

「流れのコンピュータシミュレーション」



高田 一 貴

技術開発本部
研究開発部
主任研究員
工学博士

まえがき

装置や設備内部とそれら周辺の流れ、および熱や物質等のスカラー量の輸送機構を解明することは装置設備の最適設計やトラブルシューティングに貢献するのみならず、これら設備からの排出物・排熱等の拡散が環境中へ与える影響等をも予測する上で重要である。これら流れやスカラー量の輸送機構を解明するためには実際に流速や温度・濃度等を測定することが考えられるが、実際の装置内では高温・高圧であったり、測定対象が大気や海洋のように大スケールであるために、これら諸量の測定が困難になる場合が多い。

コンピュータの発展に伴い、10年前にはスーパーコンピュータといわれた機種が今ではデスクトップ型の廉価なワークステーションに取って代わるなどハード面からの著しい技術革新によって流れを支配する非線形方程式群を手元で数値的に解析できるようになってきた。本稿では均相系流れの標準的なコンピュータシミュレーション方法を概説すると共にいくつかの適用例と計算精度について述べる。なお、コンピュータシミュレーションはコンピュータ内で実験を行うものであるから計算実験または数値実験とも呼ばれており、その中でも流れの数値解析を数値流体力学 (Computational Fluid Dynamics) と呼んでいる。

1. 支配方程式概説 (モデリング)

流れは流体が均相系で非圧縮性の場合下記に示す連続の式と運動量の輸送方程式で表される (便宜上直交座標系とアインシュタインの総和規約で簡略表

記する)。

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - g_i \beta (T - T_0) \quad (2)$$

熱や物質のスカラー量輸送方程式は(3)式で表される。

$$\frac{\partial s_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial s_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_i \frac{\partial s_i}{\partial x_j} \right) \quad (3)$$

これら方程式は変数が圧力 P 、流速 u_i 、スカラー量 S の連立非線形方程式となるため、机上でアナログ的な解析解を求めることは不可能である。従って、解析領域をデジタル式に分割して所定の拘束条件 (境界条件) に合致するよう繰り返し計算で解を固定する方法すなわち数値解析が唯一の求解方法となる。流れが層流である場合には渦スケールが大きくそのため解析分解能は小さくてよいため分割数も少なくてすむ。そのため直接(1)~(3)式を数値的に解くことにより解を得ることができる。

実際の装置や設備では、取り扱う流れの大半は乱流である。この場合には、乱流渦スケールを代表するコルモゴロフ渦スケール (100ミクロンオーダー) 以下にまで解析分解能を上げる必要があるため(1)~(3)式を直接解くには膨大な分割数となり、このような高負荷計算は超並列コンピュータで処理してはじ

めて現実的な時間内で解を求めることができると考えられる。企業における超並列コンピュータの使用は未だ十分なコストパフォーマンスで行われるとは言い難い。このような場合渦スケールをエネルギー表示して計算負荷を低減する乱流モデルが研究機関や企業における計算実験でよく使用される。その中でも代表的な乱流モデルは2方程式 ($k-\varepsilon$) モデルである。2方程式モデルは流れとスカラー量輸送を支配する方程式(1)~(3)に時間平均操作を施すことによって時間平均連続の式, 時間平均運動量およびスカラー量輸送方程式を導出した際に発生する変動流速の2次モーメントをクローズするために導入する物理モデルのひとつである。具体的には(4)式で表される平均値と変動値で表示した式を(1)~(3)式に代入して(5)~(7)式を得る。

$$u_i = \bar{U}_i + u'_i, \quad P = \bar{P} + p', \quad S = \bar{S} + s' \quad (4)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = 0 \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} - \overline{u'_i u'_j} \right) - g_i \beta (\bar{T} - T_0) \end{aligned} \quad (6)$$

$$\frac{\partial \bar{S}_i}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{S}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_i \frac{\partial \bar{S}}{\partial x_i} - \overline{u'_i s'_i} \right) \quad (7)$$

(5)~(7)式に存在する変動流速の2次モーメントをクローズするために下記に示す物理モデルを導入する。

$$-\overline{u'_i u'_j} = \nu_t \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} k \quad (8)$$

$$-\overline{u'_i s'_i} = \alpha_i \frac{\partial \bar{S}}{\partial x_i} \quad (9)$$

(8)式中の ν_t および k はそれぞれ渦粘性係数と乱流エネルギーであり次式で表されるが変動流速の方向性が3方向で均一になると仮定することで計算を簡略化する(等方性乱流)。

$$k = \frac{1}{2} (\sum u_i'^2) \quad (10)$$

$$\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho} = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (11)$$

従って, (5)~(7)式に(8)~(11)式を代入することにより

2方程式モデルに対する連立の式と運動量の輸送方程式を得る。なお, ν_t は(11)式で表されることから, 方程式を解くためには k と ε の輸送方程式が必要となり, その基礎式は次式で表される。ここで ε は k の消散率である。

$$\begin{aligned} \frac{\partial k}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{K_M}{J_K} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \\ &- \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} - \varepsilon \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{K_M}{J_K} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \\ &- C_1 \frac{\varepsilon}{k} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} - C_2 \frac{\varepsilon^2}{k} \end{aligned} \quad (13)$$

(9)式中の α_i はスカラー量の渦拡散係数であり, 流れ場の状態によって変化するためこれらを求める方程式が必要になる。 α_i に関しては(9)式で示したように勾配拡散型で表示されるが⁸⁾, 乱流粘性係数と乱流状態を代表する無次元物性値(乱流プラントル数 P_n (エネルギー), 乱流シュミット数 S_{sc} (拡散物質))を用いて次式で表される。

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \mu_t C_p / P_n \quad (\text{エネルギー}), \\ \alpha_i &= \mu_t / \rho S_{sc} \quad (\text{拡散物質}) \end{aligned} \quad (14)$$

(14)式を(7)式に代入することによってスカラー量の輸送方程式に対する2方程式モデルの流れ場を基準とした拡散方程式が導かれる。スカラー量の輸送まで考慮した流れを解析するためには(5)~(14)式を連立させてコンピュータを用いて解く必要がある。ここで C_1, C_2, C_μ は定数であり流れに応じて決められる。

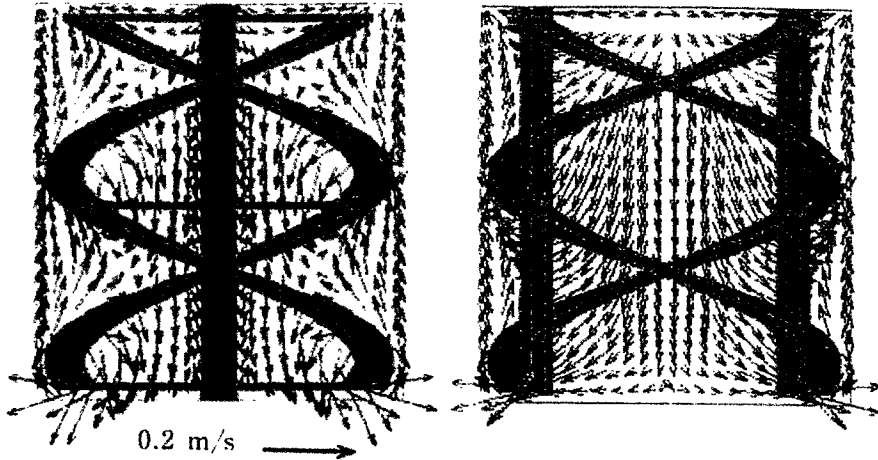
前述のモデルは様々な乱流に対して汎用性を持っているとは限らないのも事実である。そのため実際の現象に合致する様々な乱流モデルが開発されている。いずれにしてもモデルの特徴と適用範囲を明確にして適用する必要がある。

2. 適用例と計算精度

ここでは弊社が製造する攪拌槽, 水処理設備および冷却塔の様々な現象について実際の解析例を示すと同時に計算結果を実測結果と比較することによりシミュレーションの予測精度について解説する。

2.1 攪拌槽

化学装置を代表する反応器は攪拌型である場合が多い。第1図はダブルヘリカルリボン翼を槽内で攪拌させた際に生じる流れを解析し流速ベクトルで表



第1図 ダブルヘリカルリボン翼を用いた攪拌槽内の流動状態（軸あり，軸無しフレーム式）
 Fig. 1 Flow patterns in a stirred tank equipped with double helical ribbon impeller
 (with shaft, and frame type without shaft)

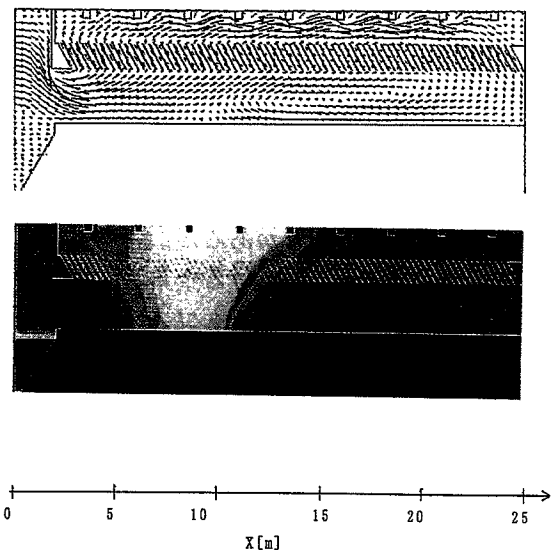
示した結果である（高田ら，1993）。解析系は流れが層流であることから式(1)~(3)が用いられた。解析結果はレーザー流速計による計測値と比較されたが，最大流速に対して5%以内の精度で一致しており，流れが層流である場合の計算実験はほぼ実用域に達していることが示された一例である。

2.2 沈澱池密度流

水処理設備内の凝集物（フロック）キャリアオーバー問題に対する原因解明と対策にシミュレーションが適用された（小西ら，1996）。第2図は約20m×25mのスケールを有する沈澱池への流入水温度が最も高くなると同時にフロックのキャリアオーバーが著しくなる夏期の午後4時頃における流速分布と温度分布である。解析は系内が乱流であることから式(5)~(14)が用いられた。局所的に流速が増大していることが確認され，キャリアオーバーは沈澱池内のフロックが，流入水の温度変化に起因する局所的な流速増加（自然対流）によって同伴されることによって発生することが解明されている。この自然対流を最小限に防止するために沈澱池の各所に阻流板を入れた計算実験を繰り返すことにより最も自然対流を防止できる挿入条件を決定し，阻流板施工後は年間を通してフロックのキャリアオーバーを防止することが確認された。この検討によりこの種の設備に対して前述の乱流モデルが適用可能であることが示された。

2.3 冷却塔白煙

冷却塔からの排熱はおもに冬季と梅雨期に可視白



第2図 傾斜管式沈澱池内の流速分布および温度分布
 (夏期夕刻 16:00頃)

Fig. 2 Velocity vectors and temperature contours in an inclined tube settler (summer evening at about 16:00)

煙として観察される。冷却塔白煙は空港等における管制障害，大都市地域冷暖房システムにおける火災誤認等の問題からその防止技術が不可欠である。第3図は白煙発生状況を予測した結果である。解析対象が熱と物質の移動を伴う大気乱流になるため(5)~(14)式が用いられた。可視白煙は相対湿度が計算上100%以上になる領域として濃淡表示される。可視部分の長さ，体積，幅といったマクロスケールは観



Experiment



Computation

第3図 大型塔1の可視白煙の計算結果と観察結果との比較 (Run.3)
Fig. 3 Comparison of computed and measured visible plume of large tower 1 (Run.3)

測結果と良好な一致を示すことがわかった (Takata et al, 1997)。ここに示す白煙の予測手法を用いて、白煙を防止する経済的な乾湿空気比率を決定することが可能になった。なお比較結果からも判別できるように、乱流モデルによる計算結果は白煙局所の渦に起因するマイクロな挙動まで解析できないという限界がある。この挙動を明らかにするためには解析領域を膨大なメッシュで分割し、(1)~(3)式を超並列コンピュータで解析する必要があるが、先述したようにこの種の計算を現段階における企業レベルの設計計算とすることは目的の上からもコストパフォーマンスの上からもなじまない。

むすび

化学装置や水処理設備では装置内流れがその性能を左右することが多い。それゆえ装置内流れの予測

技術が最適設計に寄与することは明白である。ここでは均相系流動についての標準的なシミュレーション技術の現状について概説したが、実際にはガス・液に代表される気液2相流やグラニユール流れに表される気固液3相流のようにより複雑系となる場合が現実問題として多く存在する。当社ではこれ流れに対して実際の現象を常に観察しながら高コストパフォーマンスを有する実用シミュレーション技術の確立を多くのケーススタディをとおして行っている。機会をみてより複雑系のモデリング手法や解析結果について紹介したいと考えている。

【参考文献】

- 1) 高田一貴ほか：神鋼パンテック技報，Vol.37, No.3 (1996) p.2.
- 2) 小西嘉雄ほか：水道協会雑誌，第65巻，第11号 (平成8年)
- 3) Takata et al. : CTI Journal, Vol.18, No.1 (1996)