気泡塔において実験データを取得した。図 2.5 に実験装置の概要を示す。気泡塔は直径 0.58 m、高さ 3.0 m の円筒形アクリル製容器で、装置底部の散気板より気相を流入させた。気相流入前の初期水位は 1.9 m とした。気相空塔速度 U_G が 0.080, 0.12, 0.16 m/s の 3 条件で実験を行った。気相体積率は液位の上昇値から求めた。ANN の入力値を表 2.2 に示す。2.2.2 で述べたように、ANN 構造と結合加重係数には、気相体積率評価に最適化された値[9]を採用した。図 2.6 に気相体積率の測定値と ANN による予測値の比較を示す。気

相体積率の気相空塔速度依存性を良好に評価できている。同図中に Wilkinson *et al.* [11] と Hikita *et al.* [18]の相関式による予測値を併せて示す。これらの相関式は、各々、塔径は 0.158, 0.10 m, ガス種は空気、窒素の実験結果に基づいて構築されている。相関式による評価値は ANN に比べて誤差が大きく、相関式の構築に使用された実験データの範囲外で相関式を利用すると大幅に精度が低下することがわかる。

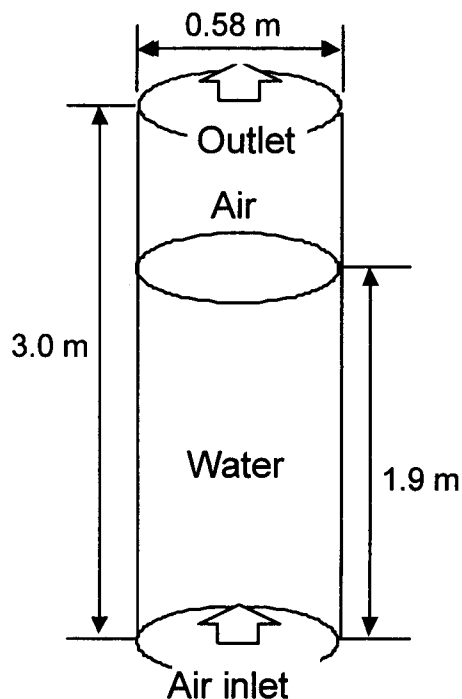


図 2.5 実験装置の概略図

表 2.2 ANN 相関器による気相体積率計算に用いた値

Column geometry	Column diameter	0.58	m
Sparger	Open area ratio	10	%
Operation condition	Pressure	0.1	MPa
	Temperature	293	K
Liquid phase (Water)	Density	997	kg/m ³
	Viscosity	9.2×10^{-4}	Pa·s
	Surface tension	0.072	N/m
	Molecular weight	18	kg/kmol
Gas phase (Air)	Density	1.2	kg/m ³
	Molecular weight	28.8	kg/kmol

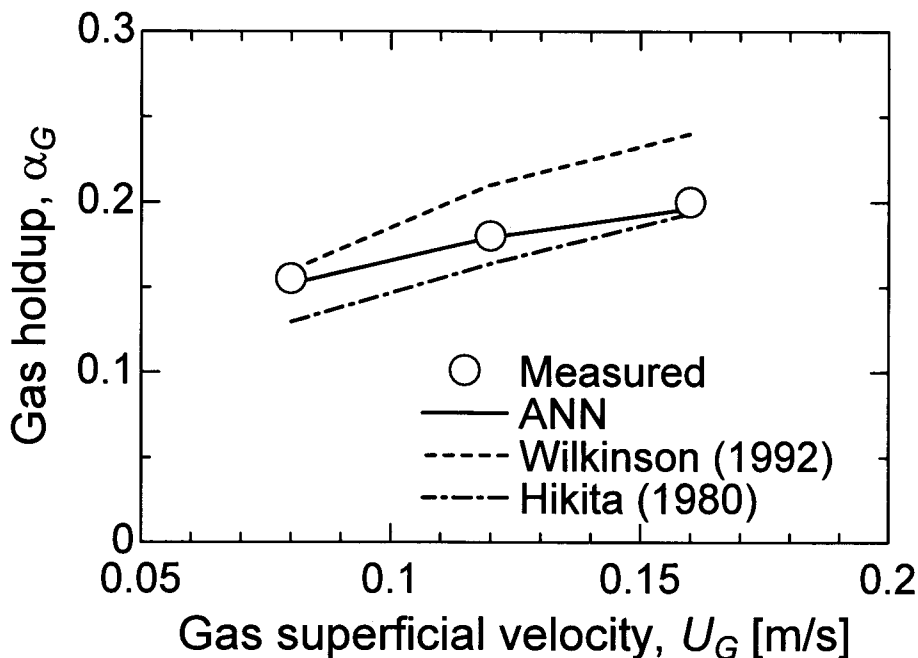


図 2.6 気相体積率の測定値と計算値の比較

2.3.2 CO 転換率の各種パラメータ依存性

気相体積率評価に実験相関式を用いた混合モデルによって、これまでに得られている CO 転換率の各種パラメータ依存性を提案手法でも同様に予測できるか否かを検証する。これまでに報告されている CO 転換率の各種パラメータ依存性を以下に整理する。

- 1) CO 転換率は塔径の増加に伴いわずかに減少する(Sehabiague *et al.*, [19]).
- 2) CO 転換率は塔高の増加に伴って増加する。例えば、塔高を 30 m から 50 m にすると、50 %程度増加する(Sehabiague *et al.*, [19]).
- 3) 気相空塔速度が増加すると CO 転換率は減少する(Maretto *et al.*, [15]).
- 4) 触媒濃度の増加とともに CO 転換率は増大する。触媒濃度が大きいところでは増加率が減少し、ある程度以上の触媒濃度になると増加率がほぼゼロになる。増加率が減少し始める触媒濃度は、気相空塔速度に依存しており、気相空塔速度の増加に伴い高濃度になる(Sehabiague *et al.* [19], Inga and Morsi [20]).

まず、CO 転換率の気泡塔高さや塔径依存性を本手法により調べた。気相空塔速度を 0.30 m/s、触媒濃度を 35 wt%とし、塔径を 3.0, 4.0, 5.0 m、塔高を 30, 40, 50 m と変化させた。その他の計算条件は表 2.3 に示す。計算結果を図 2.7 に示す。得られた結果は上記 1), 2)の CO 転換率特性と一致しており、本手法により CO 転換率の気泡塔高さ依存

性と塔径依存性を定性的に妥当に予測できることが確認できた。

表 2.3 CO 転換率に対する塔高および塔径の影響を調べる計算に用いた値

Column geometry	Column diameter	3, 4, 5	m
	Column height	30, 40, 50	m
Sparger	Open area ratio	10	%
Operation condition	Pressure	3	MPa
	Temperature	503	K
Liquid phase (Wax)	Density	700	kg/m ³
	Viscosity	4.2 x 10 ⁻³	Pa·s
	Surface tension	0.0175	N/m
	Molecular weight	567	kg/kmol
Gas phase (H ₂ : CO = 2 : 1)	Density	7.5	kg/m ³
	Molecular weight	10.7	kg/kmol

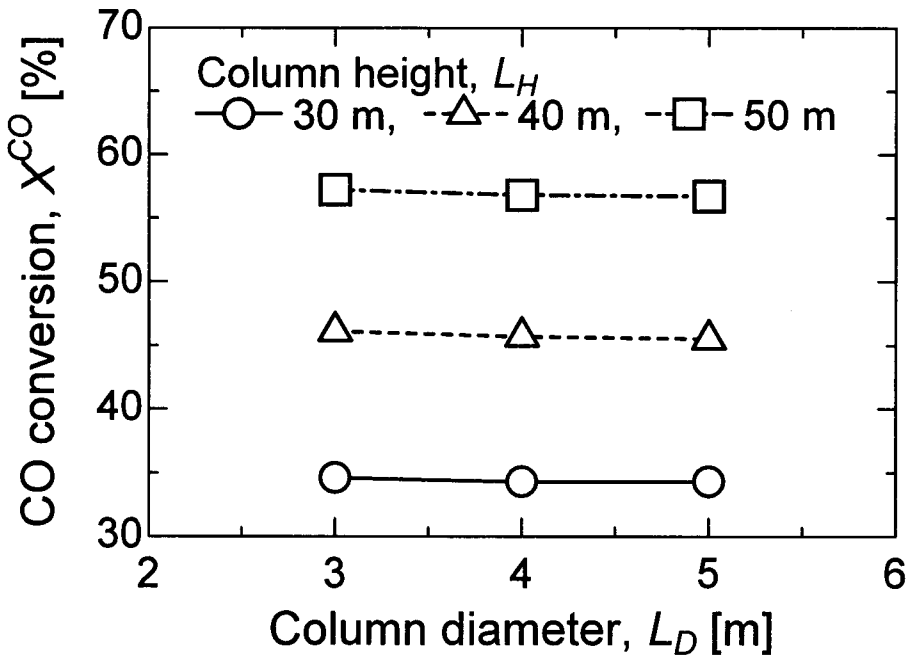


図 2.7 CO 転換率に対する塔高および塔径の影響 ($U_G = 0.30$ m/s, $C_S = 35$ wt%)

次に、CO 転換率の気相空塔速度依存性と触媒濃度依存性を調べた。気泡塔高さを 30 m、塔径を 5.0 m とし、気相空塔速度を 0.20, 0.25, 0.30 m/s, 触媒濃度を 20 から 50 wt% と変化させた。他の条件は表 2.3 と同じとした。計算結果を図 2.8 に示す。本結果は上記 3), 4)と同様の傾向を示しており、本手法は、CO 転換率の気相空塔速度および触媒濃度依存性に関して、従来の実験相関式を用いたモデルと定性的に一致する予測を与えている。

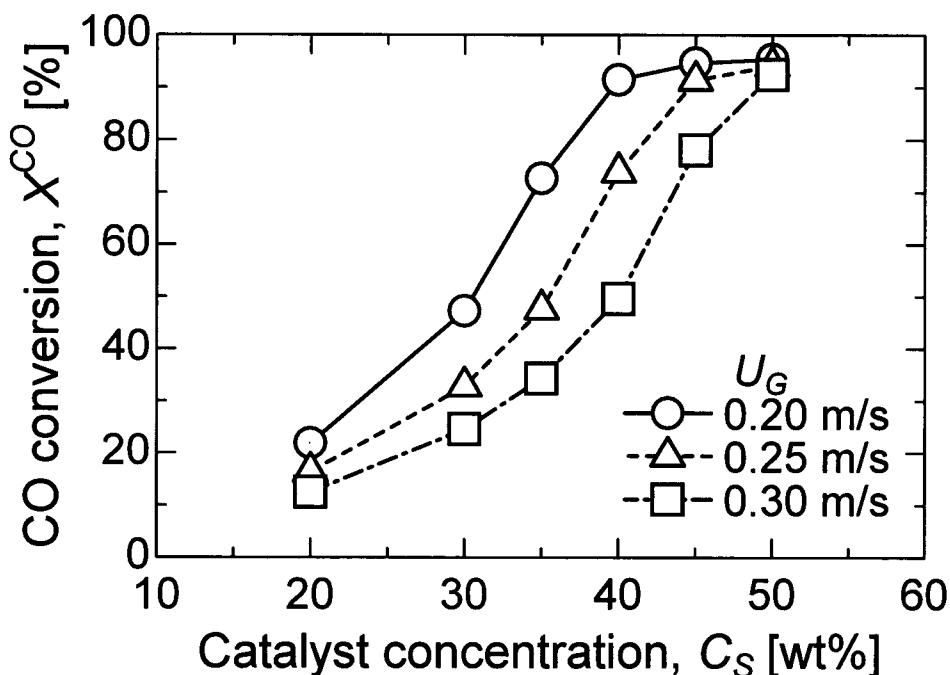


図 2.8 CO 転換率に対する気相空塔速度および触媒濃度の影響
($L_H = 30$ m, $L_R = 5$ m)

2.3.3 ANN の汎化能力と学習機能の検証

これまでは ANN を混合モデル中の気相体積率を与える相関器として用いたが、ここでは FT 合成反応のシミュレータ自体を ANN で構築することにより、その汎化能力を検証するとともに、学習により予測精度が向上することを確認する。そのために、2.2 節の混合モデルによる計算結果(入出力値)を教師データと検証データとして ANN に学習させ、CO 転換率を直接出力できるようにした。ANN 構造は入力層、隠れ層 1、隠れ層 2、出力層からなり、それぞれにおけるニューロン数は 4, 8, 6, 1 である。入力パラ

メータは気相空塔速度($0.2 < U_G < 0.3$ m/s), 塔径($3 < L_D < 5$ m), 塔高($30 < L_H < 50$ m), 触媒濃度($20 < C_S < 50$ wt%)とした。

混合モデルの計算結果から得た入出力データセットは27点である。27点のデータには、6種類の C_S のデータが含まれている。このデータセットから教師データとして9点選んでANNに学習させた。一種類($C_S = 35$ wt%)の触媒濃度のデータのみを教師データとして学習させた場合(Case A)の結果を図2.9に示す。 $C_S = 35$ wt%だけでなく、他の触媒濃度に対しても良好にCO転換率を予測できている、すなわち本ANNは汎化能力を有していることが確認できた。

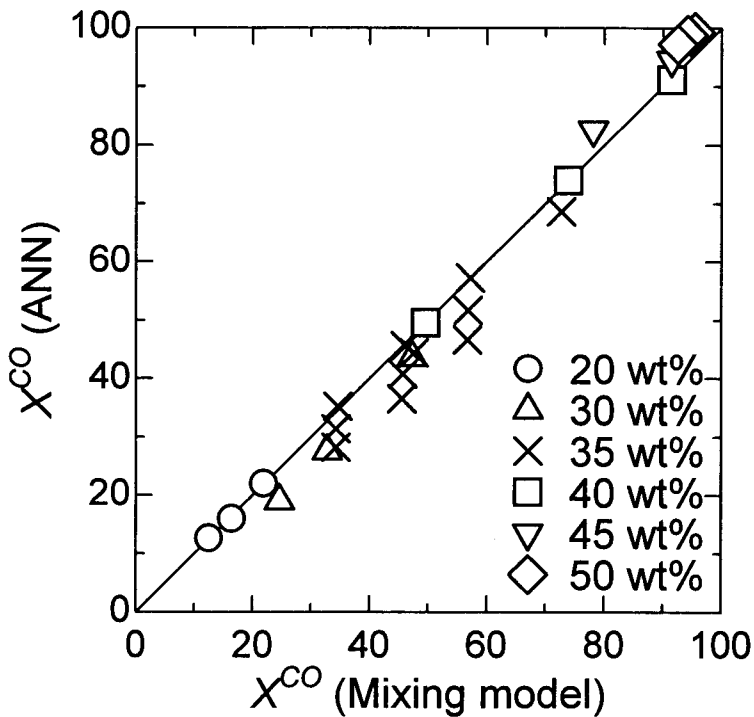


図2.9 混合モデルと人工ニューラルネットワークにより計算したCO転換率の比較 (Case A)

次に、3種の触媒濃度($C_S = 20, 30, 35$ wt%)の教師データにより学習させた場合(Case B)の結果を図2.10に示す。1種類の C_S のみで学習した場合に比べて予測精度が向上している。Case A と Case B の予測精度の差は、教師データの違いが原因であると考えられる。ANNは、未知のデータの内挿予測精度は高いが、外挿予測精度は比較的低いといわれている[7]。従って、より広い範囲の教師データを用いたCase Bの予測精度の方が高く

なつたと考えられる。

以上、ANN を用いれば、予測精度の高い相関器を容易に構築できること、実験データを追加した再学習を通してより高精度な相関器に進化することを確認した。

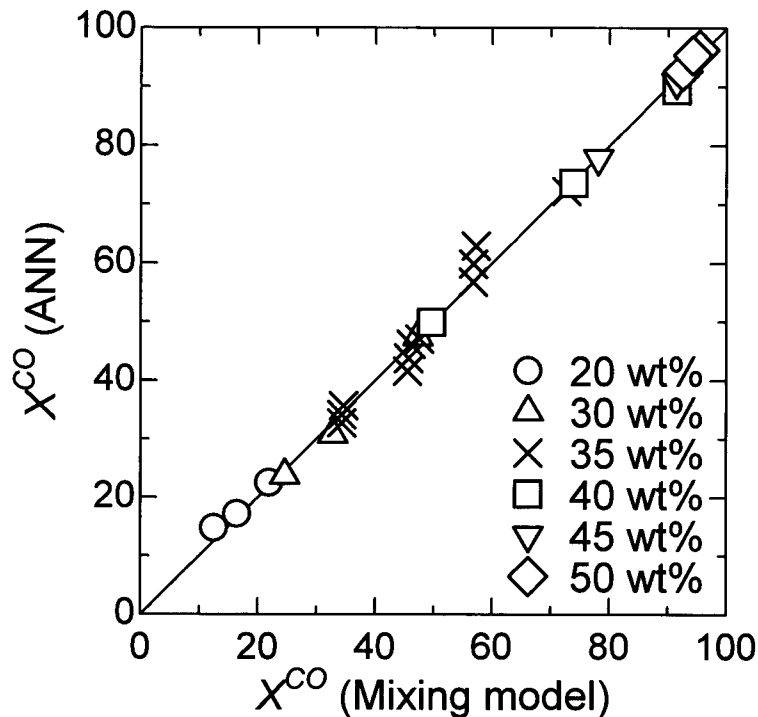


図 2.10 混合モデルと人工ニューラルネットワークにより計算した CO 転換率の比較(Case B)

2.4 第2章のまとめ

実用的な気泡塔設計用計算手法には、実機規模の計算対象を扱え、かつ計算コストが低い混合モデルが適している。しかしながら、従来の混合モデルでは、気相体積率などの巨視的変数を、限られた実験データに基づく実験相関式を用いて評価するため、手法の適用範囲および予測精度に課題がある。また、実験データの整備が進められた際、実験相関式の適用性と精度を向上させるには、必然的に相関式の再構築が必要になるが容易ではない。そこで本章では、装置構造や反応物物性などの多数の独立変数の関数である巨視的変数を、相関式なしに出力する新しい手段として ANN を利用し、これを実験相関式の役割をする相関器(ANN 相関器)ととらえ、混合モデルに組み込んだ新しい手法を構築した。まず、ANN の予測精度検証用実験データを取得するために、

第2章 混合モデルと人工ニューラルネットワークの組合せによる進化型計算手法

水 - 空気系気泡塔の気相体積率を測定した。次に、ANN と混合モデルを組み合わせた本手法の有効性を検証するために、FT 合成反応を対象として CO 転換率の数値予測を実施した。その結果、ANN 相関器により水 - 空気系気泡塔の気相体積率を良好に予測できること、ANN 相関器を組み込んだ混合モデルにより FT 合成反応における一酸化炭素転換率の各種パラメータ依存性を良好に予測できること、および ANN によれば新たなデータを用いた再学習により手法の適用範囲の拡大や予測精度向上を容易に達成できることを確認した。

以上より、従来の実験相関式を用いた手法が有する“限定された適用範囲とその範囲拡大の困難さ”という課題を解決した気泡塔設計用進化型計算手法の一つの雛型を開発できた。

第2章の参考文献

- [1] Deckwer, W.-D., *Bubble Column Reactors*, John Wiley & Sons, Chichester, England, (1992).
- [2] Deckwer, W. and Serpemen, Y., Modeling the Fischer-Tropsch Synthesis in the Slurry Phase, *Ind. Eng. Chem. Process, Des. Dev.*, 21 (1982), pp. 231-241.
- [3] Mills, P. J., Turner, J. R., Ramanchandran, P. A. and Dudukovic, M. P., The Fischer-Tropsch Synthesis in Slurry Bubble Column Reactors: Analysis of Reactor Performance Using the Axial Dispersion Model, *Three-Phase Sparged Reactors*, Chapter 5, GORDON AND BREACH PUBLISHERS (1996).
- [4] Schlüter, S., Steiff, A. and Weinspach, P.-M., Modeling and simulation of bubble column reactors, *Chemical Engineering and Processing* 31. (1992), pp. 91-117.
- [5] Behkish, A., Lemoine, R., Oukaci, R. and Morsi, B. I., Novel correlations for gas holdup in large-scale slurry bubble column reactors operating under elevated pressures and temperatures, *Chemical Engineering Journal* 115. (2006), pp. 157-171.
- [6] Kato, Y., Nishiwaki, A., Fukuda, T. and Tanaka, S., The Behavior of Suspended Solid Particles and Liquid in Bubble Columns, *J. Chem. Eng. Jpn.* 5. 112 (1972).
- [7] Beale, R. and Jackson, T., *Neural Computing*, IOP Publishing Ltd (1990).
- [8] 熊沢逸夫, *学習とニューラルネットワーク*, 森北出版(1998)
- [9] Behkish, A., Lemoine, R., Sehabiague, L., Oukaci, R. and Morsi, B. I., Prediction of the Gas Holdup in Industrial-Scale Bubble Columns and Slurry Bubble Column Reactors Using Back-Propagation Neural Networks, *INTERNATIONAL JOURNAL OF CHEMICAL REACTOR ENGINEERING* 3 (A53) (2005).
- [10] Levenspiel, O., *Chemical Reaction Engineering*, Wiley, New York (1972).
- [11] Wilkinson, P. M., Spek, A. P. and van Dierendonck, L. L., Design Parameters Estimation for Scale-Up of High-Pressure Bubble Columns, *AIChE Journal* 38. (1992), pp. 544-554.
- [12] de Swart, J.W.A., Krishna, R., Simulation of the transient and steady state behaviour of a bubble column slurry reactor for Fischer-Tropsch synthesis, *Chemical Engineering and Processing* 41. (2002), pp. 35-47.
- [13] Baird, M. H. I. and Rice, R. G., Axial Dispersion in Large Unbaffled Columns, *Chem. Eng. J.* 9(2). (1975), pp. 171-174.

- [14] Cho, Y. J., Wooa, K. J., Kang, Y., Kim, S. D., Dynamic Characteristics of Heat Transfer Coefficient in Pressurized Bubble Columns with Viscous Liquid Medium, *Chemical Engineering and Processing* 41. (2002), pp. 699-706.
- [15] Maretto, C. and Krishna, R., Modelling of a bubble column slurry reactor for Fischer-Tropsch synthesis, *Catalysis Today* 52. (1999), pp. 279-289.
- [16] Soriano, J. P., Mass Transfer Characteristics in an Agitated Slurry Reactor Operating Under Fischer-Tropsch Conditions, M.S. Thesis, University of Pittsburgh, Pittsburgh, U.S.A. (2005).
- [17] Yates, I. C. and Satterfield, C. N., Intrinsic kinetics of the Fischer-Tropsch synthesis on a cobalt catalyst, *Energy & Fuels* 5. (1991), pp. 168-173.
- [18] Hikita, H., Asai, S., Tanigawa, K., Segawa, K., Kitao, M., Gas hold-up in bubble columns, *Chem. Eng. J.* 20. (1980), pp. 59-67.
- [19] Sehabiague, L., Lemoine, R., Behkish, A., Heintz, Y. J., Sanoja, M., Oukaci, R., Morsi, B. I., Modeling and optimization of a large-scale slurry bubble column reactor for producing 10,000 bbl-day of Fischer-Tropsch liquid hydrocarbons, *Journal of the Chinese Institute of Chemical Engineers* 39. (2008), pp. 169-179.
- [20] Inga, J. R. and Morsi, B. I., A Novel Approach for the Assessment of the Rate-Limiting Step in Fischer-Tropsch Slurry Process, *Energy & Fuels* 10. (1996), pp. 566-572.

第3章 埋め込み境界法による複雑構造物内気泡流計算手法

3.1 はじめに

ANN を相関器として用いることにより、実験データベースの拡充に応じて、混合モデルの予測精度を向上できる。しかし、さらに、混合モデルに基づく計算手法には以下の課題が考えられる。

ANN の教師データとして用いるデータベースの効率的な拡充

ANN 相関器を組み込んだ混合モデルに基づく計算手法の予測精度は進化できる。ただし、ANN は未知のデータの内挿予測精度は高いが、外挿予測精度は比較的低いといわれている[1]。これは、教師データに用いられた独立変数以外の変数に依存するデータや、用いられた変数の範囲外のデータが入力された場合、実際には出力が急激な変化をする場合でも、今までのデータのパターンを外挿して予測するため、変化を小さく見積もる恐れがあるということを意味する。実験で工業装置レベルの現象の高精度なデータを蓄積し、それを教師データとして使用すれば一番良いが、そのような実験は容易ではない。

混合モデルで設定した仮定および条件の限界

現実の流れは非定常・三次元的である。本研究では定常・一次元の混合モデルを用いているが、設備構造によっては、水平方向の物質・熱移動も考慮しないと、予測精度が大きく低下する可能性がある。その場合は、例えば、水平方向の混合拡散係数も考慮する必要がある。また、装置内の偏流や滞留域、局所的な過反応が装置全体の平均的な現象に大きな影響を及ぼす場合がある。これらのように、全く新しい装置構造を検討する場合や、局所的な現象が重要となる場合は、混合モデルの平均化のレベルを変える必要がある。

以上の課題に対して、外挿予測精度の高い計算結果を用いて ANN の学習ができれば、

第3章 埋め込み境界法による複雑構造物内気泡流計算手法

混合モデルの外挿予測精度も高められる。外挿予測精度の高い計算手法の十分条件は明確ではないが、その必要条件の一つは、より微視的な物理変数でモデル化された計算手法であると考えられる。すなわち、CFDに基づく計算手法に、外挿予測精度の高い教師データ生成器としての役割をもたせられると考える。信頼性の高い実験で検証されたCFDに基づく計算手法は、その実験が小型の実験室レベルの装置の実験であっても、未知の装置内の流動の予測精度が高いことが期待できる。また、CFDに基づく詳細な計算結果は、混合モデルの平均化レベルの評価・検証にも利用できる。

以上より、混合モデルに基づく計算手法とともに、CFDに基づく計算手法による計算を並行して行うことで、装置設計がより効率的になると考える。本章以降は、このCFDに基づく計算手法の実用性の向上を図る。

工業設備に多く見られる混相流は、それ自身が複雑であるのみでなく、流れと装置内部の構造物との相互作用により、極めて複雑なものとなっている。本章では、大規模工業設備内の構造物と相互作用する気液混相流を予測するための、CFDによる実用的な計算手法のフレームワーク構築を目的とする。

実用的な手法は次の機能を有する必要があると考える。

- ◆ 複雑な格子の生成をしなくても幾何学的に複雑な構造を取り扱えること。
- ◆ 非常に多くの格子を用いることなく複雑な大規模工業設備内の流れを計算できることである。

本章では、これらの課題を解決するために、富山と島田が提案した多流体モデルと界面追跡法を融合したハイブリッド法[2]に、さらに埋め込み境界法を融合した手法を構築する。多流体モデルと界面追跡法を融合したハイブリッド法は、様々なスケールと相を含む混相流を扱える。一方、埋め込み境界法は、固体内部も含めて固定・等間隔・直交格子を用いて計算領域を分割し、複雑な幾何形状の流れを計算できる。そのため、境界適合格子のような面倒な格子生成が必要なく、固体部分が移動する場合でも、格子を作り直す必要がない。ただし、固体領域と流体領域を同じ方程式で解くため、固体が存在する格子では、方程式に強制項(外力項)を加えることで流れを制動し、固体を模擬する。この強制項の計算は、固体と流体の共存領域、すなわち固体表面が格子面と一致しない格子では複雑な計算を必要とし、様々なモデルが提案されている[3]。

埋め込み境界法の課題の一つは、粗い格子を用いた場合の、固体 - 流体共存領域における高精度、低コストの強制項の計算モデルを構築することである。もう一つは、

層流から乱流まで全ての流れに対して適用可能な、固体表面に形成される速度境界層の影響を組み込んだモデルの開発である。本章では、多流体モデルと界面追跡法を融合したハイブリッド法と整合性があり、かつ様々な計算精度の強制項モデルを組み込み可能な自由度の高い埋め込み境界法を構築する。なお、強制項モデルに関しては、本章では簡単なモデルを扱い、境界層の影響を組み込んだより高精度のモデルは第4章で検討する。

はじめに計算手法を説明する。次に、構築した計算手法の能力検証として円柱と角柱周りの計算を行い、実験結果と比較する。次に、より複雑な構造物周りの流れを計算し、様々な形状に対する本手法の適用性を検証する。

3.2 計算手法

3.2.1 場の方程式

図 3.1 に示すような、連続液相 L 、連続気相 G および様々な大きさの気泡からなる流れ場を考える。連続液相および連続気相には一流体近似を適用する。気泡は大きさによって N 種類の分散相グループ m ($1 \leq m \leq N$) に分類する。

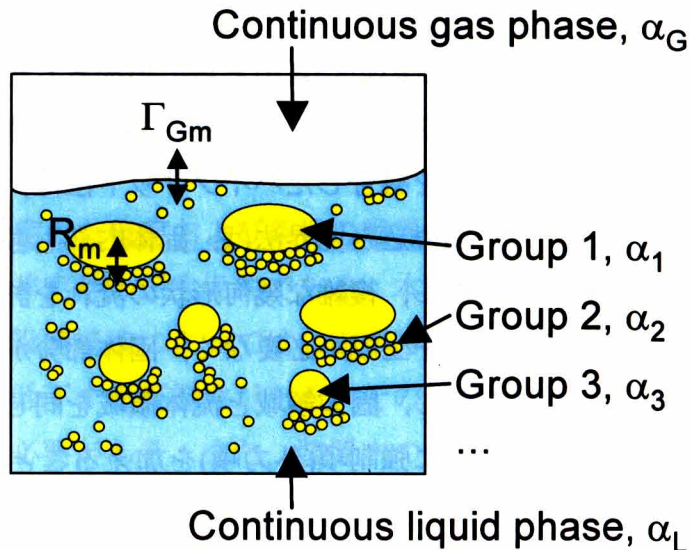


図 3.1 連続液相、連続気相および様々な大きさの気泡が混在する流れ

第3章 埋め込み境界法による複雑構造物内気泡流計算手法

このような場において、各相の体積率 $\alpha_L, \alpha_G, \alpha_m$ は次式を満たす。

$$\alpha_G + \alpha_L + \sum_{m=1}^N \alpha_m = 1 \quad (3.1)$$

本章では、気液両相とも非圧縮性ニュートン流体と仮定する。また、相変化と、気泡内部における粘性応力と乱流拡散は無視する。本仮定より、各相の質量保存式は以下のように表わせる。

$$\frac{\partial \alpha_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_m \mathbf{u}_m) = -\Gamma_{Gm} + R_m \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \alpha_G}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_G \mathbf{u}_c) = \sum_{m=1}^N \Gamma_{Gm} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \alpha_L}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_L \mathbf{u}_c) = 0 \quad (3.4)$$

ここで、 t は時間、 \mathbf{u}_m は分散相の速度、 \mathbf{u}_c は一流体近似された連続相混合体の速度、 Γ_{Gm} は気泡グループ m から連続気相への体積輸送、 R_m は気泡の合体・分裂によるグループ m への正味の体積率輸送である。分散相 m および連続相混合体の運動量保存式には次式を用いる。

$$\frac{\partial (\alpha_m \rho_m \mathbf{u}_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_m \rho_m \mathbf{u}_m \mathbf{u}_m) = -\alpha_m \nabla P + \alpha_m \rho_m \mathbf{g} - (\mathbf{M}_{Lm} + \rho_m \mathbf{u}_m \Gamma_{Gm} + \mathbf{M}_{Rm}) \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial (\alpha_c \rho_c \mathbf{u}_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c \rho_c \mathbf{u}_c \mathbf{u}_c) = -\alpha_c \nabla P + \mathbf{F}_v + \alpha_c \rho_c \mathbf{g} + \mathbf{F}_s + \sum_{m=1}^N (\mathbf{M}_{Lm} + \rho_m \mathbf{u}_m \Gamma_{Gm}) \quad (3.6)$$

ここで、 ρ は密度、 P は圧力、 \mathbf{g} は重力加速度、 \mathbf{M}_{Lm} は気泡グループ m の分散相と連続液相間の相間運動量輸送、 \mathbf{M}_{Rm} は合体・分裂による正味の体積率輸送に伴う運動量輸

送, α_c は連続相混合体の体積率($\alpha_c = \alpha_L + \alpha_G$), F_v は粘性力, F_s は表面張力である. 連続相混合体の密度 ρ_c は次式で与えられる.

$$\rho_c = (\rho_L \alpha_L + \rho_G \alpha_G) / \alpha_c \quad (3.7)$$

粘性力 F_v , 表面張力 F_s には次式を用いる.

$$F_v = \nabla \cdot \left\{ \frac{\alpha_c^2}{\alpha_G / \mu_G + \alpha_L / \mu_{eL}} [\nabla \mathbf{u}_c + (\nabla \mathbf{u}_c)^T] \right\} \quad (3.8)$$

$$F_s = \alpha_L \sigma \kappa \delta_s \mathbf{n}_s \quad (3.9)$$

ここで, μ_{eL} は連続液相の実効粘性係数, 上付添字 T は転置, σ は表面張力, κ は気液界面の平均曲率, δ_s は界面上以外でゼロとなるデルタ関数, \mathbf{n}_s は界面の単位法線ベクトルである. μ_{eL} には, 液相粘性係数 μ_L に渦粘性 μ_{TB} , 気泡誘起乱流粘性を加えた以下の式を用いる.

$$\mu_{eL} = \mu_L + \mu_{TB} + \rho_L \sum_{m=1}^N C_{\mu m} d_m \alpha_m |\mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c| \quad (3.10)$$

ここで, d_m は気泡グループ m のザウタ平均気泡径であり, 係数 $C_{\mu m}$ は 0.6 とする[4]. なお, 本章では, 比較的レイノルズ数(Re)の小さい流れを対象とするため, 渦粘性はゼロと置く. Re 数の大きな流れにおける渦粘性のモデル化方法に関しては第4章で述べる.

3.2.2 相間運動量輸送に関する相関式

気液相間の運動量輸送項に関しては, 次の相関式で評価する[5].

$$\mathbf{M}_{Lm} = \mathbf{M}_{Dm} + \mathbf{M}_{Lm} + \mathbf{M}_{VMm} + \mathbf{M}_{TDm} \quad (3.11)$$

$$\mathbf{M}_{Dm} = \frac{1}{8} a_{INT} C_{Dm} \rho_L |\mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c| (\mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c) \quad (3.12)$$

$$\mathbf{M}_{Lm} = \alpha_m \rho_L C_{Lm} (\mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c) \times \text{rot } \mathbf{u}_c \quad (3.13)$$

$$\mathbf{M}_{VMm} = \alpha_m \rho_L C_{VMm} \left[\frac{D\mathbf{u}_m}{Dt} - \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \right] \quad (3.14)$$

$$\mathbf{M}_{TDm} = C_{TDm} \rho_L k_{Lm} \nabla \alpha_m \quad (3.15)$$

ここで \mathbf{M}_D は抗力, \mathbf{M}_L は揚力, \mathbf{M}_{VM} は仮想質量力, \mathbf{M}_{TD} は乱流分散力である. また a_{INT} は界面積濃度, C_D は抗力係数, C_L は揚力係数, C_{VM} は仮想質量係数, C_{TD} は乱流分散係数である. また D/Dt は物質微分, k_L は乱流エネルギーである. これらの各係数には以下に示す相関式を使用する.

抗力係数には, Tomiyama *et al.* [6]の次式を用いる.

$$C_{Dm} = \max \left[\min \left[\frac{24}{Re_m} (1 + 0.15 Re_m^{0.687}), \frac{72}{Re_m} \right], \frac{8}{3} \frac{Eo_m}{Eo_m + 4} \right] \quad (3.16)$$

ここで Re_m は気泡レイノルズ数, Eo_m はエトベス数で, 次式で表される.

$$Re_m = \frac{\rho_L |\mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c| d_m}{\mu_L} \quad (3.17)$$

$$Eo_m = \frac{g(\rho_L - \rho_m) d_m^2}{\sigma} \quad (3.18)$$

揚力係数は, Tomiyama *et al.* [7]の次式で評価する.

$$C_{Lm} = \begin{cases} \min[0.288 \tanh(0.121 Re_m), \varphi(Eo_H)] & (Eo_H < 4) \\ \varphi(Eo_H) & (4 < Eo_H < 10.7) \\ -0.29 & (Eo_H > 10.7) \end{cases} \quad (3.19)$$

ここで φ と Eo_H は次式で表される.

$$\varphi(Eo_H) = 0.00105Eo_H^3 - 0.0159Eo_H^2 - 0.0204Eo_H + 0.474 \quad (3.20)$$

$$Eo_H = \frac{g(\rho_L - \rho_m)d_H^2}{\sigma} \quad (3.21)$$

ここで d_H は気泡の最大長軸径である。

仮想質量係数と乱流分散係数には次の値を用いる。

$$C_{VMm} = 0.5 \quad (3.22)$$

$$C_{TDM} = 1.0 \quad (3.23)$$

乱流エネルギー k_L は次式で評価する[8]。

$$k_{Lm} = \alpha_m |\mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c|^2 \quad (3.24)$$

3.2.3 数値解法

場の方程式を、固定-等間隔-直交-構造格子上で、有限体積法により離散化する。格子上的変数配置は、全ての変数が格子中心で定義されるコロケーション配置とする。圧力補正はSIMPLE法により行う。時間積分には3点近似の二次精度陰解法(Ferziger and Peric [9])を用いる。対流項の離散化には二次精度の線形補間に一次精度の上流補間を組み合わせた Deferred Correction 法[9]を適用する。拡散項の離散化には二次精度の線形補間を用いる。離散化した線形連立方程式は、速度と体積率に関しては、強陰的解法(Stone [10])を、圧力補正のためのポアソン方程式に関しては、ICCG 法(conjugate gradient method preconditioned by incomplete Cholesky method)を用いる。

3.2.4 埋め込み境界法

埋め込み境界法では、固体と流体を同じ一つの格子で分割し、固体の存在する領域に対して、方程式に強制項(外力項)を加えることで、その場所(格子)の速度を固体の速度に設定する。例えば、固体が静止していれば、固体の存在する格子における速度をゼロに強制する外力を加える。矩形直交格子を用いる埋め込み境界法では、一般に、固体表面と格子面は一致しないため、固体と流体が共存する格子が存在する。これまで様々な埋め込み境界法が提案されている[3]が、これらの違いは、次の二点に集約される。固体 - 流体共存格子における、①速度計算方法と②設定速度にするための強制項のモデル化方法である。以下に、これまでに提案されてきた埋め込み境界法の概要と本章で用いる手法の特徴を述べる。

図 3.2 にこれまで報告されてきた速度の補間方法の Fadlun *et al.* [3]による分類を示す。この図で注意することは、変数配置がスタッガード配置であるということである。もう一つの配置方法であるコロケーション配置では、体積率、圧力、速度などの全ての変数を格子中心に配置するが、スタッガード配置では、体積率や圧力などのスカラー変数は格子中心に、速度は格子境界面に配置する。スタッガード配置は、圧力振動解を抑制できるという利点があり、多くの埋め込み境界法の計算でも用いられている。速度補間の方法について、図 3.2 に沿って説明する。速度設定位置と固体表面が一致していない場合、三つの速度計算方法が考えられる。すなわち、(a)その格子に少しでも固体領域があれば、速度を固体の速度とする方法。(b)その格子内の固相体積率を考慮して速度を計算する方法。(c)固体表面での速度と固体から離れた位置の流体の速度から内挿補間して速度を計算する方法の三種である。計算された速度の精度は、(a),(b),(c)の順に高くなる。一方、(c)では速度補間の計算が煩雑になるとともに、スタッガード格子を用いている場合、補間方向に任意性がある。図 3.2(c)では水平方向に補間しているが、補間方向を垂直方向にとることもできる。さらに固体の角の部分が存在する格子では、速度補間するのが困難となる。

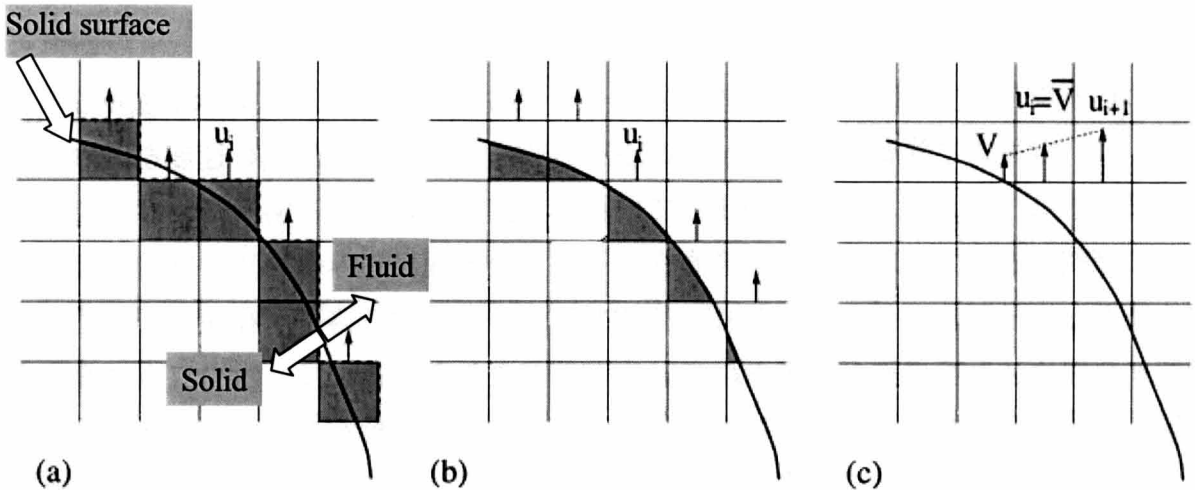


図 3.2 埋め込み境界法における速度補間方法(出典 : Fadlun *et al.* [11])

固体 - 流体共存領域の格子位置の速度を強制するために、既に数多くの強制項モデルが提案されているが、以下に代表的な三つを示す[3].

Direct forcing(直接強制法)[11]

直接強制法では、まず運動量保存式(3.5)と(3.6)を次のように変形する。

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = \text{RHS} \quad (3.25)$$

ここで Δt は時間刻み幅、上付き添え字 n は整数で、 $n\Delta t$ により離散時間を表す。 ϕ は式(3.5)と(3.6)の従属変数、RHSは式(3.5)と(3.6)のその他の項を意味する。次に、式(3.25)の右辺に式(3.26)で表される強制項 f を付加する。

$$f = \left(\frac{\phi_s - \phi^n}{\Delta t} - \text{RHS} \right) \quad (3.26)$$

ここで ϕ_s は内部境界において設定する従属変数の値である。この手法の特徴は、調整パラメータが無く、計算も安定していることである。

Feedback forcing(フィードバック強制法) [12]

フィードバック強制法では、強制項を次のようにモデル化する。

$$f(t) = \omega_1 \int_0^t [\phi(t') - \phi_s(t')] dt' + \omega_2 [\phi(t) - \phi_s(t)] \quad (3.27)$$

ここで ω_1 と ω_2 は調整パラメータである。この強制項は、 ϕ を ϕ_s に強制する減衰振動子と同じ効果をもつ。この手法の欠点は、調整パラメータが必要なことと、解の振動が発生するのでそれを抑制する必要があることである。

Fictitious Domain approach (仮想領域法)[13]

仮想領域法では、強制力を次のようにモデル化する。

$$f(t) = \frac{[\phi(t) - \phi_s(t)]}{\rho D_a K} \quad (3.28)$$

ここで $D_a = K_0/L_0^2$ はダルシー数、 K_0 は基準透過率、 L_0 は代表長さである。また K は固体領域では極めて小さな値、流体領域では極めて大きな値、固体と流体が共存する領域ではある特定の値 K_p をとるパラメータである。この強制項によって、適当なダルシー数と K_p を設定することで、固体領域では ϕ を ϕ_s に強制し、流体領域では強制力がゼロとなり、固体-流体共存領域では適度な強制力が働いて流れが制動される。この方法の欠点は、調整パラメータが必要なことである。

本研究では、コロケーション配置と、直接強制法を改良することにより、速度補間を必要としない新しい簡便な埋め込み境界法を構築した。コロケーション配置で課題となる圧力振動は、Rhie-Chowの補正法[14]を含めた数種類の振動抑制法[15]を適用して抑えている。以下、構築した手法について説明する。

強制法として、調整パラメータが無く、計算も安定しているMuhd-Yosuf [11]の直接強制法を採用する。ただし、本手法においては、強制項 f に係数 β をかけたものを式(3.29)のように付加する。

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = \text{RHS} + f \beta \quad (3.29)$$

第3章 埋め込み境界法による複雑構造物内気泡流計算手法

この β は0から1の間の値をとる関数であり、この関数のモデル化方法により、様々な精度のモデルが考えられる。本章で用いる β の具体的な形に関しては後述する。

有限体積法で離散化された場の方程式は、格子点 P において次のように表される。

$$a_p \phi_p + \sum_{\ell} a_{\ell} \phi_{\ell} = S_p + f_p \cdot \beta \quad \ell = e, w, n, s, t, b \quad (3.30)$$

ここで a は離散化式における係数(Ferziger and Peric [9])、下付き添え字 e, w, n, s, t, b は格子点 P の周りの格子点を表す。式(3.30)を整理しなおすと、離散化式は(3.31)のようになる。

$$a_p \phi_p + \sum_{\ell} a_{\ell} \phi_{\ell} = S_p + S_{p'} \quad \ell = e, w, n, s, t, b \quad (3.31)$$

$$S_{p'} = -\frac{\beta}{1-\beta} a_p (\phi_p - \phi_s) \quad (3.32)$$

本章では、固相と液相が共存しない格子では、係数 β を固相体積率 α_s に等しいとおく。このモデルにより、液相($\alpha_s = 0$)では $S_{p'}$ はゼロとなる。一方固相($\alpha_s = 1$)では、 $S_{p'}$ は式(3.31)中の他の項に比べ非常に大きな値となり、 ϕ_p は ϕ_s の値に近づく。また、固相と液相が共存する格子、すなわち固体表面が存在する格子では、まず $S_{p'}$ を固体表面に対する法線成分と接線成分に分解し、法線成分では β を1、接線成分では α_s とおく。固体表面に対する法線および接線方向の計算は次のように行う。

- (i) 計算領域において固相体積率 α_s を設定する。
- (ii) その固相体積率の勾配ベクトル($\nabla \alpha_s$)を計算する(図 3.3 (a))。この勾配ベクトルは固相表面とその近傍の格子で0以外の値をとる。
- (iii) この勾配ベクトルのうち、固相体積率が0と1の領域のベクトルを除くことで固体表面の存在する格子における固相体積率勾配ベクトルを抽出する。
- (iv) 抽出した固体表面の存在する格子における固相体積率の勾配ベクトルを用いて、固体表面の法線および接線ベクトルを計算する(図 3.3 (b))。

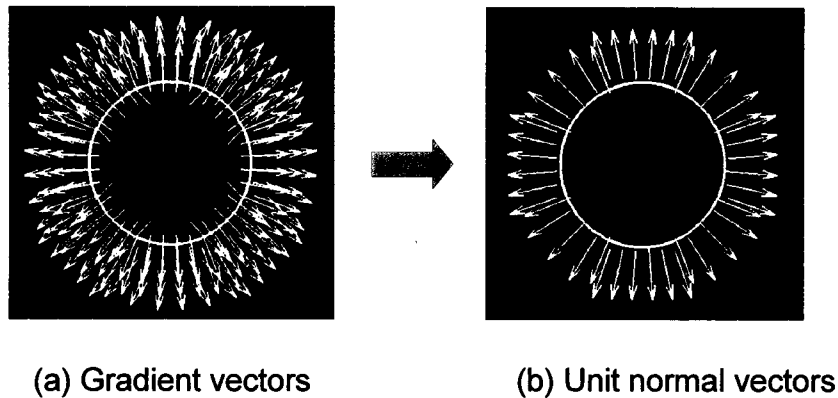


図 3.3 固体表面に垂直な単位ベクトルの計算概要

なお係数 β に別のモデルを用いることにより、層流から乱流までの境界層厚みの変化に対応した強制力を作ることができる。これに関しては第4章で述べる。

3.3 実験方法

計算手法を検証するめに、(1) 流れの中に構造物がある液相単相流の速度分布を計測する単相流実験、および(2) 構造物周囲の気相体積率分布を計測する二相流実験を行った。気液各相には常温常圧の空気、水を用いた。実験装置の概略を図3.4に示す。実験装置は、装置上部から、上部タンク、構造物を含む試験部、助走部、下部タンク、液相用のポンプ・貯水タンク、コンプレッサー、気相および液相の流量計、気相の圧力計から構成されている。また、下部タンク内には気泡流入部および散気盤がある。試験部および助走部の管断面は100 mm × 30 mmの長方形であり、助走部は高さ800 mm、試験部は高さ400 mmである。試験部はアクリル樹脂製となっておりレーザーの照射および高速度ビデオカメラによる撮影が可能となっている。単相流実験では、液相はポンプ(Iwaki Magnet Gear Pump)によって貯水タンクより供給され、流量計(日本フローセル、SPO-4)を通り下部タンク・助走部を経て十分に発達した層流となって構造物を含む試験部へ流入し、その後貯水タンクに戻される循環構造となっている。二相流実験では、空気を、コンプレッサー(HITACHI、SRL-2,2DA6)・流量計(Oval,Flowpet-Es)・圧力計を経由し下部タンク中央にある気泡流入部から散気盤を介して下部タンク内へ流

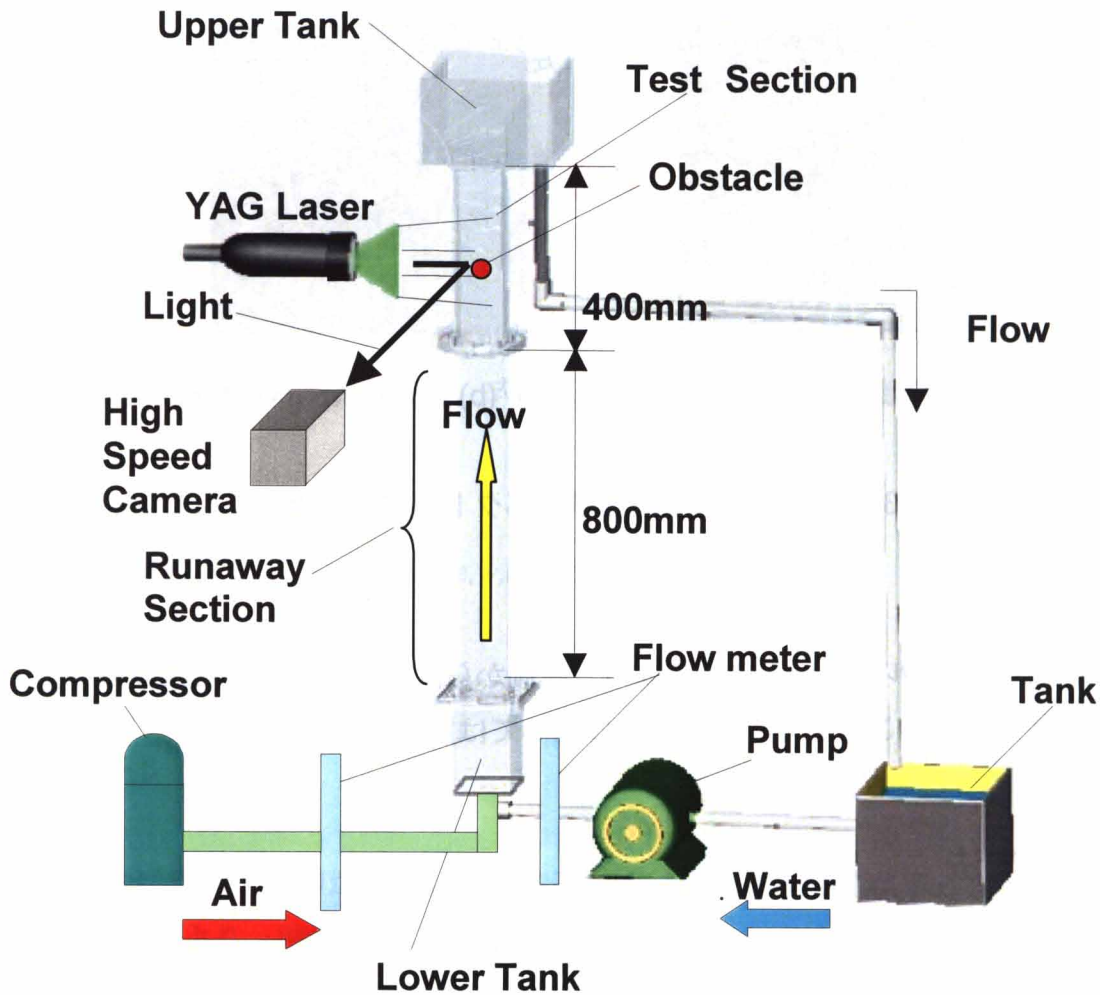


図 3.4 実験装置の概要

入させる。下部タンクの概略図を図 3.5 に示す。液相を下部タンクへ流入させる際には、流れの対称性を確保するために、下部タンクの四つの側面より流入させた。また、気相を均等に流入させるために、気相流入部内には複数の球形の玉を置いた。散気盤には、図 3.6 に示すように $65 \text{ mm} \times 25 \text{ mm}$ の断面の中に直径 0.5 mm のノズルが 14 個均等に配置されている。構造物には図 3.7 に示す円柱と角柱を用いた。円柱は直径 30 mm 奥行き 30 mm 、角柱は縦 50 mm 横 30 mm 奥行き 30 mm である。構造物はその中心が妨走部下端より下流方向へ 950 mm の位置になるように配置した。

単相流の実験では流入液相速度を 7.5 mm/s とし、構造物下流の液相速度を PIV (Particle Imaged Velocimetry)を用いて測定した。二相流の実験では、流入液相速度を

第3章 埋め込み境界法による複雑構造物内気泡流計算手法

0 mm/s, 気相流量を 2000 ml/min とし, 構造物下流の気相体積率を点電極プローブ法により測定した。

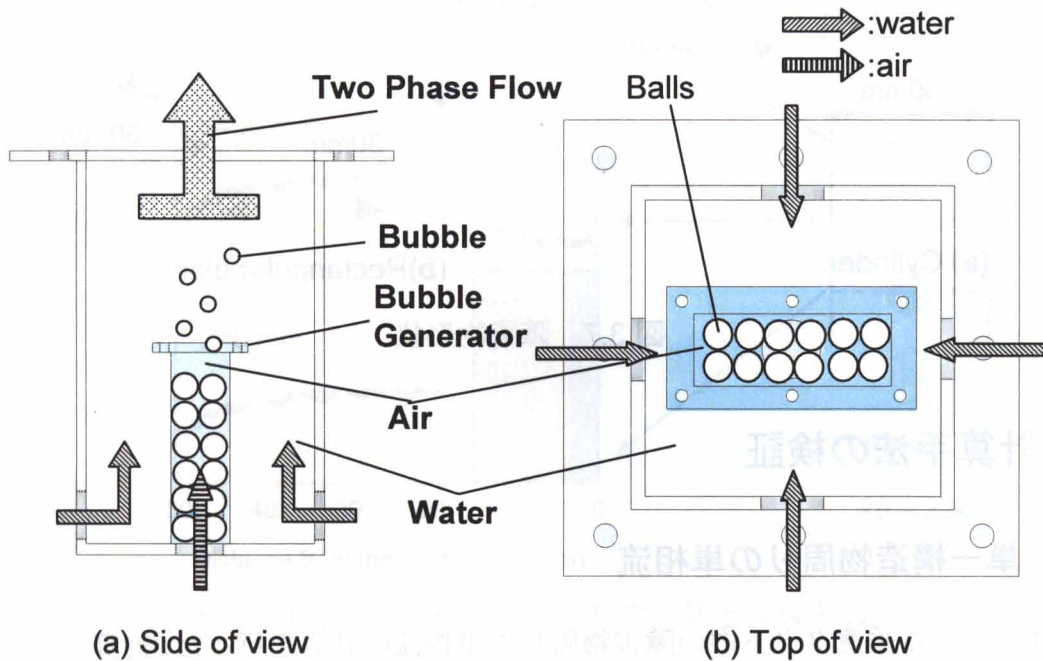


図 3.5 気液混合部(下部タンク)

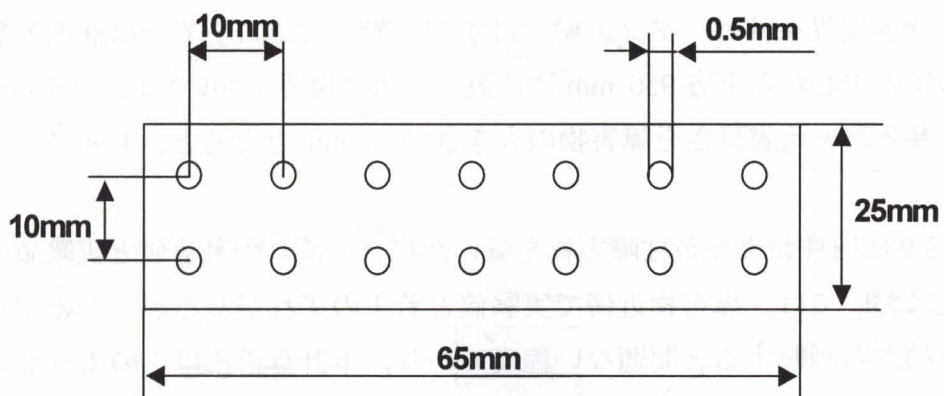


図 3.6 散気板形状

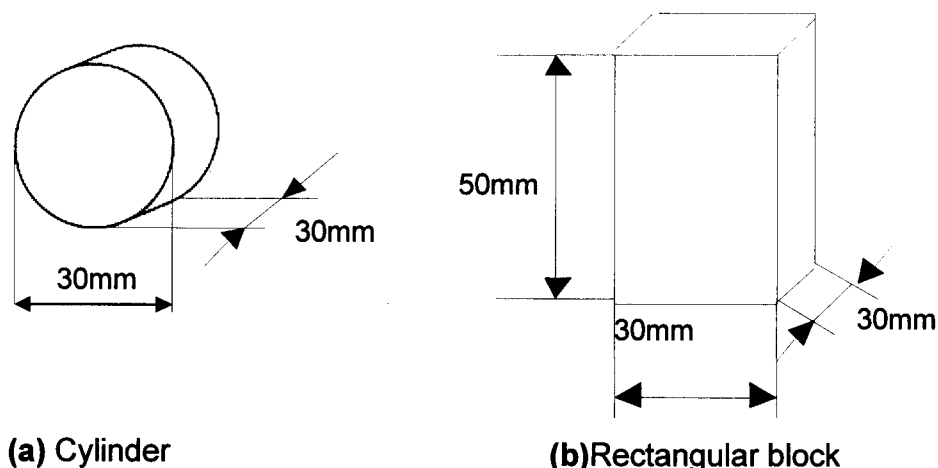


図 3.7 障害物形状

3.4 計算手法の検証

3.4.1 単一構造物周りの单相流

図 3.4 に示した垂直ダクト内の障害物周りの单相流の計算を行った. 計算した流速は PIV による測定値と比較した. 計算領域は, 高さ(1300 mm) x 幅(100 mm) x 奥行き(30 mm)とした. この領域を, 格子サイズが 5 mm の場合は $260(H) \times 20(W) \times 6(D) = 31200$ に, 格子サイズが 2.5 mm の場合は $520(H) \times 40(W) \times 12(D) = 249600$ の, 二種類の格子に分割した. 速度境界条件は, ダクト壁ではすべり無し, 出口境界では速度勾配無しとした. 障害物の中心から下方 950 mm に位置する入口境界においては, 7.5 mm/s の上向き速度を与えた. 代表長さを障害物の大きさの 30mm ととると, レイノルズ数は 224 である.

図 3.8 と図 3.9 に円柱および角柱障害物を置いた場合の流れの計算値と実験値の比較を示す. 角柱においては, 障害物近傍で実験値と若干のずれがあるが, このずれは本手法の使用目的から判断すると問題ない程度であり, 本計算手法はこのような粗い格子(格子サイズ 5 mm)でも必要十分な予測精度をもつ.

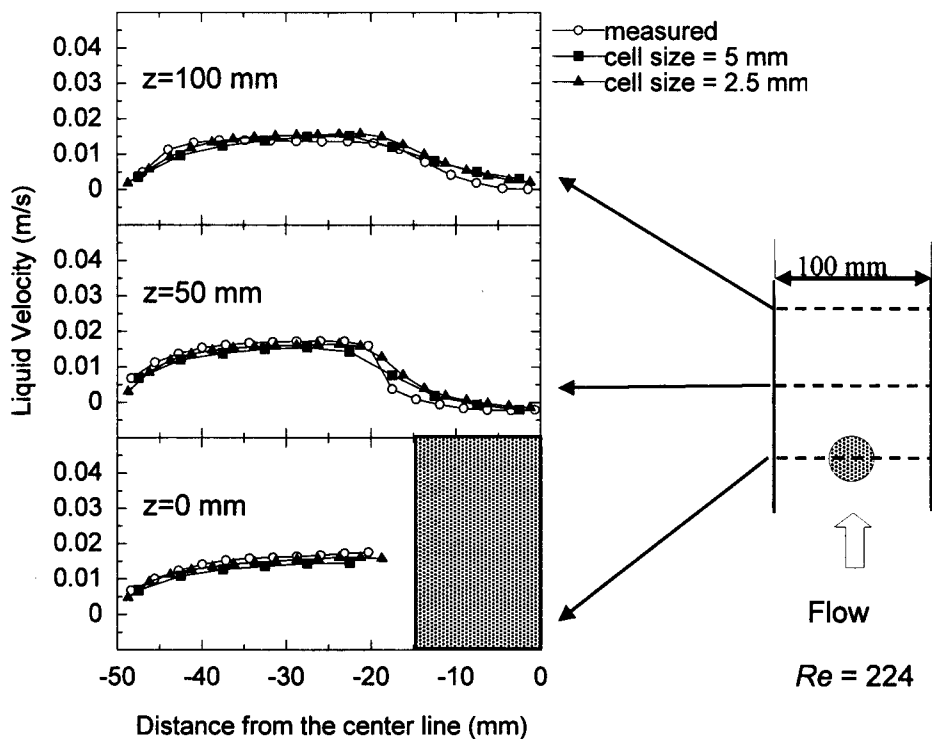


図 3.8 円柱周りの流れの流速分布の計算と実験との比較

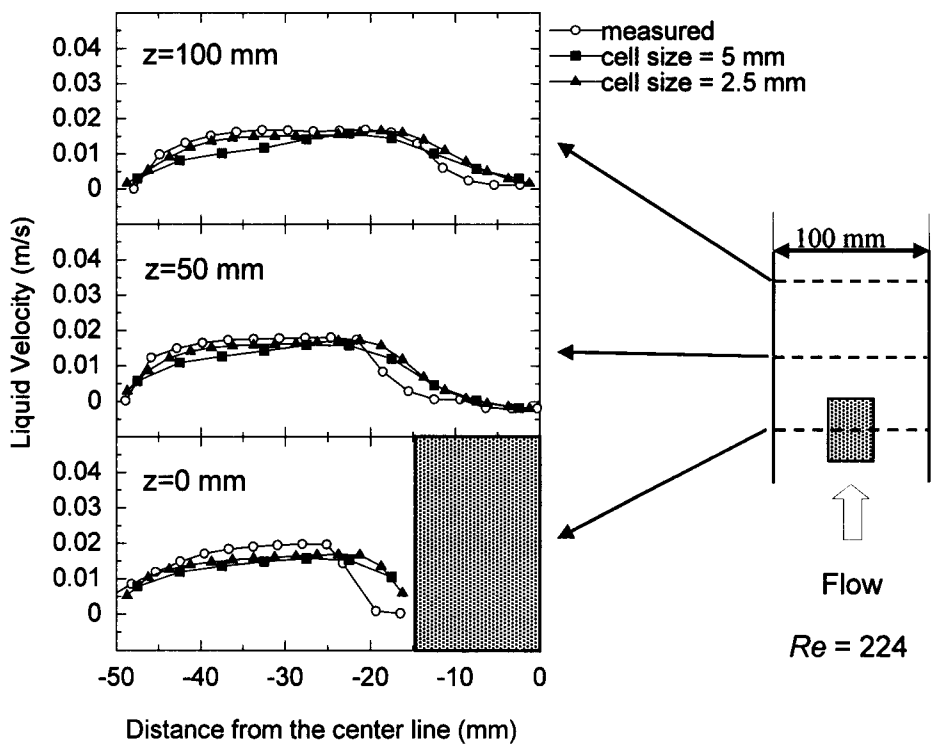


図 3.9 角柱周りの流れの流速分布の計算と実験との比較

3.4.2 単一構造物周りの気泡流

図 3.4 に示した垂直ダクト内の障害物周りの気泡流の計算を行った。実験において気泡の合体および分裂は観測されなかったため、計算においても気泡の合体および分裂は考慮しなかった。すなわち、式(3.2), (3.5)において、 $R_m=0$ と $M_{Rm}=0$ とした。

図 3.10 に示すように、自由表面の上部に連続気相を含む計算領域を設定し、格子サイズ 5 mm 一定で 130(H) x 20(W) x 6(D) = 15600 の格子に分割した。速度境界条件はダクト壁ですべり有り、出口境界で速度勾配無しとした。入口境界条件として、障害物の中心から下方 245 mm の位置において気相速度および気相体積率の測定値を与えた。

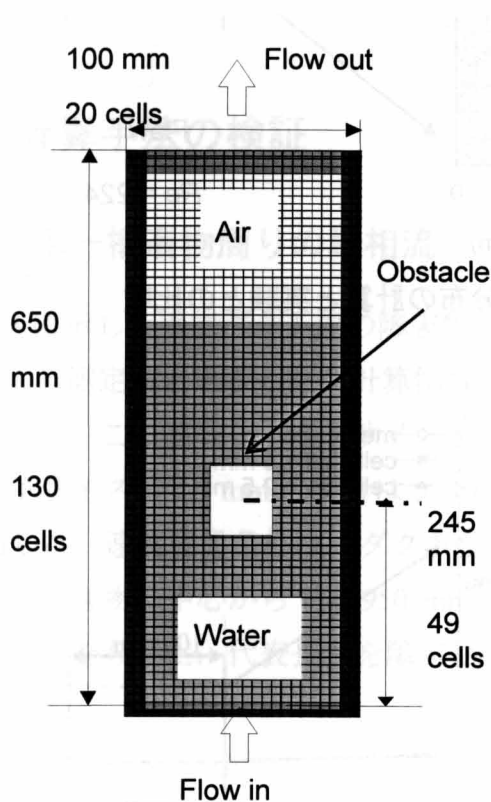


図 3.10 計算領域

図 3.11 および 3.12 に円柱および角柱周りの流れの気相体積率測定値と計算値を比較した。計算値は測定値をほぼ再現している。ダクト壁と障害物近傍での計算と実験とのずれは、計算では考慮していない壁効果もしくは粗い格子が原因と考えられるが、本手法の使用目的から判断すると十分な予測精度といえる。

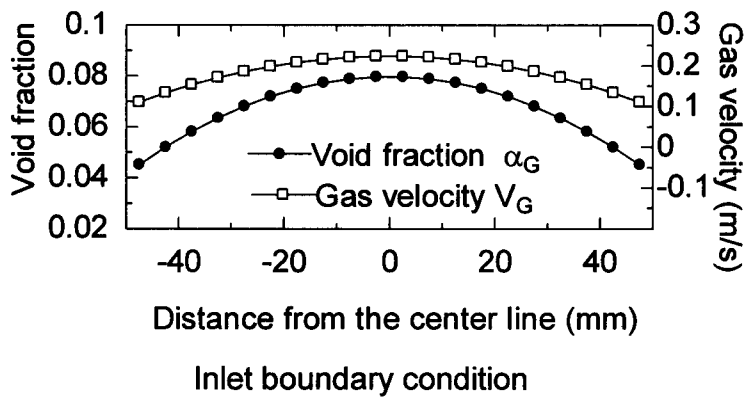
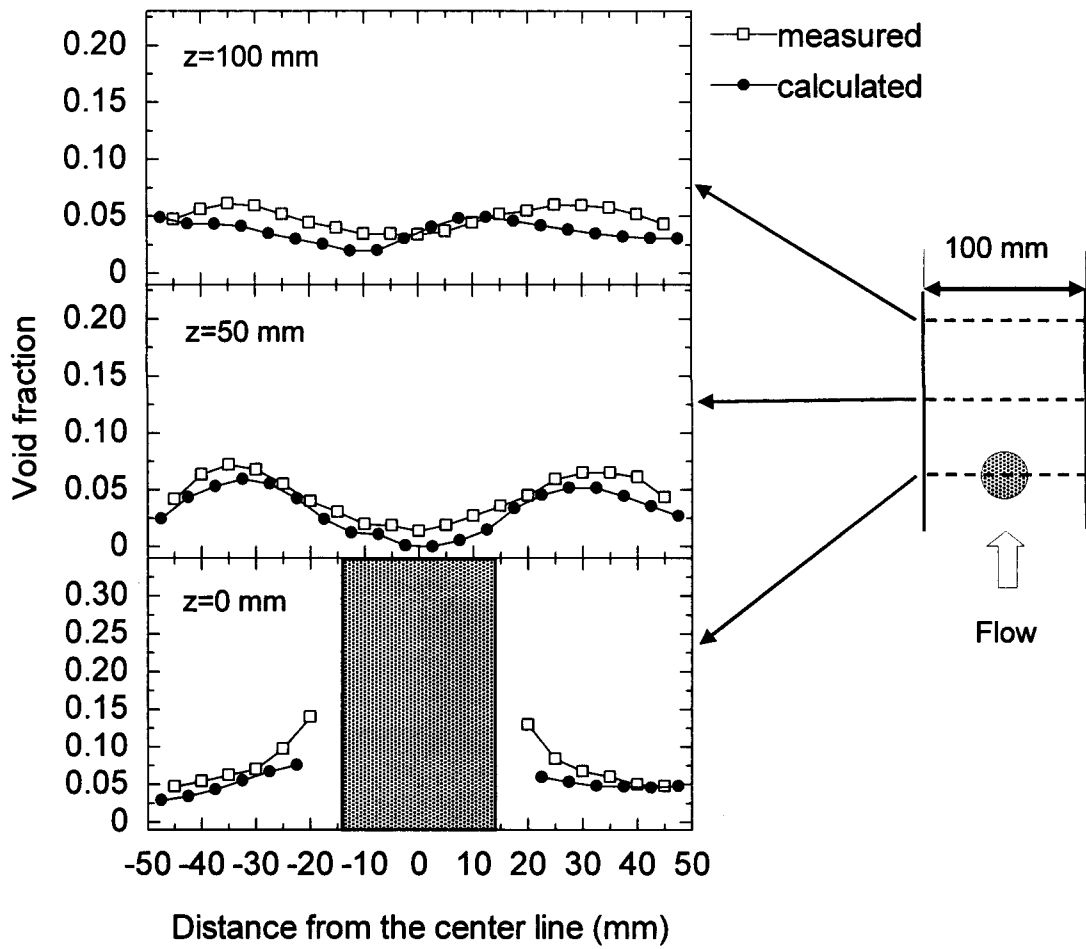


図 3.11 円柱周りの流れの気相体積率の実験値と計算値の比較

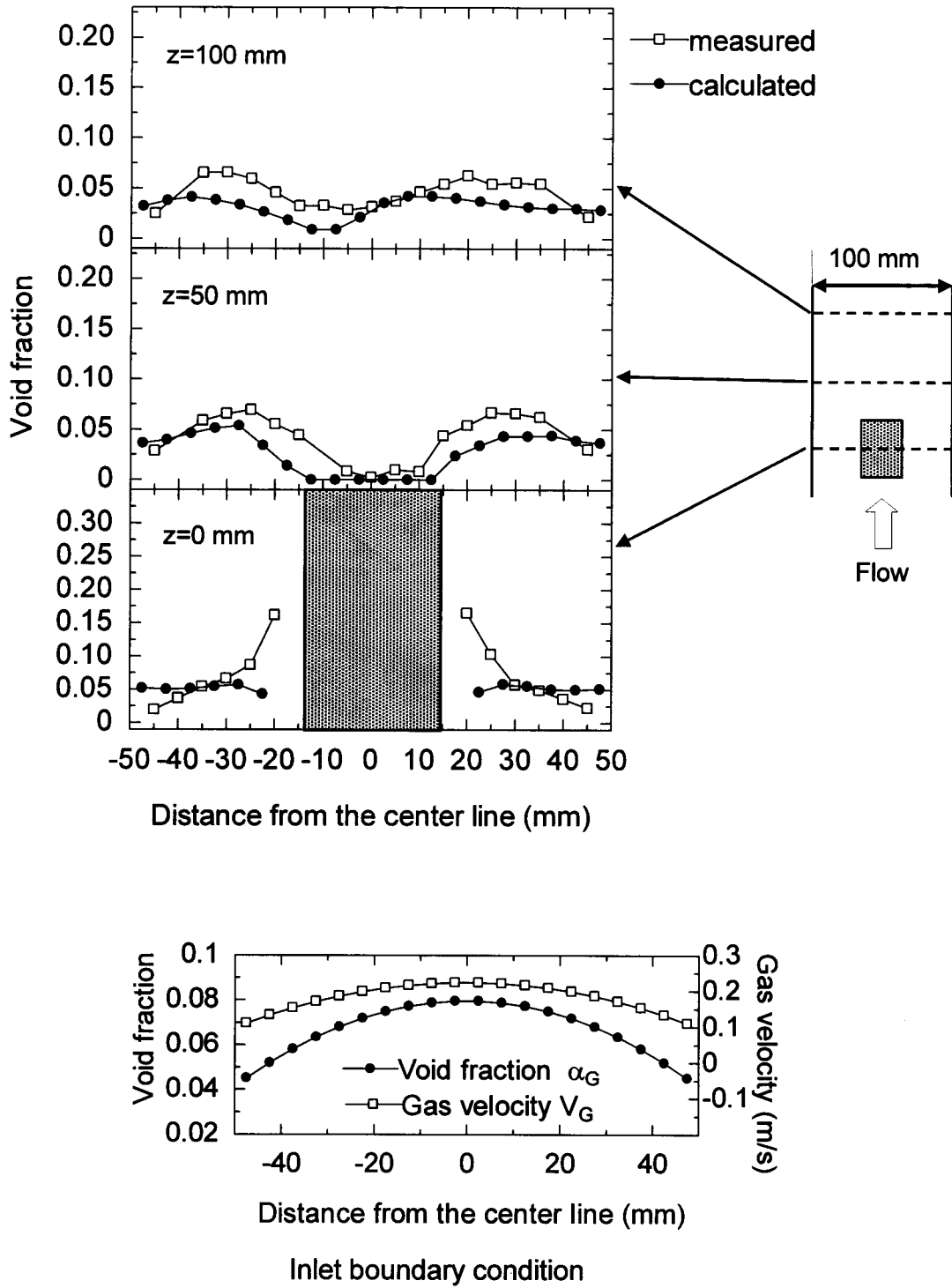


図 3.12 角柱周りの流れの気相体積率の実験値と計算値の比較

3.4.3 4つの円柱周りの気泡流

自由表面上部に連続気相を有する二次元の計算領域を、格子サイズ 10 mm 一定で $100(H) \times 50(W) = 5000$ の格子に分割した。計算領域内に、直径 30 mm の4つの円柱をそれぞれ 90mm 離して並べた。気泡径は直径 1 mm とした。計算領域下端の流入境界において、気相体積率を 0.02、気相速度を 0.3 m/s とした。計算領域の側壁と円柱壁での速度境界条件はすべり無しとした。計算結果を図 3.13 に示す。図 3.13(a)は気相体積率分布で、自由表面下、グレーは高気相体積率、白は低気相体積率を表わす。気泡の少ない領域がそれぞれの円柱後方に形成されているのがわかる。この領域は、最も上方(下流側)にある円柱後方で最も広い。これらの計算結果は Fujimoto *et al.* [16]の観察結果と一致している。図 3.13(b)は液相の流速ベクトルで、最も上方の円柱後方にある気泡の少ない領域には液相の下降流が存在している。この下降流は、気泡の多い領域と少ない領域の浮力の差により生ずると考えられる。

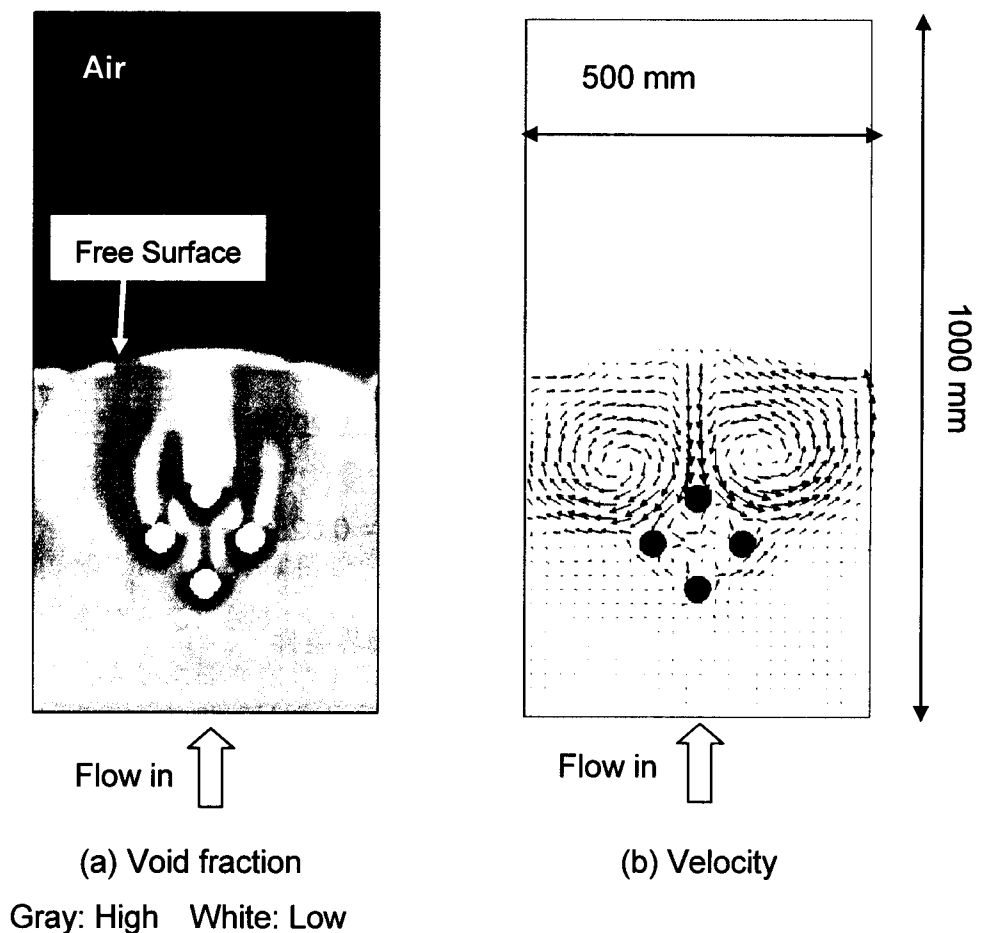


図 3.13 4つの円柱周りの気泡流

3.4.4 多数のロッドが存在する気泡塔内流れ

図 3.14 に示す 16 本のロッドを含む気泡塔内の空気-水系気泡流の計算を行った。気泡塔サイズは 1000(H) x 240(W) x 240(D) mm である。また、ロッド径は 10 mm である。この気泡塔領域を均一な格子サイズ 10 mm で 100(H) x 24(W) x 24(D) = 57600 の格子に分割した。気泡は、直径 1 mm と 6 mm の二つのグループを考慮した。速度境界条件は、塔壁ですべり有り、出口境界では速度勾配無しとした。塔下端の流入境界では、気相速度を 0.1 m/s、各気泡グループの気相体積率を 0.025 とした。気泡の合体・分裂は無いと仮定した。図 3.15 に(a)液相、(b)小気泡、(c)大気泡のそれぞれの流線を示す。液相の流線から、再循環流が形成されているのがわかる。小気泡の流線は、上昇とともに塔側壁側に広がるが、大気泡は、ほぼまっすぐに上昇する。

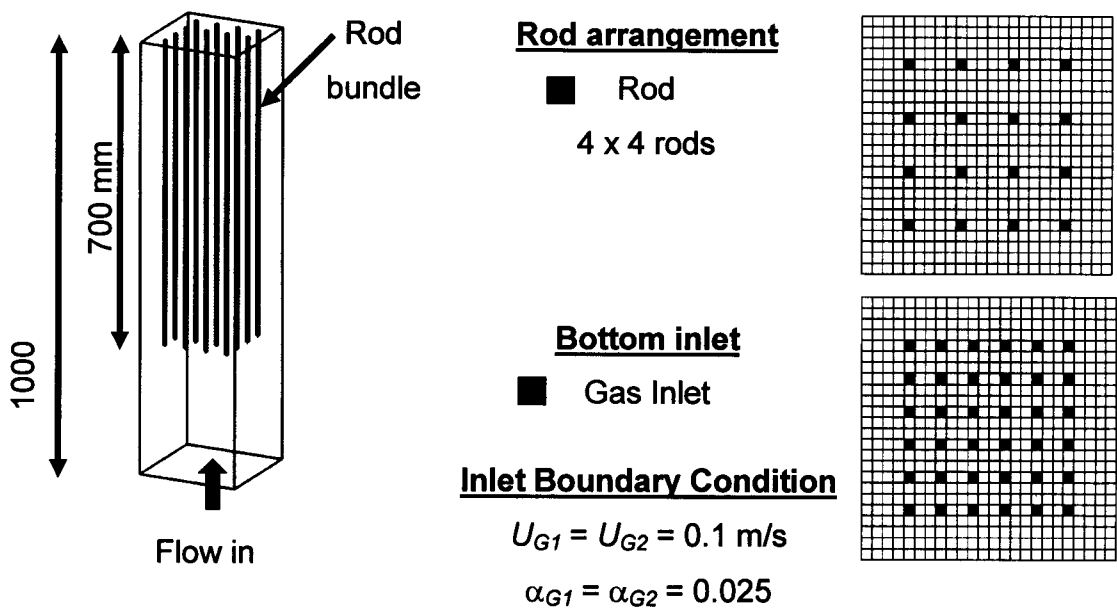


図3.14 計算領域と境界条件

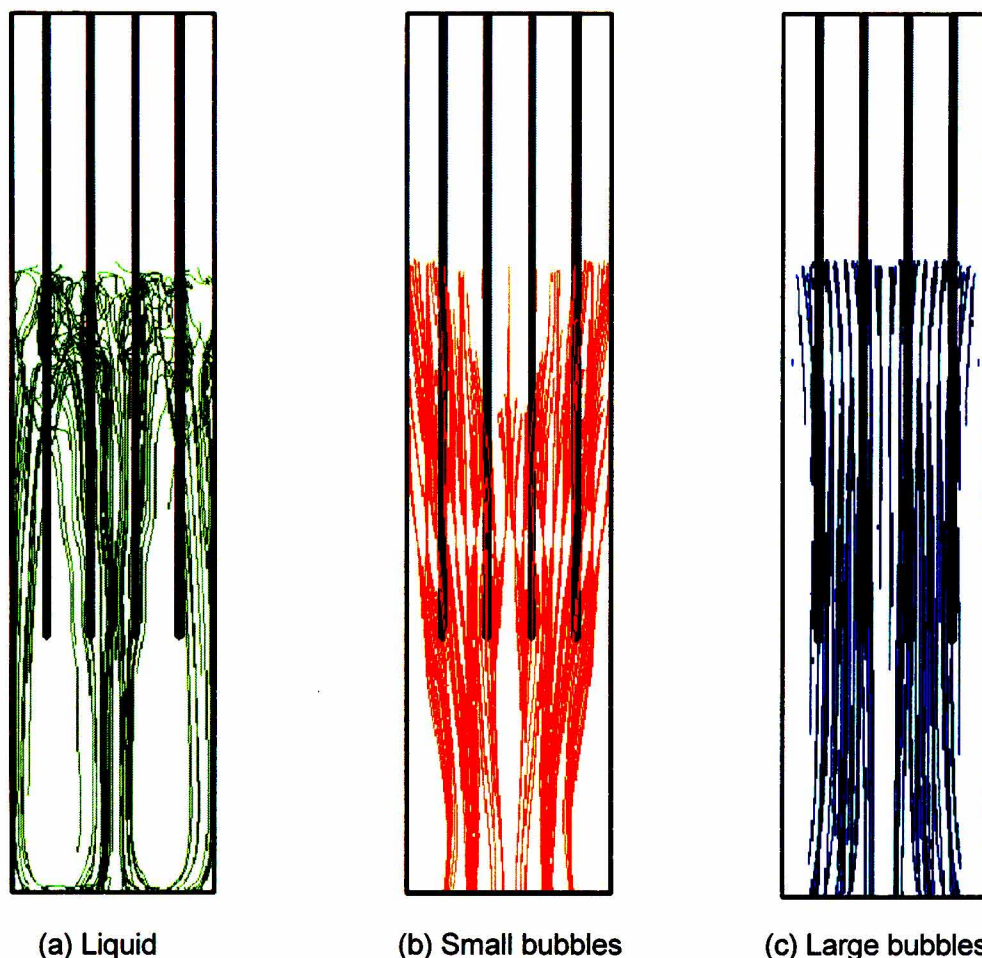


図 3.15 流線 ; (a) 液相, (b) 小気泡 (径 : 1 mm), (c) 大気泡 (径 : 6 mm)

3.4.5 様々な形状の気泡塔内気泡流

埋め込み境界法では、複雑な格子生成なしで、簡単な形状の計算領域を複雑な計算領域に容易に変更できる。図3.16 (b)-(d)は、矩形の簡単な気泡塔(図3.16 (a))から複雑な格子生成無しで生成した様々な格子を示している。円筒形気泡塔は、矩形気泡塔の4つの角を削って作成する(図3.16 (b))。この場合の「削る」という操作は、削る部分の固相体積率 α_S を、適当な値にするだけで良い。例えば、 $\alpha_S = 0$ から $\alpha_S = 1$ に変更すると、今まで流体であった部分が固体に変わり、速度をゼロにできる。同様にして、図3.16 (c)の気泡塔は、図3.16 (b)の気泡塔にくびれをつけたもの、また図3.16 (d)の気泡塔は、図3.16 (b)の気泡塔の隅の部分に穴を開けたものである。いずれの気泡塔も、元の気泡塔の固相体積率 α_S を適当な値にするだけで、計算の途中でも変更が可能である。

第3章 埋め込み境界法による複雑構造物内気泡流計算手法

はじめに、矩形気泡塔の計算を行った。計算領域を、一定の格子サイズ10 mmで50(H) x 15(W) x 15(D) = 11250の格子に分割した。速度境界条件は、塔壁ですべり無し、流出境界で速度勾配無しとした。また、気泡塔下端の気相流入境界では、3 x 3 = 9 箇所の気泡流入孔を設定した(図3.16 (e))。この流入境界では、気相速度を0.12 m/sに、気泡サイズを4 mm(一種類)に、気相体積率を0.9とした。こうして得られた矩形気泡塔の計算結果を初期条件として、計算領域を複雑に加工した気泡塔内の計算を行った。図3.17はそれぞれの気泡塔における液相の流線である。このように、固相体積率を設定するだけで、容易に、複雑な領域における流れの計算が可能となる。

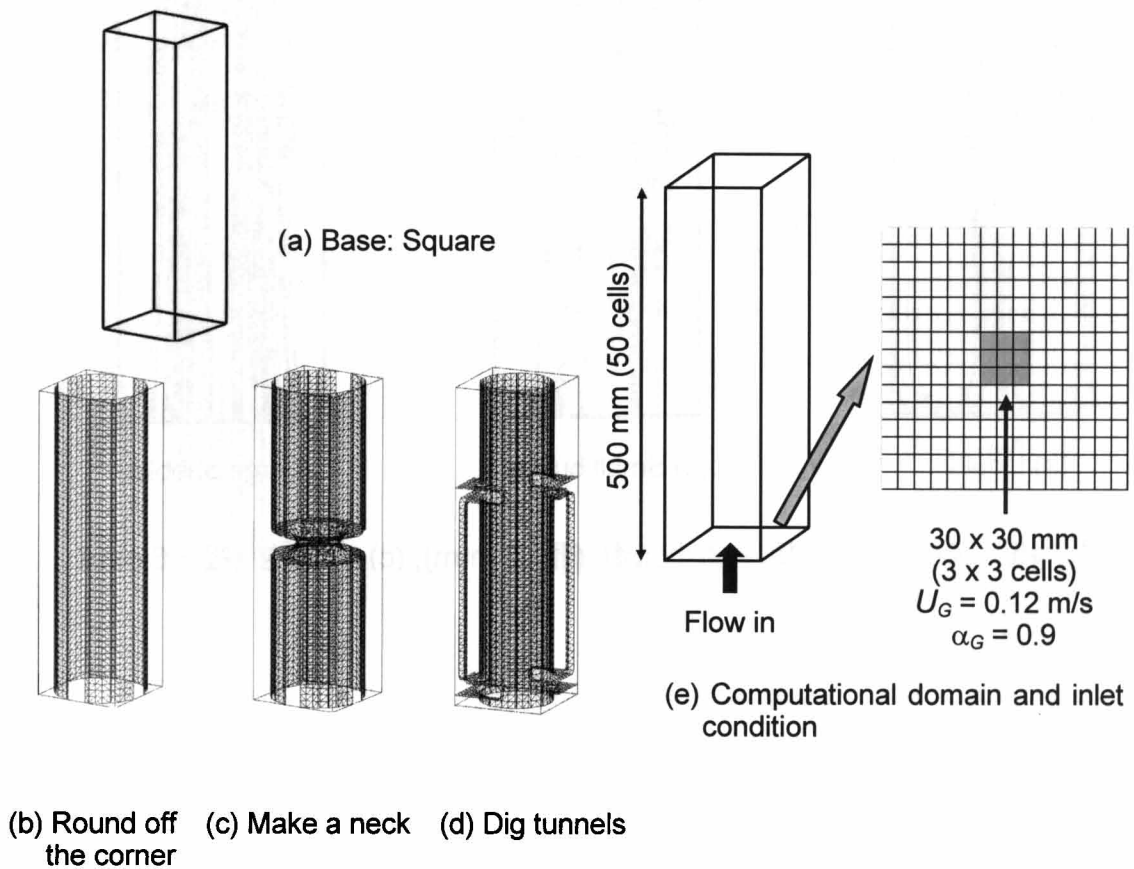


図 3.16 矩形気泡塔から作成した様々な気泡塔形状((a) – (d))と計算領域(e)

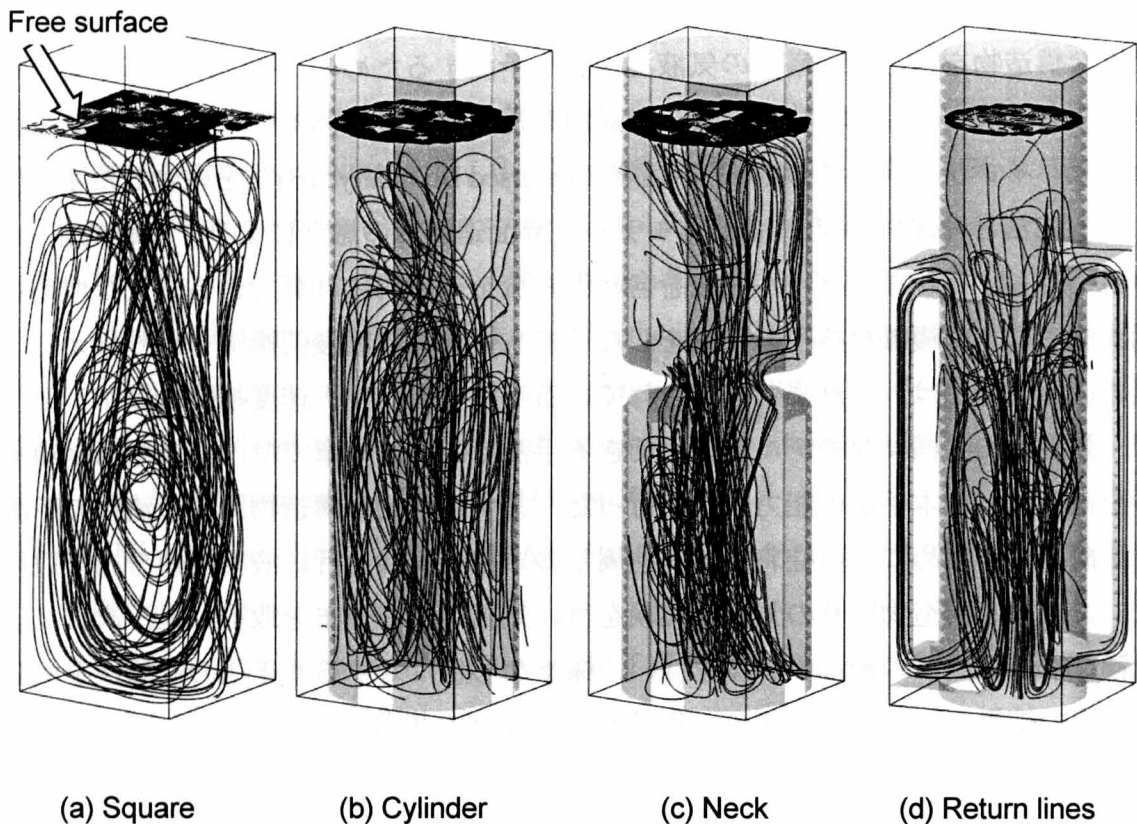


図 3.17 液相の流線

3.5 課題

本章の計算では、せん断乱流と気泡の合体・分裂を取り扱っていない。

せん断乱流に関しては、粗い格子にも適用可能な乱流モデルを考える必要がある。それに加えて、高 Re 数では格子より遥かに薄くなる乱流境界層をどう取り扱うかが大きな課題である。本手法では、粗い格子を用いているため、境界層近傍の精密な速度分布は予測できない。しかし、提案した埋め込み境界法では、強制項の係数 β のモデル化方法を工夫することにより、境界層厚みの影響を簡単な方法で模擬できる。このせん断乱流モデルに関しては次章で検討する。

合体・分裂に関しては、合体が支配的な流れ、分裂が支配的な流れ、両者が同等に高頻度で生じる流れ、両者が殆ど生じない流れの全てを良好に予測できなければ、適正な合体・分裂モデルとはいえない。このような全ての流れに適用できる合体・分裂モデルの選別と検証に関して第5章で検討する。

3.6 第3章のまとめ

複雑な構造物を含む気泡塔内の気液混相流を予測するための、CFDに基づく実用的計算手法を構築した。本手法は、富山と島田が提案した多流体モデルと界面追跡法を融合したハイブリッド法に、埋め込み境界(Immersed Boundary: IB)法を融合した手法(以後、IB-NP2法と呼ぶ)である。多流体モデルと界面追跡法の融合により、比較的粗い格子を用いても、様々なスケールと相を含む混相流を効率的に計算できる。また埋め込み境界法により、複雑な格子の生成をしなくても複雑な流路幾何構造を取り扱える。本埋め込み境界法は、これまで提案されている手法と異なり、速度補間計算が不要であり、強制項にも様々なモデルを利用できる手法である。本章では、簡単な強制項モデルを組み込んで本手法の能力検証を行った。まず基本的な構造物周りの流れの予測精度を検証するために、円柱および角柱周りの单相流実験を行い液相流速分布を取得した。また同じ構造物周りの気泡流実験を行い気相体積率分布を取得した。次に、より複雑な構造物周りの流れの計算を行い、様々な形状に対する本手法の適用性を検証した。その結果、IB-NP2法により、円柱や角柱などの基本的な構造物周りの单相流の流速分布および気泡流の気相体積率分布を良好に予測できること、複雑な構造物周りの気泡流を複雑な格子生成無しで容易に計算できること、および固体体積率の入力データを変更するだけで構造物の形状を容易に変更できることを実証した。

以上より、複雑な格子生成なしで複雑幾何形状を有する流路内の気泡流を粗い格子で計算できる手法の雛型を開発できた。

第3章の参考文献

- [1] Beale, R. and Jackson, T., *Neural Computing*, IOP Publishing Ltd (1990).
- [2] Tomiyama, A., Shimada N., (N+2)-Field Modeling for Bubbly Flow Simulation, *Computational Fluid Dynamics Journal*, Vol.9, No.4 (2001), pp. 418-426.
- [3] Fadlun, E. A., Verzicco, R., Orlandi, P., Mohd-Yusof, J., Combined Immersed-Boundary Finite-Difference Methods for Three-Dimensional Complex Flow Simulations, *Journal of Computational Physics* 161 (2000), pp. 35–60.
- [4] Sato, Y. and Sekoguchi, K., Liquid Velocity Distribution in Two-Phase Bubble Flow, *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 2 (1975), pp. 79-95.
- [5] Ishii, M. and Hibiki, T., *THERMO-FLUID DYNAMICS OF TWO-PHASEFLOW*, Springer (2006).
- [6] Tomiyama, A., Kataoka I. and Sakaguchi T., Drag Coefficients of Bubbles, *JSME*, Ser. B, 61, 588 (1998), 2810.
- [7] Tomiyama, A., Zun I., Tamaki H., Hosokawa S. and Okuda T., Measurement of Transverse Migration of Single Bubbles in a Couette Flow, *Two-Phase Flow Modelling and Experimentation*, Vol. II (1999), pp. 941-948.
- [8] Lopez de Bertodano, M. A., Lahey, R. T. Jr., Jones, O. C., Phase Distribution in Bubbly Two-Phase Flow in Vertical Ducts, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 20, (1994), pp. 805-818.
- [9] Ferziger, J. H., Peric M., *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer (2002).
- [10] Stone, H. L., Iterative solution of implicit approximations of multidimensional partial differential equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, 5 (1968), pp. 530-558.
- [11] Mohd-Yusof, J., Combined Immersed-Boundary/B-spline Methods for Simulations of Flow in Complex Geometries, *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, (1997), pp. 317-328.
- [12] Saiki, E. M., Numerical Simulation of a Cylinder in Uniform Flow: Application of a Virtual Boundary Method, *J. Comput. Phys.* 123 (1996), pp. 450–465.
- [13] Khadra, K., Angot, P., Parneix, S., Caltagirone, J., Fictitious domain approach for numerical modelling of Navier-Stokes equations, *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 34 (2000), pp. 651-684.

- [14] Rhie, C.M., Chow, W. L., Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation, *AIAA J.* 21 (1983), pp. 1525-1532.
- [15] Mencinger, J., Z̃un, I., On the finite volume discretization of discontinuous body force field on collocated grid: Application to VOF method, *Journal of Computational Physics* 221 (2007), pp. 524-538.
- [16] Fujimoto, K., Murai Y., Minami T. and Yamamoto F. (2001) Image Measurement of Two-Phase Convection Induced by Obstacles in Bubbly Flows, *JSME, Ser. B*, 67, 658, 104.

第4章 乱流計算機能の追加

4.1 はじめに

第3章では、気液混相流と複雑な構造物との相互作用を粗い計算格子でも簡易に取り扱える計算手法として、新しい埋め込み境界(Immersed Boundary : IB)法を組み込んだ気液混相流計算手法(以後、IB-NP2法と呼ぶ)を構築した。ただし第3章では、比較的レイノルズ(Re)数の小さな流れの予測精度を検証したのみであった。実際の工業設備内では、層流領域、乱流領域、または層流から乱流への遷移流領域の様々な Re 数範囲の流れが混在する。本章では、IB-NP2法に乱流計算機能を追加し、層流 - 遷移流 - 乱流の全ての領域の流れに適用できる手法へと拡張することを目的とする。

気泡乱流に関しては、第1章 1.2.4 で述べたように、まだ、決定的なモデルは確立されていない。乱流および乱流境界層の問題を厳密に解こうとすると、単相流の単純なチャンネル内流れにおいてすら容易ではないのが現状である。大型工業設備の実用的な数値予測を目的とした IB-NP2法では、LESに必要な計算格子より粗い等間隔直交格子を用いるため、計算格子スケールより遥かに小さなコルモゴロフスケールの乱流構造や、LESと同レベルの詳細な流れの予測、および境界層内の詳細な計算は目的としていない。むしろ、広い Re 数範囲の流れにおいて、計算コストの小さなモデルと必要最小限の計算格子を無駄なく使い、平均的な流速分布や、構造物からの平均的な抵抗力をできるだけ精度良く予測することを目的として手法を拡張する。本章では、計算格子以下のスケールの渦の消散は数値粘性を利用した渦粘性により模擬し、また境界層厚みの変化を Darcy 則のアナロジーで模擬する。どちらも、 Re 数に応じて流れへの効果が自動的に変化し、層流-遷移流-乱流の全ての流れに適用可能な手法とすることを目標とする。

幅広い Re 数範囲の実験および理論解析データが整備されているという理由から、まず、単相流れに対して、構築した方法を検証する。はじめに二次元円柱周りの流れ、次に、三次元球周りおよび三次元円柱周りの流れを計算し、 Re 数が 1~10000 の範囲において、流れのパターンとその遷移、および、抗力係数とストローハル数を、これまで報告されている実験および計算と比較する。

4.2 計算方法

本章で用いる場の方程式，相間運動量輸送の相関式，および数値解法は，二点を除き第3章で述べたものと同じである．異なる点は，①渦粘性 μ_{TB} ，および，②IB法における強制項の係数 β ，のモデルである．これらの機能拡張により，乱流および境界層の Re 数依存性を模擬する．

4.2.1 乱流の取扱い

IB-NP2法では，計算格子スケール以下の渦消散の効果を渦粘性 μ_{TB} によりモデル化する．第3章の式(3.10)に示したように，連続液相の実効粘性係数 μ_{eL} には，液相粘性係数 μ_L に渦粘性 μ_{TB} および気泡誘起乱流粘性を加えた以下の式を用いる．

$$\mu_{eL} = \mu_L + \mu_{TB} + \rho_L \sum_{m=1}^N C_{\mu m} d_m \alpha_m |\mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c| \quad (4.1)$$

ここで， ρ_L は液相密度， d_m は気泡グループ m のザウタ平均気泡径， α_m は気泡グループ m の体積率であり，係数 $C_{\mu m}$ は0.6[2]とする．

以下，数値粘性を利用した渦粘性 μ_{TB} のモデルと Deferred Correction 法[3]を融合させて乱流を取扱う．まず，数値振動を抑制して数値計算を安定化させる Deferred Correction 法を説明する．本章で用いる数値解法は有限体積法であるが，離散化誤差の評価が理解しやすいという理由で，便宜上，差分法に基づいて説明する．

数値振動に関しては，対流項に線形補間(中心差分)を用いると， Re 数が大きいところで振動解が発生することが知られている．これを抑制するために，一次上流補間(上流差分)を用いる方法，計算に使用するステンシルをより多く用いた高次精度上流補間(三次精度上流差分法，QUICK 法など)を用いる方法，および，二次精度線形補間と一次上流補間を組み合わせる方法，などがある．一次上流補間は，計算誤差(数値粘性)が大き過ぎて，高 Re 数においては実際より粘性の大きな流れを計算していることになり採用できない．また，ステンシルを多く用いる高次精度上流補間は，計算領域内部に複雑な構造物がある場合には，流体 - 構造物 - 流体のように構造物をまたいで補間する可能性があるため採用できない．そこで IB-NP2法では，数値振動を抑制する方法として，二次精度線形補間と一次上流補間を組み合わせる方法を採用する．まず，離

散式で、格子点 P における対流項 F を、ある計算時間ステップにおける収束計算ループの更新された値 New と更新される前の値 Old に分解する.

$$F = (F^L)^{New} + (F^H - F^L)^{Old} \quad (4.2)$$

ここで F^L および F^H は、それぞれ、低次精度補間と高次精度補間を用いた対流項を表す. 対流項として式(4.2)を使用すると次のような数値振動抑制効果がある. まず収束計算ループの初期は数値粘性を含んだ低次精度補間で計算を安定化させる. 計算が収束するに従って、 New 項と Old 項とはほぼ同じ値となるため、低次精度補間項は打ち消し合って、最終的には高次精度補間項のみが残る. この方法を **Deferred Correction** 法という. 本章では、計算に必要なステンシルを少なくするために、低次精度補間と高次精度補間に、以下に示す一次精度上流補間および二次精度線形補間を用いる.

$$F^L = u \cdot u_x \approx u \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} - |u| \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{2\Delta x} \quad (4.3)$$

$$F^H = u \cdot u_x \approx u \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \quad (4.4)$$

ここで u は流速, Δx は計算格子サイズ, 下付き添え字 x は空間微分, i は計算格子 P の指標である. 式(4.3), (4.4)中の差分式を微分と離散誤差で表現しなおすと次のようになる.

$$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = u_x + \frac{\Delta x^2}{6} u_{xxx} + O(\Delta x^4) \quad (4.5)$$

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{2\Delta x} = \frac{1}{2} \left(u_{xx} \Delta x + \frac{\Delta x^3}{12} u_{xxxx} + O(\Delta x^5) \right) \quad (4.6)$$

これより、式(4.2)の Old 項, すなわち、一次精度上流補間と二次精度線形補間の差は粘性項(x の二次微分項)と同じ効果をもつ数値粘性項であることがわかる.

これまで、特に高 Re 数においては、より数値振動を抑制し計算を安定化させる目的で、式(4.7)に示すように、数値粘性項に定数 ω (例えば0.2など)をかけた Blending(部分上流化)法がよく用いられてきた。

$$F = (F^L)^{New} + \omega(F^H - F^L)^{Old} \quad (4.7)$$

しかし、この方法では計算を安定化させはするが、数値振動が小さな場所では不必要に離散化精度が落ちてしまう。本章では、この ω を **switching parameter** としてモデル化し、層流や遷移流領域ではゼロに近い値に設定し、乱流域では乱流を簡易に取り扱えるようにする。収束計算ループ内で収束した後の、すなわち、*New* と *Old* の区別が無くなった後の式(4.7)を、式(4.3)~(4.6)を用いて書き換えると次のようになる。

$$\begin{aligned} F &= F^L + \omega(F^H - F^L) \\ &= u \left(u_x + \frac{\Delta x^2}{6} u_{xxx} + O(\Delta x^4) \right) - \frac{|u|\Delta x}{2} \left(u_{xx} + \frac{\Delta x^2}{12} u_{xxxx} + O(\Delta x^4) \right) \\ &\quad + \omega \left\{ u \left(u_x + \frac{\Delta x^2}{6} u_{xxx} + O(\Delta x^4) \right) - u \left(u_x + \frac{\Delta x^2}{6} u_{xxx} + O(\Delta x^4) \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{|u|\Delta x}{2} \left(u_{xx} + \frac{\Delta x^2}{12} u_{xxxx} + O(\Delta x^4) \right) \right\} \\ &= u \left(u_x + \frac{\Delta x^2}{6} u_{xxx} + O(\Delta x^4) \right) - (1-\omega) \frac{|u|\Delta x}{2} \left(u_{xx} + \frac{\Delta x^2}{12} u_{xxxx} + O(\Delta x^4) \right) \\ &= u u_x + \frac{u\Delta x^2}{6} u_{xxx} - (1-\omega) \frac{|u|\Delta x}{2} \left(u_{xx} + \frac{\Delta x^2}{12} u_{xxxx} \right) + O(\Delta x^4) \end{aligned} \quad (4.8)$$

式(4.8)の最後の式で、最も数値誤差の大きな項(Δx がかかっている項)を、von Neumannら[4]が衝撃波の振動解を抑制するために考案した人工粘性項に等しいと置く(式(4.9)). なお、Smagorinsky[5]の渦粘性モデルも、この von Neumann の人工粘性を起源としている[6].

$$(1-\omega)\frac{|u|\Delta x}{2}u_{xx} = C_l\Delta x^2\frac{\partial}{\partial x}(|u_x|u_x) \quad (4.9)$$

ここで C_l は無次元定数である. 式(4.9)を ω について解いた後, ω の変化する範囲を0~1に制限した式 (4.10)を計算では用いる.

$$\omega = 1 - \min\left(1, \frac{2C_l\Delta x|u_x|}{|u|}\right) \quad (4.10)$$

ω をこのような switching parameter として用いることで, 速度変動の大きい場所では一次精度上流補間による数値粘性が効いて計算が安定化し, 速度変動の小さい場所では二次精度線形補間となる計算スキームとなる. この ω がかけられた数値粘性項を渦粘性と考えれば, この計算スキームを用いることで, 層流, 遷移流, 乱流の各流れ場に応じて自動的に渦粘性が変化する計算方法となることが期待できる. なお, C_l の値は合理的に決定されるべきものであるが, 本章の計算では, 振動解を抑制するできるだけ小さな値 0.1 を用いた.

4.2.2 境界層の取扱い

次に, 境界層の簡易取扱い方法を構築する. 第3章に示した格子点 P における離散化式(3.31), (3.32)を再掲する.

$$a_P\phi_P + \sum_{\ell} a_{\ell}\phi_{\ell} = S_P + S_{JP} \quad \ell = e, w, n, s, t, b \quad (4.11)$$

$$S_{JP} = -\frac{\beta}{1-\beta}a_P(\phi_P - \phi_S) \quad (4.12)$$

IB-NP2 法では, 係数 β のモデルを変えることで, 様々な内部境界条件を設定できる. 第3章では, 強制項 S_{JP} を固体表面に対する法線成分と接線成分に分解し, 法線成分では β を1に, 接線成分では α_S とおいた. この β の簡単なモデルは, 層流領域では良い予測精度を示したが, 遷移流から乱流領域では誤差が大きくなる. これは, 境界層厚み

が計算格子よりも薄くなる効果を考慮していないためと考えられる。そこで本章では、係数 β を、Darcy 則とのアナロジーでモデル化する。このモデルでは、計算格子より薄い境界層の厚みと位置を明確に定義しないで、図 4.1 に示すように、固液境界が存在する計算格子全体に小さな仮想粒子が固相体積率に応じて詰まっていて、その粒子の間を流体が流れるとしてモデル化する。

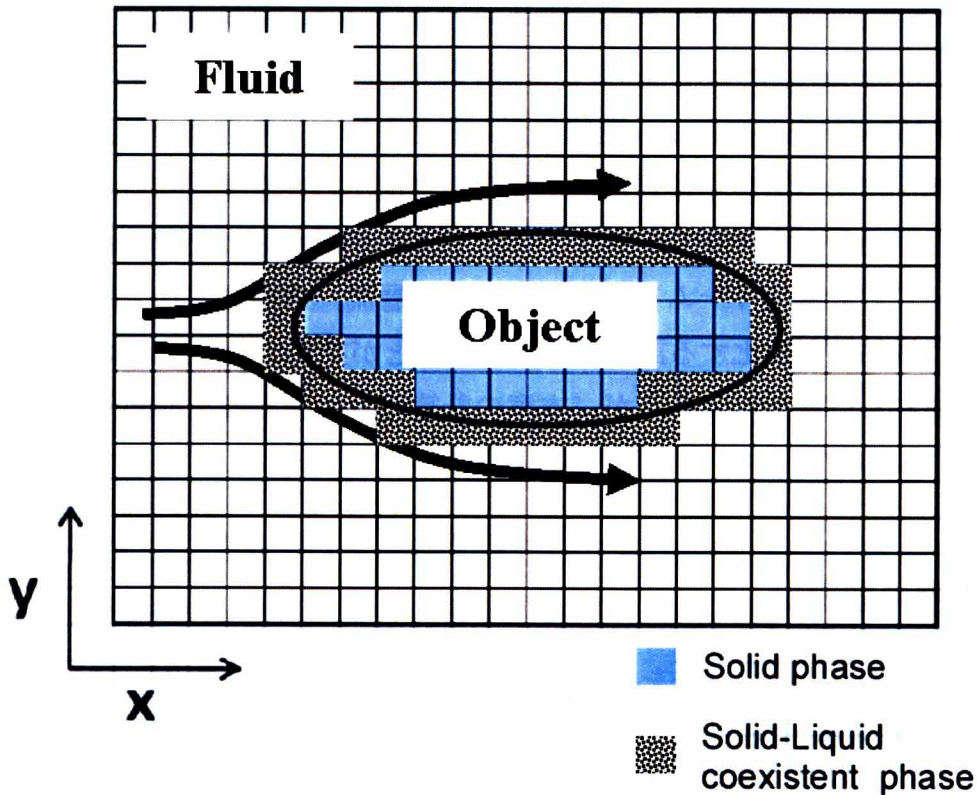


図 4.1 Darcy 則とのアナロジーによる固液界面のモデル化

このモデルにより、強制項は式(4.13)のように表せる。

$$S_{fp} = -\frac{\beta}{1-\beta} a_p (u_p - u_s) = -\left[C_1 \gamma_1 \frac{\mu_L}{D_p^2} (u_p - u_s) + C_2 \gamma_2 \frac{\rho_L |u_p - u_s|}{D_p} (u_p - u_s) \right] \cdot \Delta V \quad (4.13)$$

ここで S_{fp} は離散化式の強制項, β は強制項の係数, a_p は離散化式の係数, u_p は速度, u_s は格子点 P に存在する構造物の速度, ΔV は計算格子の体積, D_p は仮想粒子径, C_1, C_2 : 無次元定数, γ_1, γ_2 : 固相体積率の関数, μ_L : 液相粘性, ρ_L : 液相密度である. 式(4.13)の最後の式の右辺第一項, 第二項はそれぞれ層流および乱流における抵抗力の効果を模擬している.

これより係数 β を求めると式(4.14)になる.

$$\beta = \frac{C_1 \gamma_1 \frac{\mu_L}{D_p^2} \cdot \Delta V + C_2 \gamma_2 \frac{\rho_L |u_p - u_s|}{D_p} \cdot \Delta V}{a_p + C_1 \gamma_1 \frac{\mu_L}{D_p^2} \cdot \Delta V + C_2 \gamma_2 \frac{\rho_L |u_p - u_s|}{D_p} \cdot \Delta V} \quad (4.14)$$

本章では D_p は計算格子の 1/10 と設定した. 一方, 次節以降に示すように, γ_1, γ_2 の関数形および定数 C_1, C_2 には, できるだけ汎用性のある関数形と値を探索, 選定した.

4.3 計算方法の検証

4.3.1 二次元円柱周りの流れの Re 数依存性

二次元の円柱周りの流れの計算により構築した方法の予測精度を検証する. この流れはカルマン渦の研究で系統的によく調べられており, Re 数が大きくなるにつれて, 層流(定常軸対称流) - 遷移流(カルマン渦列) - 乱流と流れが変化していく. また, 円柱が流体から受ける抗力・揚力およびその振動周波数のデータも揃っている. 従って, 検証データとして非常に適した流れといえる. ただし, この流れは, 円柱表面からの渦の剥離という予測の難しい現象を含んでおり, 境界適合格子による細かい計算格子を用いた計算でも, 特に高 Re 数においては予測精度の高い結果は得られていない[7].

図 4.2 に計算領域と境界条件を示す. 計算領域は, 円柱径を 1 として幅 10, 長さ 20 とした. この計算領域を, 0.15625 の等間隔計算格子で, 64(幅) x 128(長さ) = 8192 に分割した. この場合の円柱の直径に相当する格子数は 6.4 である. 円柱の中心の位置は, 図左の流入口から 5 および側壁から 5 の位置に設定した. 境界条件は, 流入口で速度 $U_\infty = 1$, 出口で圧力勾配無し, 側壁ではすべり有りとした. 密度を 1, 代表長さを円柱直径として, 粘性係数をパラメーターにして Re 数を 1 から 10000 まで変化させた. 境

界層の取扱い方法に使用した γ_1 と γ_2 および C_1 と C_2 を表4.1に示す。なお、この系の計算では時間刻みが抗力や揚力に大きな影響を及ぼすため[7]、本計算では、多くの文献と同じように、クーラン数 $C(C = U_\infty \Delta t / \Delta x$: Δt は時間刻み, Δx は空間刻み)が0.1となるように時間刻みを設定した。

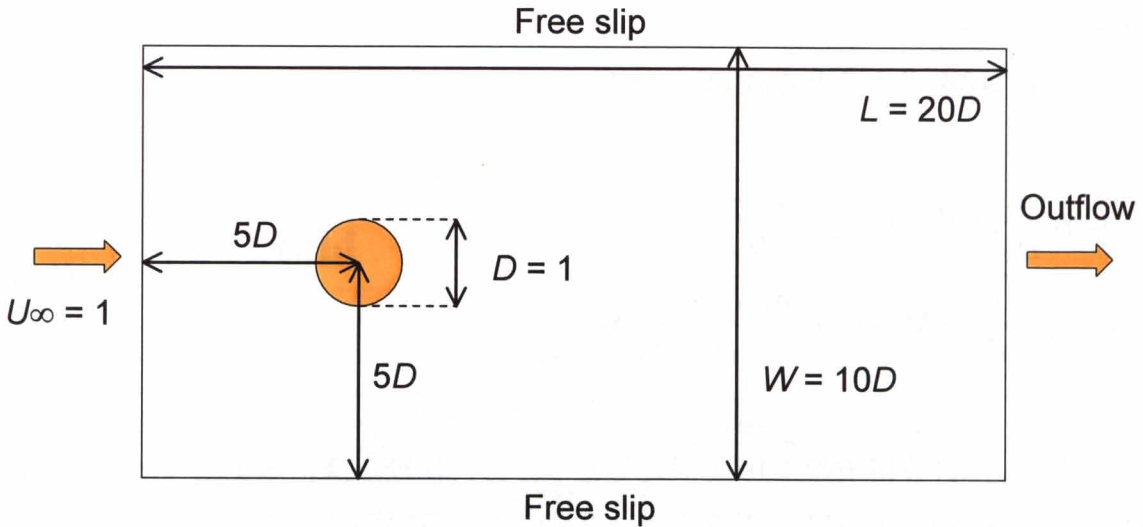


図 4.2 二次元円柱周り流れの計算領域

表 4.1 使用した γ_1 , γ_2 の関数形および無次元定数 C_1 , C_2

	$\gamma_1 = \frac{(\alpha_s)^2}{(1 - \alpha_s)}$	$\gamma_2 = \alpha_s$
法線方向	$C_1 = 10.0$	$C_2 = 10.0$
接線方向	$C_1 = 0.05$	$C_2 = 0.05$

各 Re 数における圧力分布を図4.3に、流線を図4.4に示す。 Re 数が大きくなるに従って、軸対称の閉じた流線($Re=1$)、軸対称双子渦($Re=40$)、カルマン渦列($Re \geq 60$)と、流れの変化がとらえられている。また、双子渦からカルマン渦列への遷移は Re 数が40と60の間で起こり、これまでに報告されているものと同様である[8]。これにより、渦粘性の効果が低 Re 数領域では働かず、狙い通りの効果が出ていることがわかる。

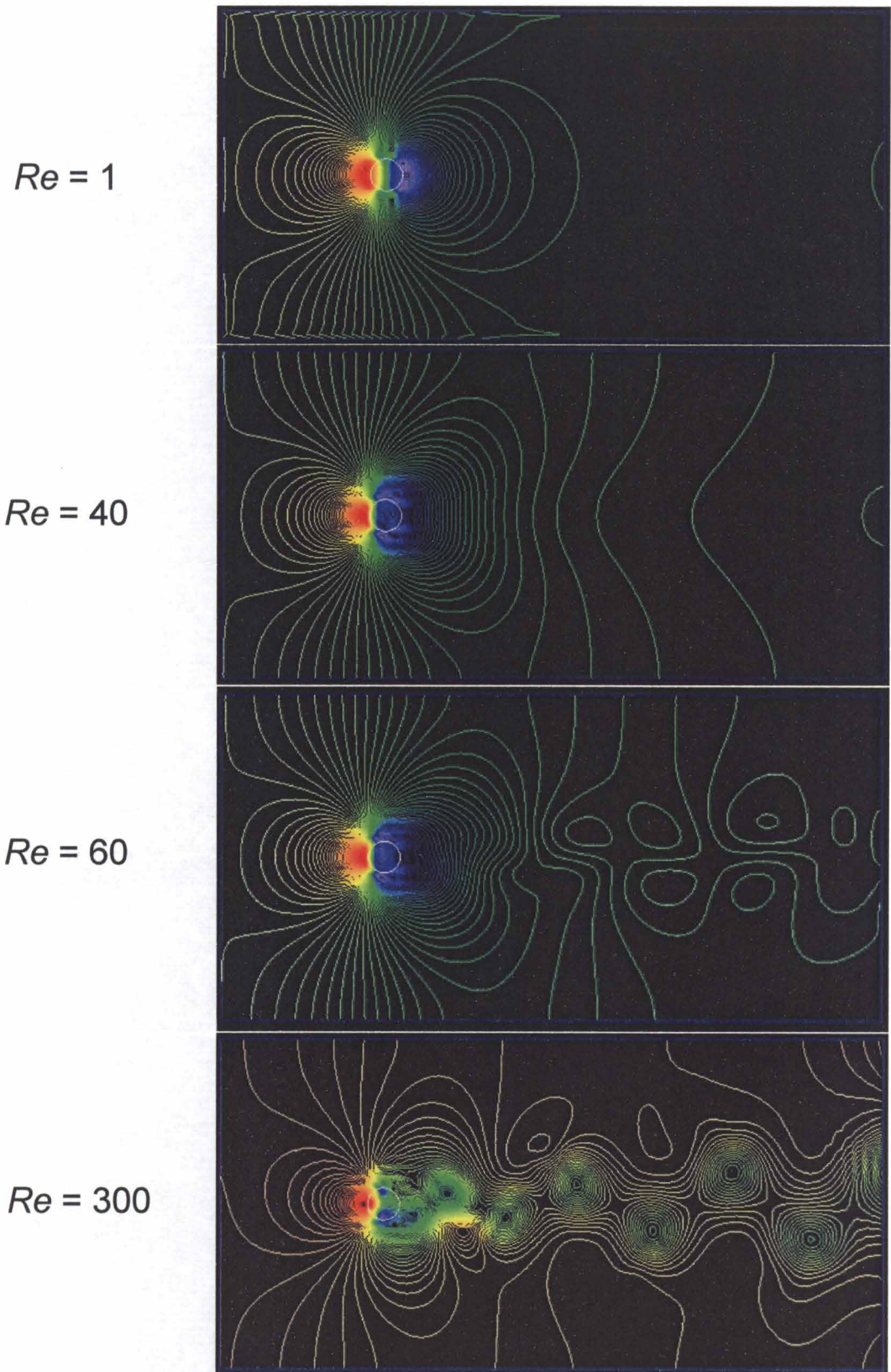


図 4.3 二次元円柱周りの流れの圧力分布の Re 数依存性

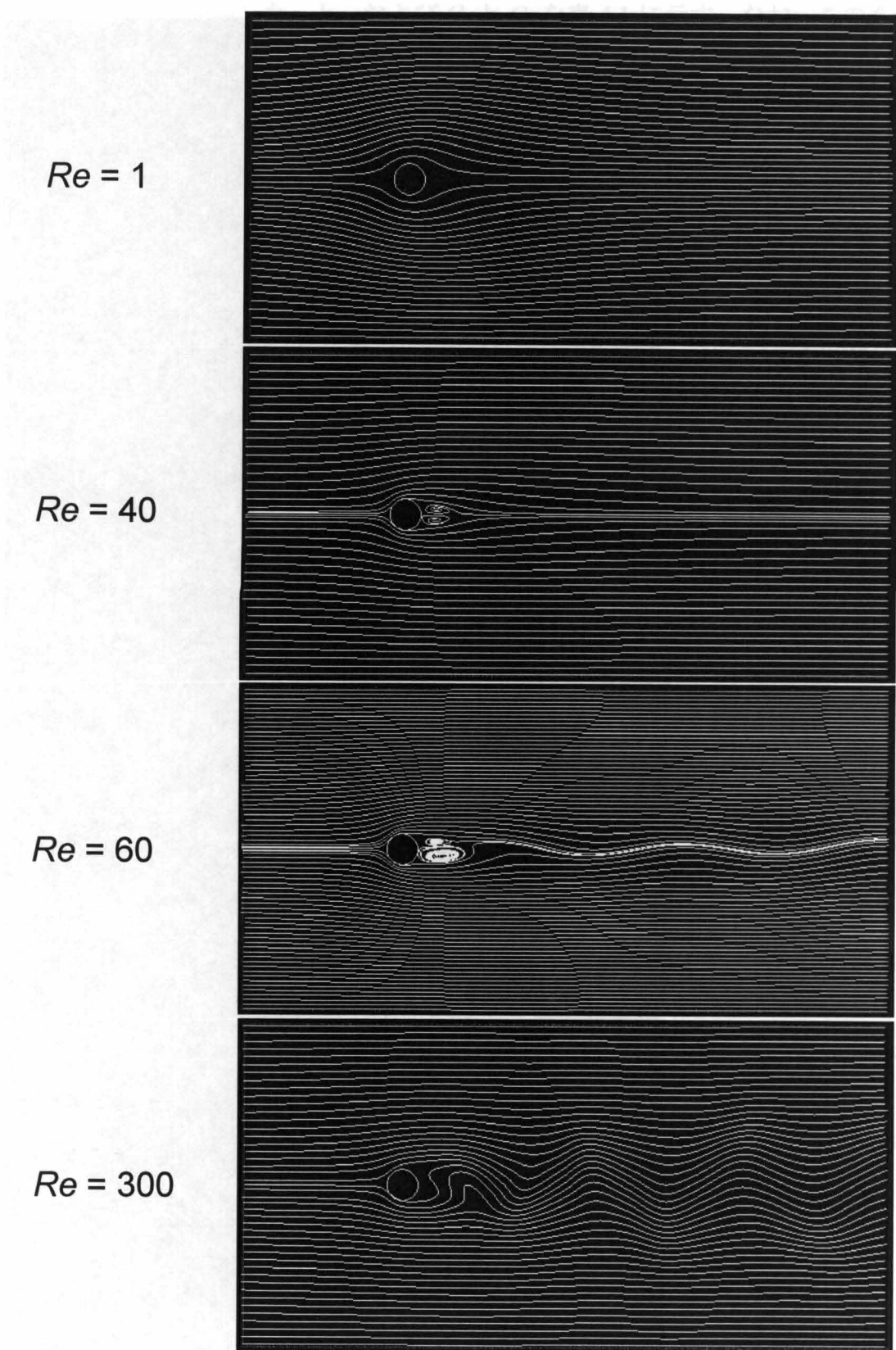


図 4.4 二次元円柱周りの流線の Re 数依存性

次に、円柱が受ける抗力から抗力係数を計算し図 4.5 に示した。横軸は Re 数、縦軸は抗力係数である。図には、渦粘性を考慮しない計算結果($Re \leq 300$, それ以上は計算が発散), Wieselsberger の実験結果[9], 雷ら[10]のカットセル法による計算結果も比較データとして載せている。渦粘性を考慮した計算は、実験値やより詳細な計算であるカットセル法の結果と良く一致している。また、低 Re 数領域では、渦粘性を考慮していない計算結果とも良く一致しており、本章で構築した乱流および境界層の簡易取扱い方法は、層流から乱流までの広い範囲に適用可能であることが示された。

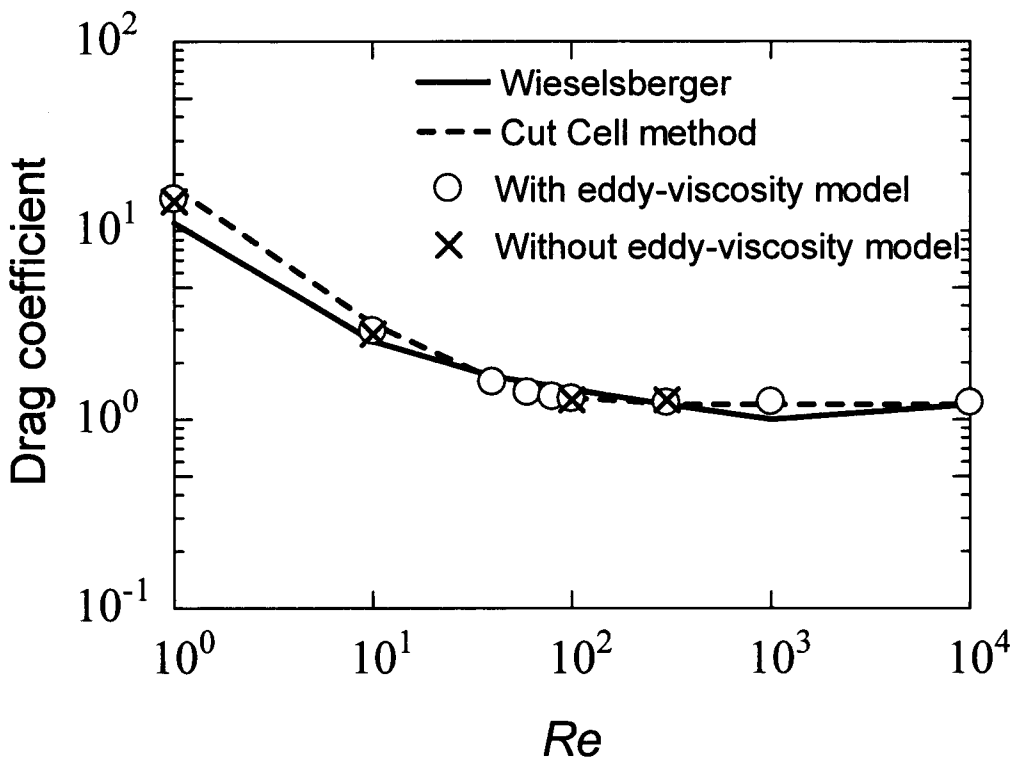


図 4.5 二次元円柱周りの流れの抗力係数の Re 数依存性

次に、揚力の振動数から求めたストローハル(S_t : Strouhal)数の Re 数依存性を図 4.6 に示す。 S_t 数は式(4.15)を用いて計算した。

$$S_t = \frac{f_L D}{U_\infty} \tag{4.15}$$

ここで f_L は計算で得られた揚力の振動数, D は円柱径(=1)である. 横軸は Re 数, 縦軸は S_f 数である. 図には, 渦粘性を考慮しない計算結果($Re \leq 300$, それ以上は計算が発散), 実験データ(JSME ハンドブック[11]), 雷ら[10]のカットセル法による計算結果も比較データとして載せている. 渦粘性無しとカットセル法は実験データより大きな値となっているが, 渦粘性有りの計算は実験と良く合っている.

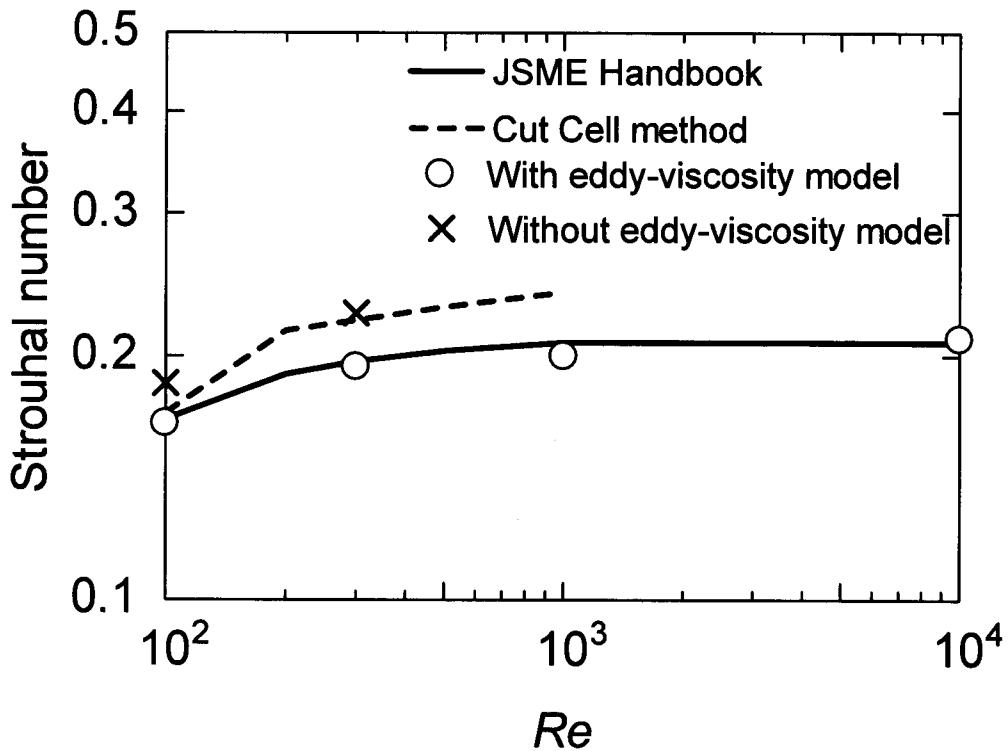


図 4.6 二次元円柱周りの流れのストローハル数の Re 数依存性

ところで, 本章で提案しているような固液境界面位置を厳密に取り扱わない方法では, 固液界面が計算格子内のどの位置にあるか(相対位置)によって計算結果が変わってくる可能性がある. 例えば, これまで示した計算と同じサイズの計算領域および円柱径の場合でも, 円柱が動く問題を計算する場合や, 計算格子数が異なる場合(より細かい計算格子またはより粗い計算格子)などでは, 計算格子内の固液界面の相対的な位置が今回の計算と異なってくる. このような場合でも, 計算結果に大きな差が生じない方法でなければならない. そこで, ①円柱位置をずらした計算と, ②格子分割を増減した計算を行い, 本方法の汎用性を検証した. ①では, 円柱の中心の基本位置を図 4.2 の位置とし, そこから 0.1 刻みで 0.8 まで円柱の中心を側壁方向(流れの主流方向に対して垂直な方向)にずらせて計算をした. ②では, 計算領域のサイズは同じで, 計算格子

の分割数を 62 x 124 から 66 x 132 まで変化させた 5 条件で計算した。①, ②とも Re 数は 300 とした。得られた抗力係数とそのバラツキを表 4.2 に示す。どちらの計算でも抗力係数に大きな差はない。

表 4.2 円柱中心位置および格子分割に対する抗力係数の変化

	円柱中心位置の変更	格子分割数の変更
平均抗力係数	1.29	1.27
標準偏差	0.05	0.11

さらに、本境界層の取扱い方法が無次元数である Re 数のみに依存していることを確認するために、同じ Re 数で、その定義、すなわち代表長さ、代表速度、密度および粘性を変えた場合にも同じ抗力係数を与えるか否かを検証した。計算で比較した Re の定義を表 4.3 に整理する。なおどちらの計算も Re 数を 300 とした。

表 4.3 Re 数の設定

	代表長さ	代表速度	密度	粘性
Re 数①	円柱径 1	入口流束 1	1	3.33e-3
Re 数②	円柱径 2	入口流束 0.5	2	6.66e-3

計算結果を表 4.4 に示す。 Re 数の定義を変えても抗力係数に大きな差はない。

表 4.4 Re 数の定義を変えた計算の比較(格子分割数 62,63,64,65,66 の平均)

	Re 数①	Re 数②
平均抗力係数	1.27	1.24
標準偏差	0.11	0.10

これまでの計算で、高精度で汎用性のある結果が得られたのは、式(4.14)の係数 β のモデル式と、表 4.1 の γ_1, γ_2 の関数形および定数 C_1, C_2 を用いたためである。これらを見出すまでに、他の様々な関数形と定数値を試しており、他の β モデルや、同じ β モデルであっても他の γ の関数形や C の定数値を用いた場合、抗力係数は大きくばらつく。例えば、 β のモデル式として、第3章のように固体表面の法線成分では β を1、接線成分

では α_s とにおいて、円柱の中心をずらしたり、計算格子を変えた計算を行った場合、 $\pm 50\%$ 程度のばらつきが生じた。また、式(4.16), (4.17)のような関数を使用した場合には、 $\pm 30\%$ 程度のばらつきが生じた。

$$\beta = \frac{\exp(Pe * \alpha_s) - 1}{\exp(Pe) - 1} \tag{4.16}$$

$$Pe = C_3 \frac{\rho_L \Delta x}{\mu_L} |u_p - u_s| \tag{4.17}$$

ここで C_3 は無次元定数である。

本章で用いた表 4.1 の関数形や定数値が最適なものはまだわからない。またその物理的な意味もまだ明確ではない。これらの関数形および定数値の物理的な意味を明らかにすることは今後の課題である。

4.3.2 三次元球周りおよび円柱周りの流れの Re 数依存性

三次元構造物として、球および円柱周りの流れにより本方法を検証した。球周りの流れも円柱と同様に系統的によく調べられており、球が流体から受ける抗力のデータも揃っている。図 4.7 に計算領域と境界条件を示す。計算領域は、球および円柱の

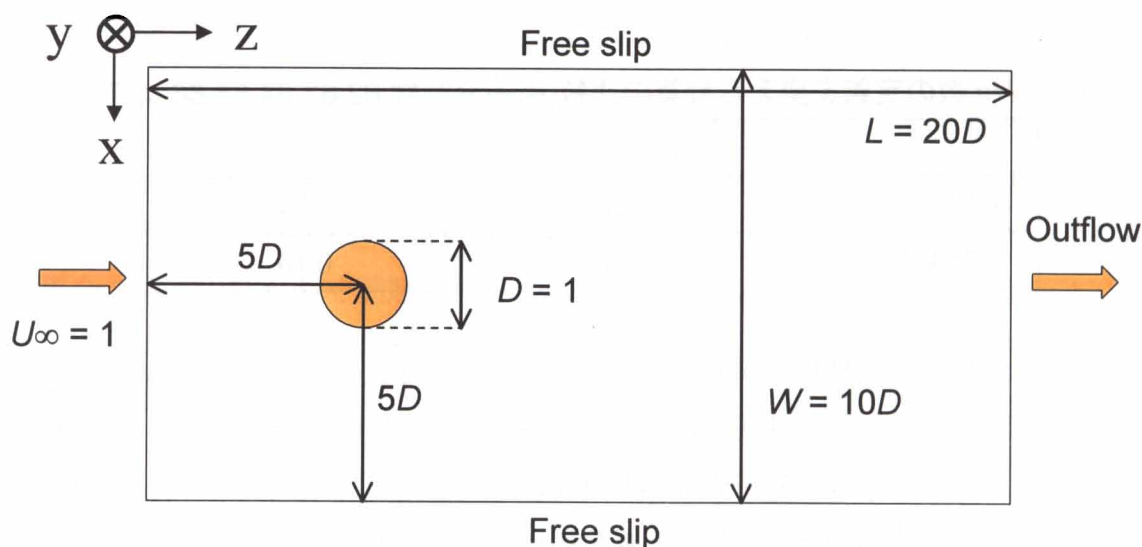


図 4.7 三次元球および円柱周りの流れの計算領域

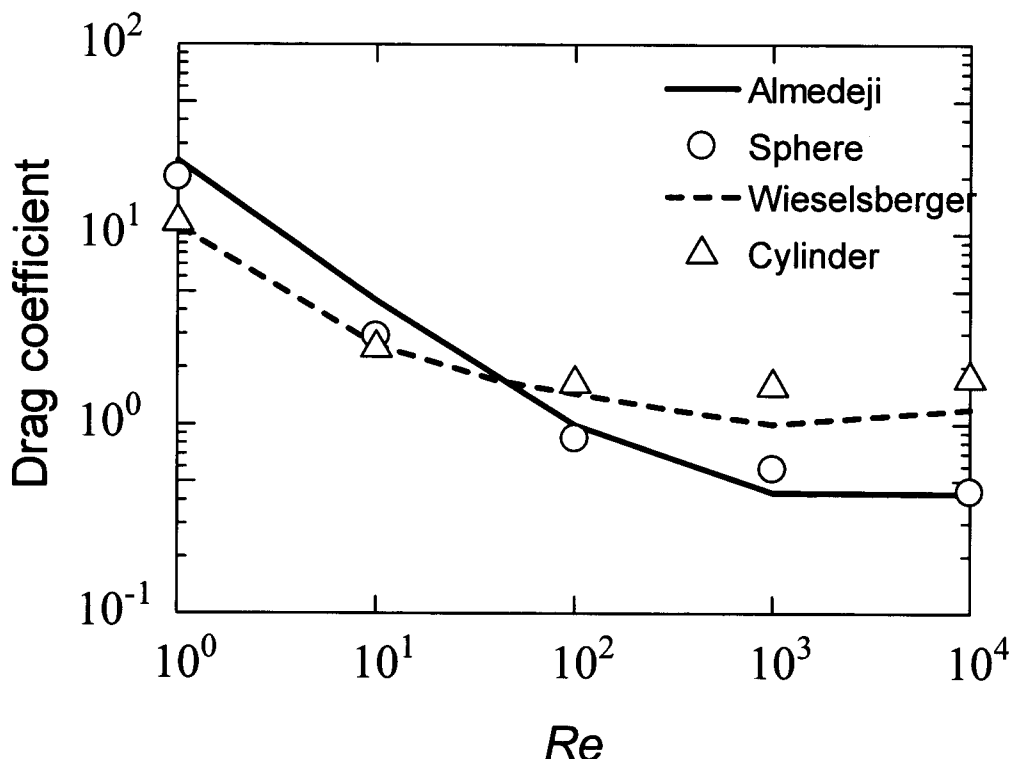
径を1として幅10, 奥行き10, 長さ20である。円柱の軸はy方向と一致している。この計算領域を, 0.15625の等間隔計算格子で, 64(幅) x 64(奥行き) x 128(長さ) = 524,288に分割した。この場合の球および円柱の直径に相当する格子数は6.4である。球の中心の位置は, x=5, y=5, z=5に設定した。また円柱の中心軸の位置は, z=5, x=5に設定した。境界条件は, 流入口で速度1, 出口で圧力勾配無し, 側壁ではすべり有りとした。密度を1, 代表長さを球および円柱の直径として, 粘性係数をパラメータにしてRe数を1から10000まで変化させた。境界層の取扱い方法に使用した γ_1 と γ_2 は表4.1と同じで, C_1 と C_2 には二次元とは異なる値を用いた。使用した関数形と C_i の値を表4.5に示す。

表 4.5 使用した γ_1, γ_2 の関数形および無次元定数 C_1, C_2

$\gamma_1 = \frac{(\alpha_s)^2}{(1-\alpha_s)}$		$\gamma_2 = \alpha_s$
法線方向	$C_1 = 0.02$	$C_2 = 0.02$
接線方向	$C_1 = 0.001$	$C_2 = 0.001$

球および円柱が受ける抗力から抗力係数を計算し図4.8に示した。横軸はRe数, 縦軸は抗力係数である。図には, 球に関しては, 多くの実験データのフィッティングから得られたAlmedejの式[12]による計算結果, 円柱に関しては, Wieselsbergerの実験結果[9]を比較データとして載せている。図より, 低Re数では球の方が円柱より抗力係数が大きく, 高Re数では円柱の方が球より抗力係数が大きくなる傾向が定性的に計算できている。また, 定量的にも, 二次元円柱周りの流れ程ではないが, 実験時と良く一致しており, 本方法の使用目的から判断すると十分な予測精度といえる。

二次元円柱周りのところでも言及したが, γ_1, γ_2 の関数形および無次元定数 C_1, C_2 の物理的な意味がまだ不明確であるとともに, 現時点での無次元定数 C_1, C_2 の最適値が二次元と三次元とで異なる理由も明らかではない。これらの理由を解明することは今後の課題である。しかしながら, このような粗い計算格子で, かつ離散化精度の低い計算スキームを用いても, 精度良く抵抗力を予測できるということは, 本章で構築した乱流および境界層の簡易取扱い方法は, 粗い格子における乱流の挙動を基本的にはうまく模擬していると考えられる。

図 4.8 三次元球と円柱周りの流れの抗力係数の Re 数依存性

4.4 第4章のまとめ

IB-NP2 法を層流 - 遷移流 - 乱流の全ての領域の流れに適用できる手法へと拡張することを目的として、乱流および境界層の簡易取扱い方法を検討した。本方法では、計算格子以下のスケールの渦の消散は数値粘性を利用した渦粘性モデルにより模擬し、また境界層厚みの変化を Darcy 則のアナロジーで模擬した。本章では、幅広い Re 数範囲の実験および理論解析データが整備されているという理由から、円柱および球周りの単相流れの計算により本方法の有効性を検証した。計算する流れの Re 数範囲を 1 ~ 10000 とし、流れの遷移、および、抗力係数とストローハル数について、これまで報告されている実験および計算と比較した。その結果、本方法によりレイノルズ数が 1 ~ 10000 の二次元円柱周りの流れの抗力係数およびストローハル数をより詳細な計算手法であるカットセル法と同等かそれ以上の精度で予測できること、レイノルズ数に応じた適切な渦粘性が自動的に求められること、およびレイノルズ数範囲が 1 ~ 10000 の三次元球および三次元円柱周りの流れの抗力係数も良好に予測できることを確認した。

第4章 乱流計算機能の追加

以上より，本章で構築した乱流計算機能により，粗い計算格子を用いた計算でも，層流から乱流にわたる広範囲のレイノルズ数の流れを良好に予測できることを実証した。

第4章の参考文献

- [1] 梶島岳夫, *乱流の数値シミュレーション*, 養賢堂 (1999)
- [2] Sato, Y. and Sekoguchi, K., Liquid Velocity Distribution in Two-Phase Bubble Flow, *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 2 (1975), pp. 79-95.
- [3] Ferziger, J. H., Peric, M., *Computational Methods for Fluid Dynamics*, New York, Springer, (2002).
- [4] von Neumann, J., Richtmyer, R. D., A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks, *J. of Applied Physics*, 21 (1950), pp. 232-237.
- [5] Smagorinsky, J., The beginnings of numerical weather prediction and general circulation modelling: early recollections. *Advances in Geophysics* 25 (1983).
- [6] Grinstein, F. F., Fureby, C., DeVore, C. R., On MILES based on flux-limiting algorithms, *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 47 (2005), pp. 1043–1051.
- [7] 松宮輝, 木枝香織, 谷口伸行, 小林敏雄, 三次精度風上差分法による二次元円柱周り流れの数値シミュレーション, *日本機械学会論文集*, 59B-566 (1993), pp. 2937-2943.
- [8] 日本流体力学会編, *流体力学ハンドブック*, 丸善(1998)
- [9] Wieselsberger, C., *New Data on the Laws of Fluid Resistance*, NACA TN 84 (1922).
- [10] 雷康斌, 岩田正子, 野田茂穂, 姫野龍太郎, カットセル直交等間隔格子による非圧縮粘性流のシミュレーション, *日本機械学会論文集*, 69B-682 (2003), pp. 1333-1340.
- [11] JSME, *JSME Handbook A5* (1986)
- [12] Almedeij, J., Drag coefficient of flow around a sphere Matching asymptotically the wide trend, *Powder Technology* 186 (2008), pp. 218–223.

第5章 気泡の合体・分裂モデルの検証

5.1 はじめに

気泡塔などの各種工業装置内にみられる気泡流の多くは、様々な大きさの気泡が数多く含まれる多分散気泡流である。この流れの数値予測には、数多くの気泡と複数の気泡サイズを扱える多流体モデルが適している。ただし、抗力・揚力などの相間相互作用力および気泡合体・分裂に関する信頼できるモデルがなければ、良好な予測は実現できない。

相間相互作用力に関して、前川ら[1]は、多流体モデルと一流体近似に基づく界面追跡法を統合した(N+2)-Fieldモデル(NP2モデル)[2]を用いて大小二種類の気泡からなる気泡流を数値計算し、良好な予測を実現できる抗力係数・揚力係数・仮想質量力係数の相関式の組み合わせを提示している。

一方、気泡の合体・分裂に関しては、前川ら[3]は、幅200mm、奥行き200mm、高さ1500mmの気泡塔内の、気相空塔速度が0.035 m/sの気泡流において、気泡塔内気泡流に及ぼす入口気泡径の影響を実験的に調べ、合体・分裂頻度が高い多分散気泡流における気相体積率分布、気泡径分布のデータを取得している。本データには、①気泡合体が支配的な流れ、②気泡分裂が支配的な流れ、③合体と分裂がほぼ同等な流れのデータが含まれているため、合体・分裂モデルの検証に適したデータといえる。このデータを用いて前川ら[4]は既存の合体・分裂モデルの検証を行い、上記三つの条件における全ての流れに適用可能な合体・分裂モデルを選定している。選定された気泡分裂モデルはLuoら[5]のモデル、気泡合体モデルはPrinceらのモデル[6]とWangらのモデル[7]を組み合わせたモデルである。Luoらのモデルでは気泡と乱流渦の衝突を主たる分裂機構としている。Princeらのモデルでは、他の多くの気泡合体モデルで考慮されている乱流速度変動に起因する二気泡の衝突過程に加えて、気泡径の差に起因する気泡速度の相違、および液相速度勾配による気泡速度の相違に起因する二気泡の衝突過程を考慮している。また、Wangらは、大気泡伴流への後続小気泡の巻き込みに起因する気泡合体過程をモデル化している。

前川らによって検証および選定されたこれらの合体・分裂モデルは、様々な合体・分裂頻度に対して良好な予測を与えるモデルではあるが、合体・分裂が殆ど生じない

流れも良好に予測できなければ、適正なモデルとはいえない。さらに、構造、サイズ、気相空塔速度の異なる気泡塔内気泡流を良好に予測できなければ汎用性のあるモデルとはいえない。特に、大型気泡塔における高気相空塔速度条件における気泡流を良好に予測できることは、工業設備の検討で重要となるスケールアップ問題に活用するための必要条件である。しかし、合体・分裂が殆ど生じない低気相空塔速度条件における気泡塔内気泡流の気相体積率分布と気泡径分布の実験データはみうけられない。また、高気相空塔速度条件における大型気泡塔内気泡流の実験データもみあたらない。そこで本章では、前川らが検証した合体・分裂モデルをNP2モデルに組み込み、合体・分裂がほとんど起こらない流れを含む、構造・サイズ・気相空塔速度の異なる流れを対象として数値計算を行い、その妥当性を検証することを目的とした。このため、二種の低気相空塔速度条件における小型気泡塔内気泡流を対象とした実験を行い、妥当性検証用の気相体積率分布、気泡径分布のデータを取得した。さらに、三種の高気相空塔速度条件における大型気泡塔内気泡流を対象とした実験も行い、気相体積率分布を取得した。

5.2 計算手法

5.2.1 基礎方程式

図 5.1 に示すような、連続液相、連続気相および様々な大きさの気泡からなる流れ場を考える。連続液相 L および連続気相 G には一流体近似を適用する。気泡は大きさによって N 種の分散相グループ m ($1 \leq m \leq N$) に分類する。

各相の体積率 $\alpha_L, \alpha_G, \alpha_m$ は次式を満たす。

$$\alpha_G + \alpha_L + \sum_{m=1}^N \alpha_m = 1 \quad (5.1)$$

本章では、気液両相とも非圧縮性ニュートン流体と仮定する。また、相変化と気泡内部における粘性応力と乱流拡散は無視する。本仮定より、各相の質量保存式は以下のように表せる。

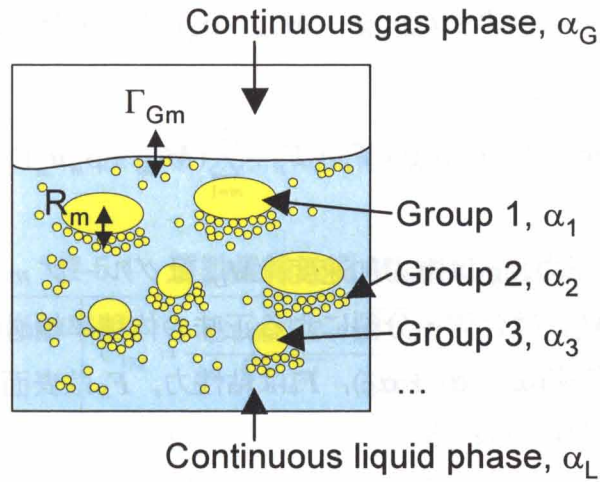


図 5.1 連続液相, 連続気相および様々な大きさの気泡が混在する流れ

$$\frac{\partial \alpha_m}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_m \mathbf{u}_m = -\Gamma_{Gm} + R_m \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial \alpha_G}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_G \mathbf{u}_c = \sum_{m=1}^N \Gamma_{Gm} \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial \alpha_L}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_L \mathbf{u}_c = 0 \quad (5.4)$$

ここで、 t は時間、 \mathbf{u}_m は分散相速度、 \mathbf{u}_c は一流体近似された連続相混合体の速度、 Γ_{Gm} は気泡グループ m から連続気相への体積輸送、 R_m は気泡の合体・分裂によるグループ m への正味の体積率輸送である。なお、計算セルサイズよりも大きな気泡を扱う場合、式(5.2)を用いると非物理的な誤差が生じる。この誤差を回避するため、以下の数密度 n_m の輸送方程式を解いた後に、 n_m から α_m を算出する[2]。

$$\frac{\partial n_m}{\partial t} + \nabla \cdot n_m \mathbf{u}_m = -\varphi_{Gm} + \phi_m \quad (5.5)$$

ここで、 φ_{Gm} はグループ m から連続気相への数密度輸送、 ϕ_m は合体・分裂によるグループ m への正味の数密度輸送である。分散相 m および連続相混合体の運動量保存式には次式を用いる。

$$\alpha_m \rho_m \left(\frac{\partial \mathbf{u}_m}{\partial t} + \mathbf{u}_m \cdot \nabla \mathbf{u}_m \right) = -\alpha_m \nabla P + \alpha_m \rho_m \mathbf{g} - (\mathbf{M}_{Lm} + \rho_m \mathbf{u}_m \Gamma_{Gm} + \mathbf{M}_{Rm}) \quad (5.6)$$

$$\alpha_c \rho_c \left(\frac{\partial \mathbf{u}_c}{\partial t} + \mathbf{u}_c \cdot \nabla \mathbf{u}_c \right) = -\alpha_c \nabla P + \alpha_c \rho_c \mathbf{g} + \mathbf{F}_v + \mathbf{F}_s + \sum_{m=1}^N (\mathbf{M}_{Lm} + \rho_m \mathbf{u}_m \Gamma_{Gm}) \quad (5.7)$$

ここで、 ρ は密度、 P は圧力、 \mathbf{g} は重力加速度、 \mathbf{M}_{Lm} はグループ m の分散相と連続液相間の相間運動量輸送、 \mathbf{M}_{Rm} は合体・分裂による正味の体積率輸送に伴う運動量輸送、 α_c は連続相混合体の体積率($\alpha_c = \alpha_L + \alpha_G$)、 \mathbf{F}_v は粘性力、 \mathbf{F}_s は表面張力である。連続相混合体の密度 ρ_c は次式で与えられる。

$$\rho_c = (\rho_L \alpha_L + \rho_G \alpha_G) / \alpha_c \quad (5.8)$$

運動量輸送項 \mathbf{M}_{Lm} は、仮想質量力、抗力、揚力および乱流分散力からなる次式で評価する。

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{Lm} = & \alpha_m C_{VM} \rho_L \left(\frac{D\mathbf{u}_m}{Dt} - \frac{D\mathbf{u}_c}{Dt} \right) + \frac{1}{8} a_{\text{int}m} C_{Dm} \rho_L |\mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c| (\mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c) \\ & + \alpha_m C_{Lm} \rho_L (\mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c) \times \nabla \times \mathbf{u}_c + C_{TDm} \rho_L k_{Lm} \nabla \alpha_m \end{aligned} \quad (5.9)$$

ここで、 C_{VM} は仮想質量係数、 a_{int} は界面積濃度、 C_D は抗力係数、 C_L は揚力係数、 C_{TD} は乱流分散係数、 k_L は乱流エネルギー、 D/Dt は物質微分である。これら各種係数には、表 5.1 に示す関連式[1], [8], [9]を使用する。なお、表 5.1 中の各種無次元数の定義を表 5.2 に整理しておく。

粘性力 \mathbf{F}_v 、表面張力 \mathbf{F}_s には次式を用いる。

$$\mathbf{F}_v = \nabla \cdot \left\{ \frac{\alpha_c^2}{\alpha_G / \mu_G + \alpha_L / \mu_{eL}} [\nabla \mathbf{u}_c + (\nabla \mathbf{u}_c)^T] \right\} \quad (5.10)$$

$$\mathbf{F}_s = \alpha_c \sigma \kappa \delta_s \mathbf{n}_s \quad (5.11)$$

ここで、 μ_{eL} は連続液相の実効粘性係数、上付添字 T は転置、 σ は表面張力、 κ は気液界面の平均曲率、 δ_s は界面上以外でゼロとなるデルタ関数、 \mathbf{n}_s は界面の単位法線ベクトルである。 μ_{eL} には、液相粘性係数 μ_L に気泡誘起乱流粘性を加えた以下の式を用いる。

$$\mu_{eL} = \mu_L + \rho_L \sum_{m=1}^N C_{\mu m} d_m \alpha_m |\mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c| \quad (5.12)$$

ここで、 d_m は気泡グループ m のザウタ平均気泡径であり、係数 $C_{\mu m}$ は 0.6 とする[10].

表 5.1 運動量輸送項 M_{Lm} 中の相関式

Virtual mass coefficient, C_{VM} [11]	$C_{VM} = \frac{E \cos^{-1} E - \sqrt{1 - E^2}}{E^2 \sqrt{1 - E^2} - E \cos^{-1} E}$
Aspect ratio, E [12] (= b/a)*	$E = \begin{cases} 1, & \text{for } Ta \leq 1 \\ \{0.81 + 0.206 \tanh[2(0.8 - \log_{10} Ta)]\}^3, & \text{for } 1 < Ta \leq 39.8 \\ 0.24, & \text{for } 39.8 < Ta \end{cases}$
Drag coefficient, C_D [13]**	$C_D = \max \left[\min \left\{ \frac{A}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}), \frac{3A}{Re} \right\}, \frac{8Eo}{3Eo + 12} \right]$
Lift coefficient, C_L [14]	$C_{LF} = \begin{cases} \min[0.288 \tanh(0.121 Re), f(Eo_d)], & \text{for } Eo_d < 4 \\ f(Eo_d), & \text{for } 4 \leq Eo_d < 10.7 \\ -0.29, & \text{otherwise} \end{cases}$ $f(Eo_d) = 0.00105 Eo_d^3 - 0.0159 Eo_d^2 - 0.0204 Eo_d + 0.474$
Turbulent dispersion coefficient, C_{TD} [15], [16]	$C_{TD} = 2.0$
Turbulent kinetic energy, k_L [15]	$k_{Lm} = \alpha_m \mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c ^2$

* a, b : the major and minor axes of an ellipsoidal bubble, ** $A = 16$ for pure system, $A = 24$ for slightly contaminated system

表 5.2 表 5.1 中の各種無次元数

Bubble Reynolds number*	Eötvös number	Morton number	Tadaki number
$Re = \frac{\rho_L \mathbf{u}_m - \mathbf{u}_c d}{\mu_L}$	$Eo = \frac{g(\rho_L - \rho_G) d^2}{\sigma}$	$M = \frac{g \mu_L^4 (\rho_L - \rho_G)}{\rho_L^2 \sigma^3}$	$Ta = Re M^{0.23}$
	$Eo_d = \frac{g(\rho_L - \rho_G) a^2}{\sigma}$		

* d : the sphere-volume equivalent diameter

5.2.2 気泡の合体・分裂モデル

前川らが選定した合体・分裂モデルを説明する。気泡の合体・分裂による数密度輸送 ϕ_m の評価には、ボルツマン方程式の考え方に基づいて導出されたモデル[17]-[19]を用いる。本モデルでは、合体は二気泡間で起こり、また気泡が分裂する際は一つの気泡がサイズの異なる二つの気泡に分裂すると仮定する。合体・分裂により生じる気泡の数密度を各分散相グループに分配する方法には、Kumar ら[20]が提案した分配則を採用する。以上より、式(5.5)右辺の ϕ_m は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \phi_m = & \sum_{m \leq k} \zeta_{mk} n_k - \frac{n_m}{\theta_m} \int_0^{\theta_m^B} \theta' P_B(\theta', \theta_m) d\theta' \\ & + \sum_{\substack{k, l \\ \theta_m^B \leq \theta_k + \theta_l \leq \theta_{m+1}^B}} \frac{1}{2} \eta_{kl} n_k n_l P_C(\theta_k, \theta_l) - n_m \sum_{k=1}^N P_C(\theta_m, \theta_k) n_k \end{aligned} \quad (5.13)$$

ここで、 $P_B(\theta', \theta_m)$ は体積 θ_m のグループ m の気泡が分裂して体積 θ' の気泡が生じる確率、 $P_C(\theta_k, \theta_l)$ は体積 θ_k と θ_l の気泡が合体して θ_m の気泡が発生する確率、 θ_m^B はグループ m と $m-1$ の境界の気泡体積である。 ζ_{mk} , η_{kl} は次式で与える。

$$\zeta_{mk} = \int_{\theta_m^B}^{\theta_{m+1}^B} \frac{\theta_{m+1} - \theta}{\theta_{m+1} - \theta_m} P_B(\theta, \theta_k) d\theta + \int_{\theta_m^B}^{\theta_{m+1}^B} \frac{\theta - \theta_{m-1}}{\theta_m - \theta_{m-1}} P_B(\theta, \theta_k) d\theta \quad (5.14)$$

$$\eta_{kl} = \begin{cases} \frac{\theta_{m+1} - (\theta_k + \theta_l)}{\theta_{m+1} - \theta_m}, & \text{for } \theta_m \leq \theta_k + \theta_l \leq \theta_{m+1}^B \\ \frac{(\theta_k + \theta_l) - \theta_{m-1}}{\theta_m - \theta_{m-1}}, & \text{for } \theta_m^B \leq \theta_k + \theta_l \leq \theta_m \end{cases} \quad (5.15)$$

気泡分裂は、Luo ら[5]のモデルに代表されるように、気泡と乱流渦の衝突を主たる分裂機構としてモデル化されることが多い[21], [22]。本章でも Luo モデルにより気泡分裂確率 P_B を評価する。気泡合体確率 P_C は、Prince らのモデル[6]により評価した合体確率 P_{C1} と Wang らのモデル[7]により評価した合体確率 P_{C2} の和($P_C = P_{C1} + P_{C2}$)として与える。Prince モデルでは、他の多くの気泡合体モデルで考慮されている乱流速度変動に起因する二気泡の衝突過程に加えて、気泡径の差に起因する気泡速度の相違、および

液相速度勾配に起因する気泡速度の相違に起因する二気泡の衝突過程を考慮している。一方、Wangらは、大気泡伴流への後続小気泡の巻き込みに起因する気泡合体過程をモデル化している。PrinceとWangのモデルを組み合わせることで、主な合体機構を全て考慮したことになる。

5.3 気泡塔内多分散気泡流の実験

5.3.1 低気相空塔速度気泡流

気泡合体・分裂頻度が極めて小さいデータを取得するために用いた小型気泡塔内気泡流の実験装置の概略を図5.2(a)に示す。気泡塔は透明アクリル樹脂製矩形容器で、その幅、奥行き、高さは各々84, 28, 340 mm、水力等価直径 D は42 mmである。気液各相には常温常圧の空気、水を用いた。初期水位を $z = 300$ mmとし、底部散気板に設けた直径0.51 mmの孔から空気を流入させた。図5.2(b)に示す孔数 $N_h = 5, 15$ の二種類の散気板を使用した。各孔から同一流量の空気を流入させるため、内径0.51 mm、長さ300 mmのステンレスパイプを各孔の下部に設けた。気相流量 Q_G 、 N_h の値は、Case 1 ($Q_G = 5 \times 10^{-6}$ m³/s, $N_h = 5$), Case 2 ($Q_G = 30 \times 10^{-6}$ m³/s, $N_h = 15$)の2ケースとした。微小空気流量であったため、 Q_G は水上置換法により測定した。測定誤差は $\pm 3\%$ である。 $z = 75, 175, 275$ mmにおいて気相体積率、気泡径を測定した。気相体積率測定には点電極プローブ法を用いた。各測定点につきサンプリング周波数4 kHzで15分間連続測定し時間平均気相体積率を求めた。気相体積率測定誤差は $\pm 2\%$ 以内である。一方、高速度ビデオカメラ (Redlake, MotionPro HS-1, フレームレート200 fps)を用いて撮影した気泡画像からプランニメータ (TAMAYA Digitizing Area-Line Meter, Super PLANIX β)を使用して気泡周長および投影面積を求め、これらの値から回転楕円体形状を仮定して気泡径を算出した。各測定位置において約300個の気泡を無作為抽出し、気泡径分布を求めた。

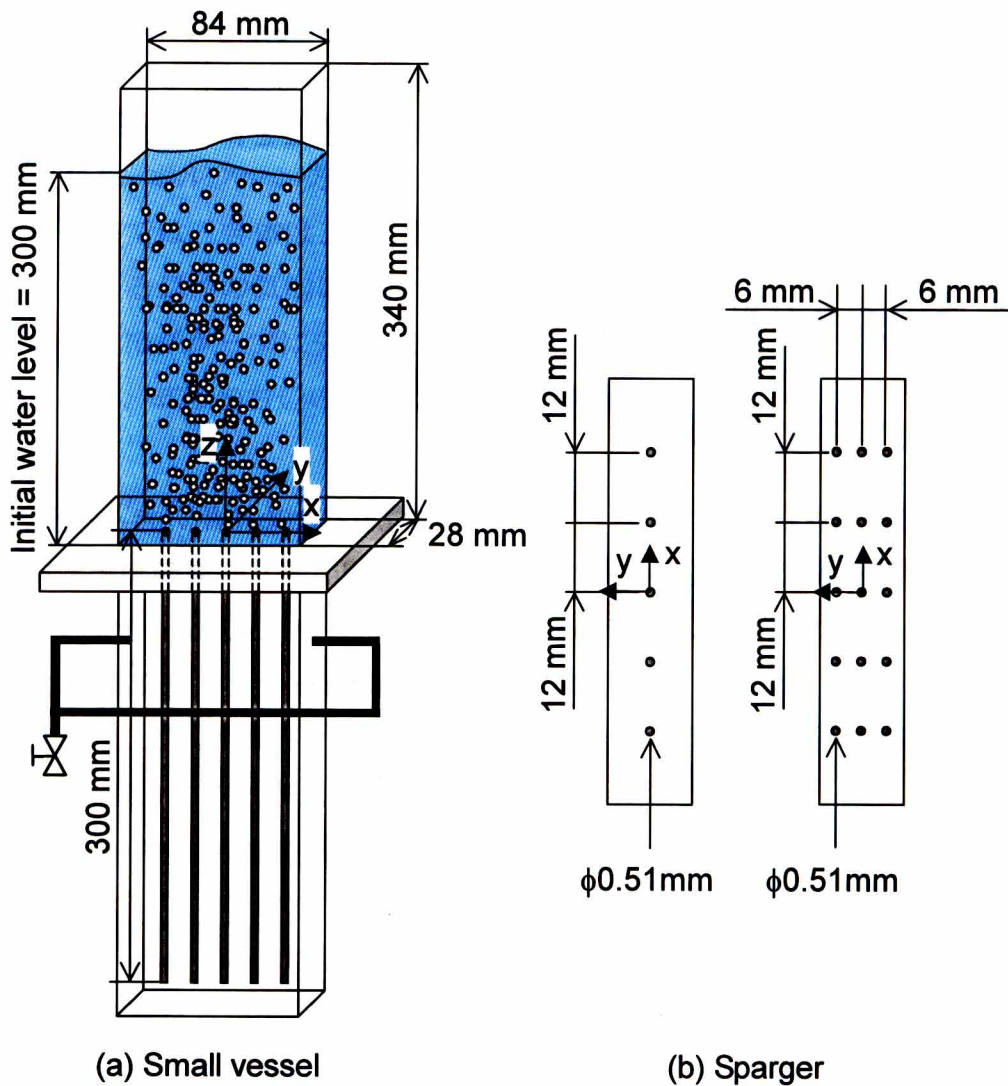


図 5.2 小気泡塔

5.3.2 大型気泡塔内気泡流

図 5.3 に大型気泡塔実験装置の概略を示す。気泡塔は直径 0.58 m、高さ 3.0 m の円筒形アクリル製容器である。気相、液相には各々常温常圧の空気、水を用いた。初期水位を $z=1.9$ m とし、塔底部散気板より気相を流入させた。散気板には孔径 1mm、孔数 300 個の気相流入孔が 30mm 間隔、三角配置で設置されている。気相空塔速度 U_G は 0.04, 0.12, 0.20 m/s の 3 条件とした。気相体積率の測定位置は、散気板からの高さが、 $z=200, 600, 1000, 1400, 1800$ mm で、それぞれ水平方向に装置中心から壁付近まで 40 mm 間隔

で7点の計35点である。気相体積率測定には点電極プローブ法を用いた。各測定点につきサンプリング周波数4 kHzで15分間連続測定し時間平均気相体積率を求めた。

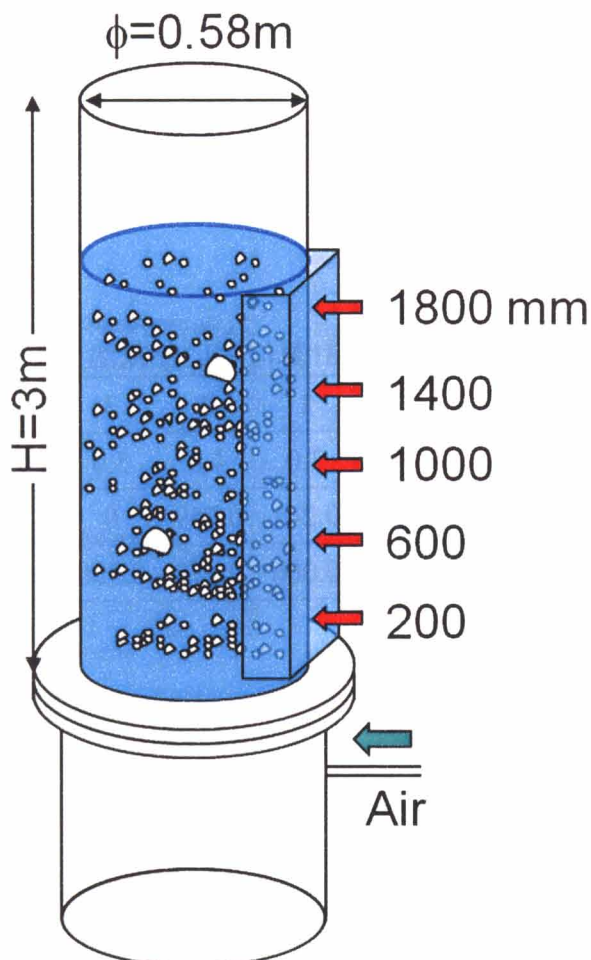


図 5.3 大型気泡塔

5.4 気泡合体・分裂モデルの検証

小型気泡塔は $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 4.0\text{ mm}$ の一樣格子(総セル数=12495), および $\Delta t=10\text{ ms}$ を用いて計算した. 表 5.3 に計算に用いた五種類の気泡グループと流入気相体積率を示す. Case 1 の撮影画像例と気相体積率分布計算結果を図 5.4 に示す. 黒は高気相体積率, 白は低気相体積率を表わす. 流入気泡はすぐに容器水平断面全体に広がり, 水平方向気相体積率分布は $z/D > 2$ ではほぼ一様となっている. 低気泡数密度のため合体・分裂頻度は極めて低い. 図 5.5 (a)は $z = 75, 175, 275\text{ mm}$ における水平断面内気相体積率分布で

ある。いずれの位置においても実験と計算は良く一致している。また、図 5.5 (b)に示すように、合体・分裂頻度が極めて低いために、気泡径分布が高さ方向に殆ど変化しない点も良好に予測できている。Case 2 の結果を図 5.6, 5.7 に示す。空気流入量を Case 1 の 6 倍としたため低頻度ではあるが気泡合体が生じ、Case 1 に比べ非均質な流れとなっている。図 5.7 (b)の気泡径分布からわかるように、気泡合体により大きな気泡の割合が z の増加に伴い増加する傾向も、定性的かつ定量的に良好に予測できている。以上より、前川らが選定した合体・分裂モデルは気泡合体・分裂が殆ど生じない流れにも適用できることがわかった。

表 5.3 小型気泡塔内の計算に用いた気泡グループ

Group		1	2	3	4	5
d [mm]		3.0	4.0	5.0	6.0	7.0
<i>Inlet volume rate</i>	Case 1	0.241	0.759	0	0	0
	Case 2	0.006	0.478	0.338	0.121	0.057

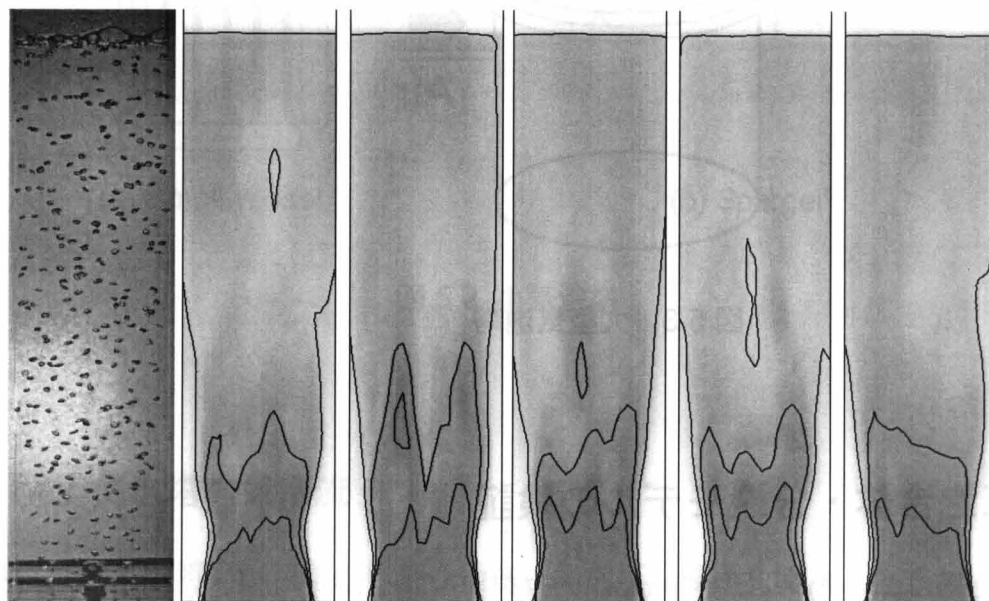


図 5.4 Case 1 の撮影画像例と気相体積率分布計算結果: $Q_G = 5.0 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$, $N_h = 5$
(Contour lines: $\alpha = 0.0 \sim 0.02$)

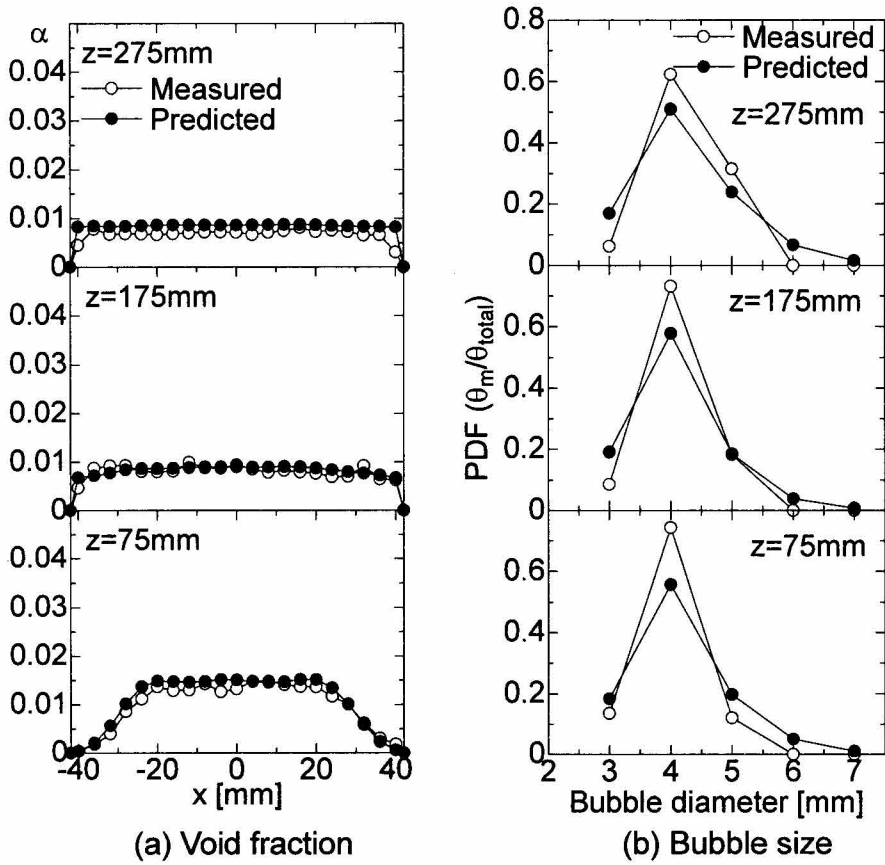


図 5.5 Case 1 における気相体積率と気泡径分布の測定値と計算値の比較

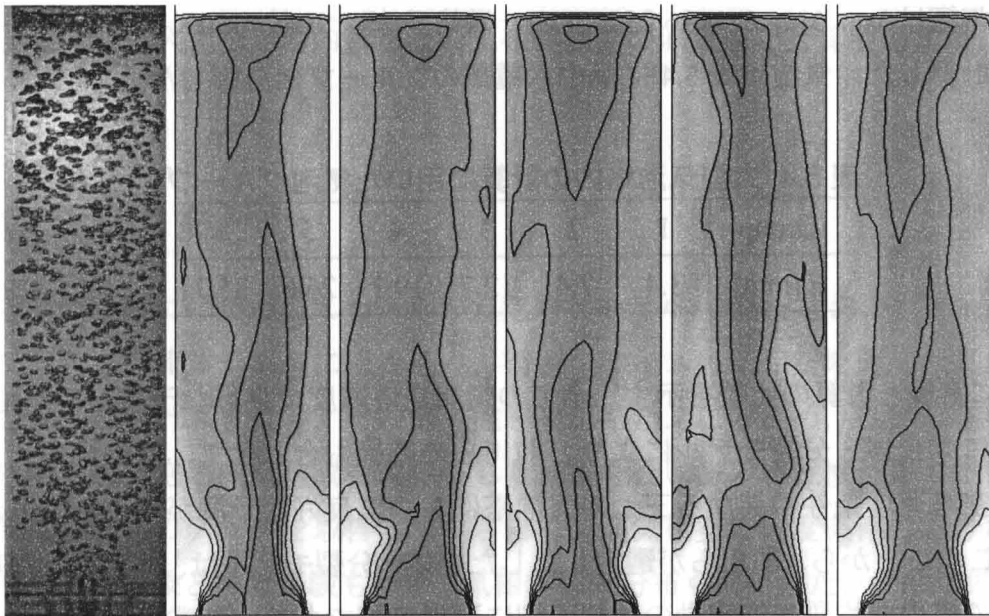


図 5.6 Case 2 の撮影画像例と気相体積率分布計算結果: $Q_G = 30 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$, $N_h = 15$
(Contour lines: $\alpha = 0.0 \sim 0.08$)

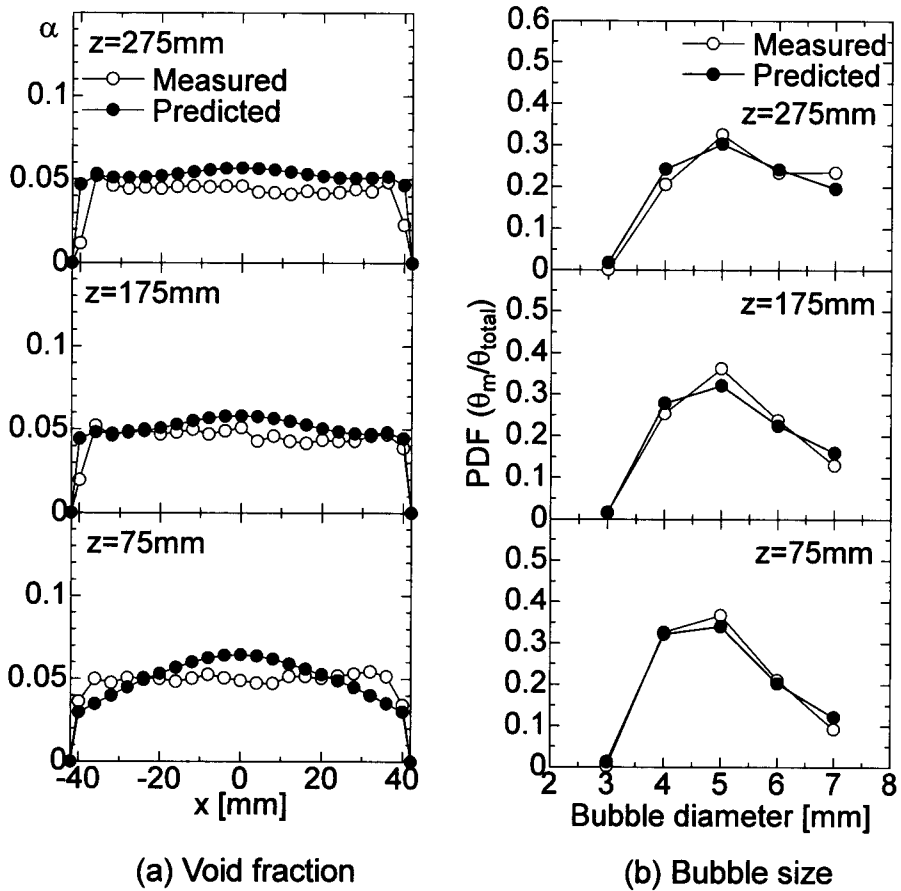


図 5.7 Case 2 における気相体積率と気泡径分布の測定値と計算値の比較

大型気泡塔は $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 36.25$ mm の一様格子(総セル数=65000), および $\Delta t=1.0$ ms を用いて計算した. 気泡は表 5.4 に示す六種類のグループに分割した.

表 5.4 大型気泡塔内の計算に用いた気泡グループ

Group	1	2	3	4	5	6
d [mm]	3.4	7.4	12.7	19.1	26.6	35.7

図 5.8 に実験と計算の比較を示す. 全ての気相空塔速度で良好な予測が行えている. このように本合体・分裂モデルにより、前川らの結果も合わせて、気泡塔形状、サイズ、気相空塔速度条件の異なる三つの気泡塔において良好な予測が行えることが確認された. このことから、前川らが選定した合体・分裂モデルは、他の様々な形状、運転条件の塔内非均質気泡流動の数値予測に適用可能であり、工業設備のスケールアップ検討にも活用できると考えられる.

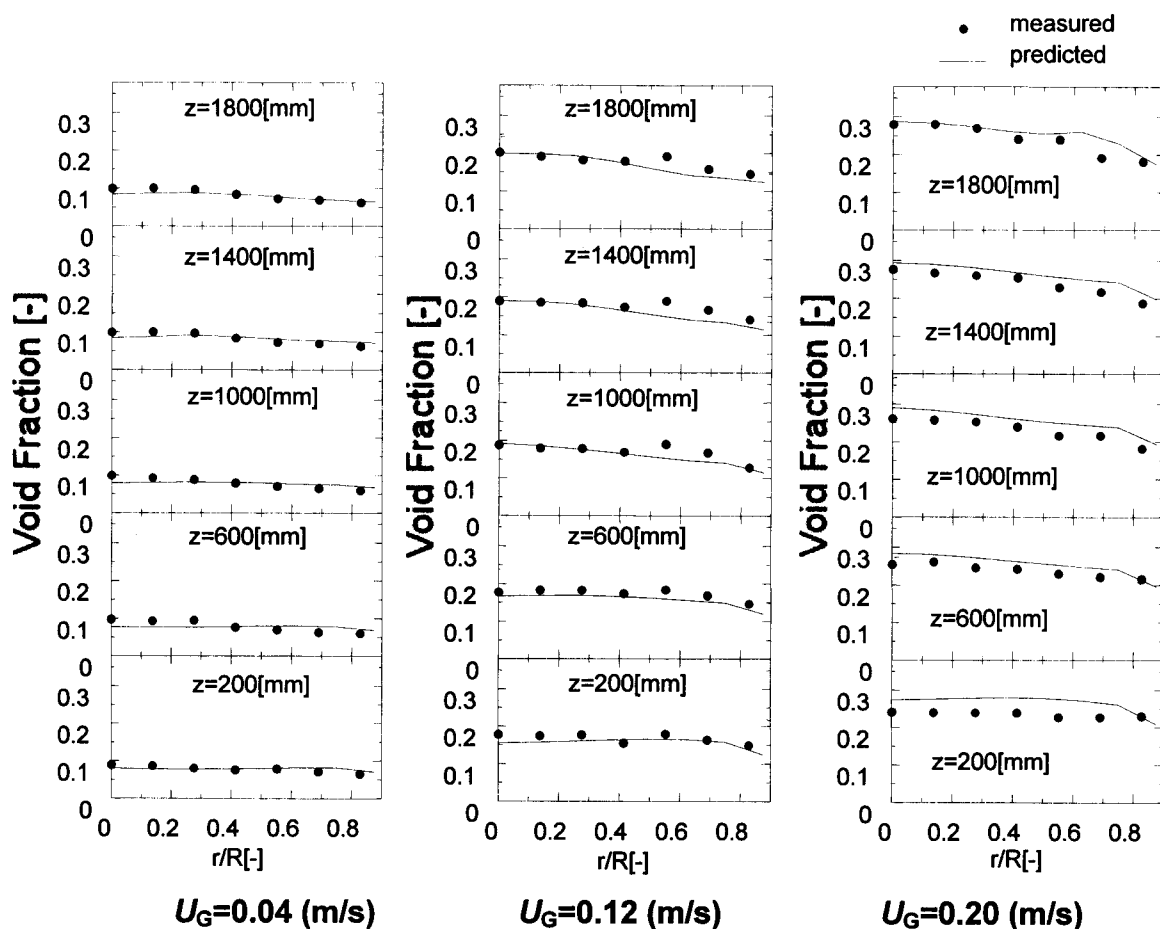


図 5.8 大型気泡塔内気泡流の気相体積率の測定値と計算値の比較

5.5 第5章のまとめ

前川らが検証および選定した Luo らの気泡分裂モデル, Prince らおよび Wang らの気泡合体モデルを多流体モデルに組み込み, 構造・サイズ・気相空塔速度の異なる流れを対象として数値計算を行い, その妥当性を検証した. このため, 低気相空塔速度条件における小型気泡塔内気泡流を対象とした実験を行い, 妥当性検証用の気相体積率分布, 気泡径分布のデータを取得した. さらに, 高気相空塔速度条件における大型気泡塔内気泡流を対象とした実験も行い, 気相体積率分布も取得した. その結果, 合体・分裂が殆ど生じない気泡塔内多分散気泡流における気相体積率分布および気泡径分布の空間発展を良好に予測できること, および構造の異なる大型気泡塔内の高気相空塔速度条件での流れの気相体積率分布も良好に予測できることを確認した.

第5章 気泡の合体・分裂モデルの検証

以上より、前川らが選定した合体・分裂モデルは、(a)合体が支配的な流れ、(b)分裂が支配的な流れ、(c)合体・分裂が同等に高頻度で生じる流れ、(d)合体・分裂が殆ど生じない流れの全てに適用可能であり、さらに、構造・サイズ、運転条件の異なる気泡塔内非均質気泡流動に対しても適用可能な汎用性を持つことを確認できた。

第5章の参考文献

- [1] Maekawa, M., Shimada, N., Sou, A., Tomiyama, A., Numerical Prediction of Heterogeneous Bubbly Flow using a Multi-Fluid Model, *Transaction of Japanese Society of Mechanical Engineering, Series B*, Vol. 72, No. 723, (2006), pp. 2680-2686.
- [2] Tomiyama, A., Shimada, N., (N+2)-Field Modeling for Bubbly Flow Simulation, *Computational Fluid Dynamics Journal*, Vol. 9, (2001), pp. 418-426.
- [3] Maekawa, M., Sou, A., Hosokawa, S., Tomiyama, A., Effects of Inlet Bubble Diameter on Bubbly Flow in a Bubble Column under High Gas Volume Flux Condition, *Transaction of Japanese Society of Mechanical Engineering, Series B*, Vol. 74, No. 742, (2008), pp. 1368-1375.
- [4] 前川宗則, 気泡塔内多分散気泡流の流動特性と数値予測モデルに関する研究, 神戸大学大学院自然科学研究科博士論文, (2008)
- [5] Luo, H., Svendsen, H. F., Theoretical Model for Drop and Bubble Breakup in Turbulent Dispersions, *AIChE Journal*, Vol. 42, No. 5, (1996), pp. 1225-1233.
- [6] Prince, M. J., Blanch, H. W., Bubble Coalescence and Break-up in Air-Sparged Bubble Columns, *AIChE Journal*, Vol. 36, No. 10, (1990), pp. 1485-1499.
- [7] Wang, T., Wang, J., Jin, Y., Theoretical Prediction of Flow Regime Transition in Bubble Columns by the Population Balance Model, *Chemical Engineering Science*, Vol. 60, (2005), pp. 6199-6209.
- [8] Hosokawa, S., Sou, A., Tomiyama, A., Multi-Fluid Simulation of Turbulent Bubbly Pipe Flows, *Proceedings of the 6th International Conference on Multiphase Flow*, CD-ROM, S6_Thu_B_52 (2007), pp. 1-8.
- [9] Tomiyama, A., Drag, Lift and Virtual Mass Forces Acting on a Single Bubble, *Proceedings of the 3rd International Symposium on Two-Phase Flow Modelling and Experimentation*, CD-ROM, (2004), pp. 1-10.
- [10] Sato, Y., Sekoguchi, K., Liquid Velocity Distribution in Two-Phase Bubble Flow. *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 2, (1975), pp. 79-95.
- [11] Lamb, H., *Hydrodynamics*, 6th edition, (1932), Cambridge University Press.
- [12] Vakhrushev, I. A., Efremov, G. I., *Chemistry and Technology of fuels and oils (USSR)* 5/6, (1970), pp 376-379.

- [13] Tomiyama, A., Kataoka, I., Sakaguchi, T., Drag Coefficient of Bubbles (1st Report, Drag Coefficient of a Single Bubble in a Stagnant Liquid), *Transaction of the Japanese Society of Mechanical Engineering, Series B*, Vol.1 61, No. 587, (1995), pp. 2357-2864.
- [14] Tomiyama, A., Tamai, H., Zun, I., Hosokawa, S., Transverse Migration of Single Bubbles in Simple Shear Flows, *Chemical Engineering Science*, Vol. 57, No. 11, (2002), pp. 1849-1858.
- [15] Lopez de Bertodano, M. A., Lahey, R. T. Jr., Jones, O. C., Phase Distribution in Bubbly Two-Phase Flow in Vertical Ducts, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 20, (1994), pp. 805-818.
- [16] Shimada, N., Tomiyama, A., Zun, I., Asano, H., Sensitivity Analysis of Closure Relations for Numerical Prediction of Bubbly Flow in a Bubble Column, *Kagaku Kogaku Ronbunshu*, Vol. 29, No. 6, (2003), pp. 778-786.
- [17] Kocamustafaogullari, G., Ishii, M., Foundation of the Interfacial Area Transport Equation and its Closure Relations, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 38, No. 3, (1995), pp. 481-493.
- [18] Millies, M., Mewes, D., Interfacial Area Density in Bubbly Flow, *Chemical Engineering and Processing*, Vol. 38, (1999), pp. 307-319.
- [19] Lehr, F., Millies, M., Mewes, D., Bubble-Size Distribution and Flow Fields in Bubble Column, *AIChE Journal*, Vol. 48, No. 11, (2002), pp. 2426-2443.
- [20] Kumar, S., Ramkrishna, D., On the Solution of Population Balance Equations by Discretization, I; A Fixed Pivot Technique, *Chemical Engineering Science*, Vol. 51, (1996), pp. 1311-1332.
- [21] Martinez-Bazan, C., Montanez, J. L., Lashras, J. C., On the Breakup of an Air Bubble Injected into a Fully Developed Turbulent Flow. Part I: Breakup Frequency, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 401, (1999), pp. 157-182.
- [22] Martinez-Bazan, C., Montanez, J. L., Lashras, J. C., On the Breakup of an Air Bubble Injected into a Fully Developed Turbulent Flow. Part II: Size PDF of the Resulting Daughter Bubbles, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 401, (1999), pp. 183-207.

第6章 結論

気相，液相，固相が混在し，その界面を通して物質や熱の移動が起こる多相多成分熱流動場は，化学，製鉄，発電などの工業プラントにおける多くの工業設備内にみられる．これらの工業設備の設計・開発・改良の効率化には，多相多成分熱流動の実用的数値予測技術が必要不可欠である．数多くのケーススタディーや感度解析が不可欠となる装置設計の絞込み段階では集中定数モデルや一次元モデルのように計算速度に優れるモデルが使用されるが，これらの簡易モデルは通常多くの実験相関式に基づくため，その適用範囲の拡大や予測精度向上が困難であるという問題を有する．また，装置の全体構造設計のために三次元計算を行なう際には計算時間の制約から比較的粗い計算格子を使用せざるを得ないが，粗い格子では，構造物と流れの干渉，乱流，相間相互作用などを良好に予測できないという問題がある．本研究では，気泡塔型反応装置を一つの具体的な設備対象としてこれらの問題の解決を図り，適用範囲を容易に拡大できる実用的な簡易多相多成分計算手法，および粗い計算格子でも装置構造，乱流，相間相互干渉を良好に予測できる実用的な三次元多相多成分計算手法の開発を目的とした．さらに，簡易多相多成分計算手法の適用範囲拡大を容易にする機能には，三次元多相多成分計算手法の計算結果を効率的に取り込んで利用できる仕組みが備わっていることも目的とした．

第2章では，実用的な気泡塔設計用計算手法として，反応生成物の定量的評価が可能な混合モデルに基づく計算手法の構築を目的とした．実用的な計算手法には，実機規模の計算対象を扱え，かつ計算コストが低い混合モデルが適している．しかしながら，従来の混合モデルでは，気相体積率などの巨視的変数を，限られた実験データに基づく実験相関式を用いて評価するため，手法の適用範囲および予測精度に課題がある．また，実験データの整備が進められた際，実験相関式の適用性と精度を向上させるには，必然的に相関式の再構築が必要になるが容易ではない．そこで本章では，装置構造や反応物物性などの多数の独立変数の関数である巨視的変数を，相関式なしに出力する新しい手段として人工ニューラルネットワーク(Artificial Neural Network: ANN)を利用し，これを実験相関式の役割をする相関器(ANN 相関器)ととらえ，混合モデルに組み込んだ新しい手法を構築した．まず，ANNの予測精度検証用実験データを取得す

るために、水 - 空気系気泡塔の気相体積率を測定した。次に、ANN と混合モデルを組み合わせた本手法の有効性を検証するために、フィッシャー・トロブシュ合成反応を対象として一酸化炭素転換率の数値予測を実施した。その結果、ANN 相関器により水 - 空気系気泡塔の気相体積率を良好に予測できること、ANN 相関器を組み込んだ混合モデルによりフィッシャー・トロブシュ合成反応における一酸化炭素転換率の各種パラメータ依存性を良好に予測できること、および ANN によれば新たなデータを用いた再学習により手法の適用範囲の拡大や予測精度向上を容易に達成できることを確認した。

以上より、従来の実験相関式を用いた手法が有する“限定された適用範囲とその範囲拡大の困難さ”という課題を解決した気泡塔設計用進化型計算手法の一つの雛型を開発できた。

第3章では、複雑な構造物を含む気泡塔内の気液混相流を予測するための、数値流体力学に基づく実用的計算手法を構築した。本手法は、富山と島田が提案した多流体モデルと界面追跡法を融合したハイブリッド法(N Plus 2 Field法 : NP2)に、埋め込み境界 (Immersed Boundary : IB)法を融合した手法(以後、IB-NP2法と呼ぶ)である。多流体モデルと界面追跡法の融合により、比較的粗い格子を用いても様々なスケールと相を含む混相流を効率的に計算できる。また埋め込み境界法により、複雑な格子の生成をしなくても複雑な流路幾何構造を取り扱える。本埋め込み境界法は、速度補間計算が不要であり、強制項にも様々なモデルを利用できる手法である。本章では、簡単な強制項モデルを組み込んで本手法の能力検証を行った。まず基本的な構造物周りの流れの予測精度を検証するために、円柱および角柱周りの单相流実験を行い液相流速分布を取得した。また同じ構造物周りの気泡流実験を行い気相体積率分布を取得した。次に、より複雑な構造物周りの流れの計算を行い、様々な形状に対する本手法の適用性を検証した。その結果、IB-NP2法により、円柱や角柱などの基本的な構造物周りの单相流の流速分布および気泡流の気相体積率分布を良好に予測できること、複雑な構造物周りの気泡流を複雑な格子生成無しで容易に計算できること、および固体体積率の入力データを変更するだけで構造物の形状を容易に変更できることを実証した。

以上より、複雑な格子生成なしで複雑幾何形状を有する流路内の気泡流を粗い格子で計算できる手法の雛型を開発できた。

第4章では、第3章で構築した IB-NP2 法を、層流 - 遷移流 - 乱流の全ての領域の流

れに適用できる手法へと拡張することを目的として、乱流および境界層の簡易取扱い方法を検討した。本方法では、計算格子以下のスケールの渦の消散は数値粘性を利用した渦粘性モデルにより模擬し、また境界層厚みの変化をダルシー則のアナロジーで模擬した。本章では、幅広いレイノルズ数範囲の実験および理論解析データが整備されているという理由から、円柱および球周りの単相流れの計算により本方法の有効性を検証した。計算する流れのレイノルズ数範囲を1~10000とし、流れの遷移、および、抗力係数とストローハル数について、これまで報告されている実験および計算と比較した。その結果、本方法によりレイノルズ数が1~10000の二次元円柱周りの流れの抗力係数およびストローハル数をより詳細な計算手法であるカットセル法と同等かそれ以上の精度で予測できること、レイノルズ数に応じた適切な渦粘性が自動的に求められること、およびレイノルズ数範囲が1~10000の三次元球および三次元円柱周りの流れの抗力係数も良好に予測できることを確認した。

以上より、本章で構築した乱流計算機能により、粗い計算格子を用いた計算でも、層流から乱流にわたる広範囲のレイノルズ数の流れを良好に予測できることを実証した。

第5章では、前川らが検証および選定したLuoらの気泡分裂モデル、PrinceらおよびWangらの気泡合体モデルをIB-NP2法の中の多流体モデルに組み込み、構造・サイズ・気相空塔速度の異なる流れを対象として数値計算を行い、その妥当性を検証した。このため、低気相空塔速度条件における小型気泡塔内気泡流を対象とした実験を行い、妥当性検証用の気相体積率分布、気泡径分布のデータを取得した。さらに、高気相空塔速度条件における大型気泡塔内気泡流を対象とした実験も行い、気相体積率分布も取得した。その結果、合体・分裂が殆ど生じない気泡塔内多分散気泡流における気相体積率分布および気泡径分布の空間発展を良好に予測できること、および大型気泡塔内の高気相空塔速度条件での流れの気相体積率分布も良好に予測できることを確認した。

以上より、前川らが選定した合体・分裂モデルは、(a)合体が支配的な流れ、(b)分裂が支配的な流れ、(c)合体・分裂が同等に高頻度で生じる流れ、(d)合体・分裂が殆ど生じない流れの全てに適用可能であり、さらに、構造・サイズ、運転条件の異なる気泡塔内非均質気泡流動に対しても適用可能な汎用性を持つことを確認できた。

以上より、工業設備の設計支援ツールに必要な機能、すなわち、(i)反応生成物を定

量的に評価(生成物収率や生産効率など)できる, (ii) 設備に設置されたセンサーで測定できる状態変数(温度など)を評価できる, (iii) 大型で複雑な設備内の現象の予測ができる, (iv) 計算精度と計算コストのバランスがとれている, (v) 多くの実験条件に対応できる広い適用範囲をもつ, (vi) 最新の実験結果を取り込み, 予測精度を向上させることが容易である, を備えた実用的な多相-多成分熱流動場数値予測手法の一つの雛型を構築できた.

謝 辞

本学位論文を査読していただき有益な議論と意見を賜りました，神戸大学大学院工学研究科 蔦原道久教授，ならびに，神戸大学大学院工学研究科 松山秀人教授に謹んで感謝の意を表します。

神戸大学大学院工学研究科 富山明男教授には，仕事と研究との両立にご理解をいただき，研究テーマの設定，進め方，まとめ方を含め研究全般について丁寧なご指導をいただきましたこと，心より感謝の意を表します。

研究の遂行にあたり貴重なご指導，ご助言をいただいた神戸大学大学院工学研究科 細川茂雄准教授，神戸大学大学院海事科学研究科 宋明良准教授に深く感謝の意を表します。

神戸大学大学院工学研究科 林公祐助教には，論文に対する有益な議論と貴重なご意見をいただき，また，事務手続きを含む多くのことを丁寧に教えていただき，深く感謝の意を表します。

同じ研究チームとして実験で多大な協力をいただいた，後藤惇氏(現，シャープ(株))，清水良君には大変感謝しております。また，同じ研究室の皆様にも大変お世話になりました。

社会人の身でありながら大学での研究機会と多大なご配慮をいただいた新日本製鐵(株)先端技術研究所 橋本操所長，村上英樹博士，景山正人氏，ならびに，同研究所の皆様にも感謝の意を表します。

お世話になった方全てのお名前を挙げることは出来ませんでした，上記以外の多くの方々にもご協力と励ましをいただきました。ここに記して感謝の意を表します。

この3年間，研究に行き詰まり学位取得を何度もあきらめかけたこともありました。そんな時，いつもそばで私を励ましてくれた妻 育美と娘 里実に感謝します。

最後に，私の学位取得を楽しみに待ち望んでいた父 正，母 道子に感謝します。

2010年1月

田中 正博