

気泡塔型反応器内の流動予測

研究・開発機関 : 千代田化工建設(株)
 利用施設 : (公財)計算科学振興財団 FOCUSスパコン
 計算規模 : 最大504コア、約1000万計算セル
 利用ソフトウェア : OpenFOAM

Before

●気泡塔型反応器内の流動計算では、気泡の合体や分裂に伴う気泡径分布の評価が精度良い予測のために必要です。いくつか存在する気泡流動計算手法の中でも界面追跡法を用いれば気泡の合体・分裂挙動を評価できる可能性があります。しかし、工業装置を対象にする場合、計算セル数が膨大となるため装置設計への界面追跡法の適用は困難でした。

After

○工業装置の計算に適用性の高い多流体モデルを界面追跡法に組み合わせたハイブリッドモデルを開発し、気泡流動計算に用いることで、気泡合体・分裂挙動を考慮しつつ計算時間の短縮を実現しました。
 ○FOCUSスパコンを用いた並列計算を行うことで、現実的な時間内での計算が可能となり設計業務への適用も可能となりました。

■背景と目的

気液接触反応装置としての気泡塔は幅広い工業分野で用いられ、その設計あるいは経済性評価では塔内流動を精度良く把握する必要があります。

気泡塔内流動の高精度予測には、気泡の合体・分裂に伴う気泡径分布の適切な評価が重要です。図1に示す気相分散板を用いず塔底部の入口ノズルから気液混合流体を流入させる装置では、ノズルで大きな気体の塊が生成され、これが分裂して徐々に小さい気泡が発生すると予測されます。

このような流れに適用可能で信頼性の高い合体・分裂モデルはありません。また、気液流動の計算手法の一つの界面追跡法を適用すると、非常に小さい計算セルサイズを必要とし現実的な時間内での計算は困難でした。

そこで、ノズルで生成する大気泡の挙動と大気泡が小気泡へ分裂する過程を界面追跡法で計算し、ある大きさ以下の小気泡の挙動を計算負荷

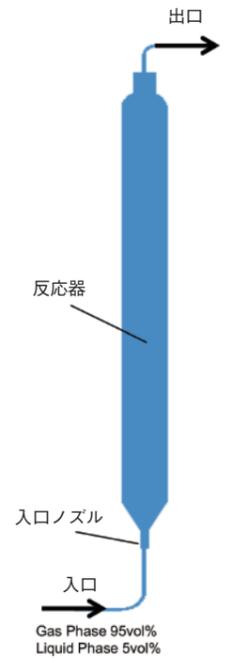


図1. 反応器概略図

が低い多流体モデルで計算する「ハイブリッド計算手法¹⁾」をOpenFOAMで構築しました。それでも1000万を超えるセル数となります。そこで、FOCUSスパコンを用いて並列計算を行うことで現実的な時間内での計算を可能とし、装置設計にも適用できるようにしました。

■利用成果

図1の反応器は円筒形の容器で反応塔底部に入口ノズルが設置されています。このノズルから気相体積率95%、液相体積率5%の気液二相流が流入します。気相は複数の成分で構成され、液相中には触媒粒子が微量含まれています。反応器内で気相が反応し液相の生成物を作り出します。この反応器を対象にハイブリッドモデルを用いて塔内流動状態を調べました。

図2は反応塔内流動の解析結果を示しています。図は左からa) 塔内の気相体積率分布、b) 界面追跡法で計算された気泡の挙動、c) 多流体モデルで計算された小気泡の体積率分布を示しています。図2 a)より塔の高さ方向中央付近から気相体積率が減少していることがわかります。これは反応による影響です。b)より入口ノズルで大きな気泡が生成され、徐々に小さい気泡に分裂していく様子がわかります。また、入口ノズルから塔高さの1/3程度の高さで気泡が存在しなくなっています。これは気泡が分裂し、この位置より上部ではあるサイズ以下の小さな気泡しか存在しないことを意味しています。逆にc)の小気泡は入口ノズル付近では体積率が非常に小さいですが、上部に進むと徐々に高くなるのがわかります。

このように塔内流動を詳細に把握することが可能となり、塔内の混合度合いや滞留時間分布のデータ、あるいは発熱現象もモデル化し、流れと一緒に計算することで温度分布等のデータを取得し、装置設計に反映できるようになりました。

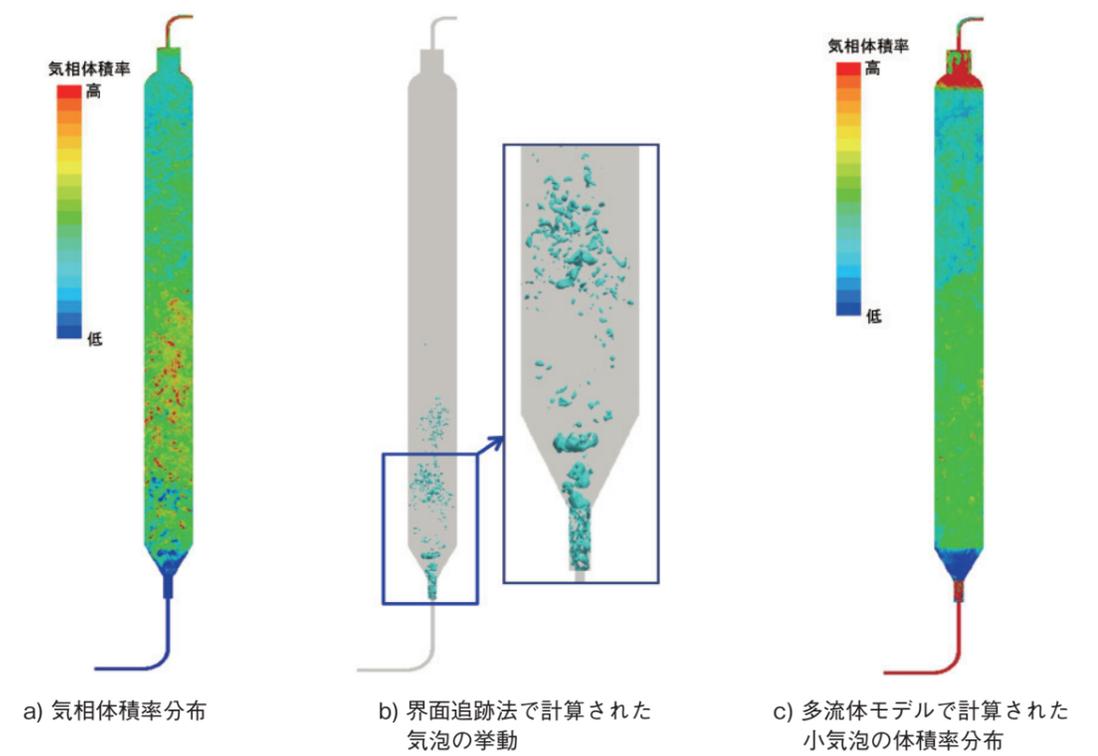


図2. 反応塔内流動の解析結果

■出典 : 1) Tomiyama, A. and Shimada, N., A Numerical Method for Bubbly Flow Simulation Based on a Multi-Fluid Model, Transactions of the ASME, Vol. 123 (2001), pp. 510-516