

論 文

充填層三次元ガス流れモデル

大 野 陽太郎*・近 藤 国 弘*

A Mathematical Model of Three-dimensional Gas Flow in Packed Beds

Yotaro OHNO and Kunihiro KONDO

Synopsis :

A mathematical model of three-dimensional gas flow in packed beds has been developed to be applied for the analysis of gas flow in packed bed reactor, blast furnace and so on.

Basic equation of the motion of fluid in packed beds was derived on the basis of the mechanics of continua.

In case of gas flow in iso-tropic packed beds, the equation of motion is simplified to the vectorial form of the ERGUN's equation. Equation of pressure, derived from the locally linearized equation of motion and equation of continuity, is computed by the finite element method with three-dimensional iso-parametric, second order elements of 20 nodes. Gas velocity is calculated from pressure gradient in each element.

Computed results were compared with the analytical solution and the experimental results. Good agreement among them confirms the adequateness of this mathematical model.

Key words : three-dimensional ; gas flow ; packed beds ; finite element method ; ERGUN's equation ; simulation.

1. 緒 言

充填層反応器,あるいは,高炉,シャフト炉のような移動層反応器において,粒度偏析,温度分布の効果,鉱石の軟化融着等による通気抵抗分布やガスの入口,出口の位置形状等の効果によりガス流れが不均一に分布する.このガス流の不均一性は,反応装置の特性に大きな影響を与えると考えられ,不均一ガス流れの解析が注目されてきた.

二次元流れについては,RADESTOCK ら¹⁾が,ERGUN 式²⁾をベクトル型式で二次元に拡張して連続の式と組み合わせ,圧力に関する方程式を導き,差分法により数値計算を行つたのが最初である.その後,同じ基礎式から流れ関数に関する方程式を導いて,差分法により数値計算する方法^{3)~6)}あるいは圧力に関する方程式を有限要素法により数値計算する方法^{7)~10)}などが報告されている.

三次元流れについては,ERGUN 式を同様に一般化して基礎式を示した報告³⁾はあるが,解析例は示されておらず,その妥当性は確認されていない.

従来の報告においては,充填層内のガス流れの運動方程式として ERGUN 式を拡張して使うことについて,理

論的な考え方が十分に示されているとは言えない.

本報では,充填層内三次元ガス流れの基礎式を導き,それを有限要素法で数値計算する方法を示し,その妥当性を解析解,模型実験結果との対比から検討している.

2. 数式モデルの内容

2.1 基礎式の検討

本論文の目的は,充填物間の空隙におけるミクロな流れを対象とするのではなく,マクロに,層全体としての流れを把握することである.

そこで,充填層を個々の粒子とその間隙から成ると考えるのではなく,流体にある運動特性を与える場であると考え,流速も空塔速度で表現することとする.このような取扱いを連続体というが,この仮定が成り立つためには,粒子径に比べ対象とする充填層の大きさが十分に大きいことが前提となる.

質量保存則から,単位体積当たりの質量生成速度を G とすると,連続の式は,

$$\partial \rho / \partial t + \text{div}(\rho \mathbf{V}) = G \quad \dots\dots\dots (1)$$

ρ : 密度 t : 時間 $\mathbf{V}$: 速度ベクトル

運動量保存則から導かれる運動方程式は¹¹⁾,

昭和 58 年 10 月学会講演大会にて発表 昭和 62 年 2 月 26 日受付 (Received Feb. 26, 1987)

* 日本鋼管(株)鉄鋼研究所 (Steel Research Center, Nippon Kokan K.K., 1-1 Minamiatarida-cho Kawasaki-ku Kawasaki 210)

$$\partial \rho V / \partial t = -(\nabla \cdot \rho V V) + (\nabla \cdot T) + \rho K \quad \cdots \cdots (2)$$

T : 応力テンソル K : 外力ベクトル

(1), (2)式から

$$\rho \frac{DV}{Dt} = -GV + \nabla \cdot T + \rho K \quad \cdots \cdots (3)$$

応力テンソルは、圧力と粘性応力テンソル R に分離される。

$$T = -P\delta + R \quad \cdots \cdots (4)$$

δ : 単位テンソル P : 圧力

(4)式は、一般に構成方程式とよばれ、その流れ場に特有のものであり、連続体の理論のみからは決定されず、実験的に決定されなければならない。

流れ場としての充填層の特性については、従来、定常の一次元流れで、生成無し、重力の影響の無い条件下で圧力損失と流速の関係式として求められており、ERGUNの式が、幅広い多くの実験値に合うので用いられている。

$$\Delta P / \Delta l = -(aV_i + bV_i^2) \quad \cdots \cdots (5)$$

$$a = 150 \frac{(1-\epsilon)^2}{\epsilon^3} \frac{\mu}{g_c(\phi_s d_p)^2} \quad b = 1.75 \frac{1-\epsilon}{\epsilon^3} \frac{\rho}{g_c \phi_s d_p}$$

ϵ : 空隙率 μ : 粘度 d_p : 粒径 ϕ_s : 形状係数 g_c : 重力換算係数

この実験条件に合わせて、(3), (4)式を簡単化する。

$$0 = -dP/dx + dR_{xx}/dx \quad \cdots \cdots (6)$$

一次元流れの方向を x 軸にとると、流速は x 方向成分 v_x のみとなる。微小区間 dx で密度 ρ は一定と考えられるので、流速 v_x は一定、対流項 $v_x dv_x/dx$ はゼロとなり、(5), (6)式を比較することにより、(5)式が、充填層内流れの構成方程式に相当することがわかる。

等方的な連続体を仮定し、(5)式を三次元化すると (Appendix 1)

$$\text{grad } P = -(a + b|V|)V \quad \cdots \cdots (7)$$

(3), (4), (7)式から充填層内流れの運動方程式が求められる。

$$\rho \frac{DV}{Dt} = \rho K - |\text{grad } P| + (a + b|V|)V \{g_c - GV\} \quad \cdots \cdots (8)$$

ここで g_c は、圧力を工学的な単位 (kgf/m^2) で表すために付け加えられている。

通常のガスについては、理想気体の状態方程式をよい近似で使うことができる。

$$P/\rho = RT \quad \cdots \cdots (9)$$

R : ガス定数 T : ガスの絶対温度

ガス流れでは、外力としての重力は無視できる。また、定常状態を仮定すると(8)式は

$$\rho(V \cdot \nabla)V = -|\text{grad } P| + (a + b|V|)V \{g_c - GV\} \quad \cdots \cdots (10)$$

ここで左辺の $(V \cdot \nabla)V$ は、流体の運動からくる対流加速度である。(10)式の各項の数値的なオーダーの比較を行うと、充填層の構造が保持されている限り、左辺対流加速度項は無視できる⁴⁾⁶⁾。また生成質量の加速に必要な運動量の項 GV も、 G が過大でなければ無視できる (Appendix 2)。結局、充填層内ガス流れの運動方程式は、三次元に拡張された ERGUN 式(7)に外ならない。

ガス流速を標準状態 ($T_0 = 0^\circ\text{C}$, $P_0 = 1 \text{ kgf/cm}^2$) における流速で表すこととし、標準状態のガス密度、速度ベクトル、充填層単位体積当たりの発生量を、 ρ_0 , V_0 , Q とすると、連続の式(1)は、

$$\text{div } V_0 = Q \quad \cdots \cdots (11)$$

ガスの粘度について圧力の効果は、高压(10 気圧以上)または、極低圧(1 mmHg 以下)でなければ無視できる¹²⁾。粘度の温度依存性を、SUTHERLAND の式で近似する¹³⁾。

$$\mu = \mu_0 \frac{T_0 + C}{T + C} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1.5} \quad \cdots \cdots (12)$$

μ_0 : 標準状態における粘度 C : SUTHERLAND 定数

(5), (9), (12)式を(7)式に代入して整理すると、

$$\text{grad } P = -(a^* + b^*|V_0|)V_0 \quad \cdots \cdots (13)$$

$$a^* = A \left(\frac{T_0 + C}{T + C} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right)^{2.5} \left(\frac{P_0}{P} \right) = a' \left(\frac{P_0}{P} \right)$$

$$b^* = B \left(\frac{T}{T_0} \right) \left(\frac{P_0}{P} \right) = b' \left(\frac{P_0}{P} \right)$$

$$A = 150 \frac{(1-\epsilon)^2}{\epsilon^3} \frac{\mu_0}{g_c(\phi_s d_p)^2} \quad B = 1.75 \frac{1-\epsilon}{\epsilon^3} \frac{\rho_0}{g_c \phi_s d_p}$$

係数 A, B は、温度、圧力に対して変化しない。

2.2 圧力方程式の導入と、その数値計算法

係数 a^* , b^* が一定と考えられるような微小領域で、流速が V_0^* とすると、その近傍では、(13)式の圧力勾配と流速の関係を近似的に、次の線型関係で表現できる。

$$V_0 = a_0(-\text{grad } P) \quad \cdots \cdots (14)$$

$a_0 = 1/(a^* + b^*|V_0^*|)$ a_0 : 局所線型化通気性係数

(14)式を(11)式に代入することにより圧力に関する方程式が得られる。

$$\text{div}(a_0 \text{grad } P) + Q = 0 \quad \cdots \cdots (15)$$

係数 a_0 の値は、位置により変化するが、(15)式を解く過程では圧力に依存しない。

直交座標系 $\{x, y, z\}$ について示すと、

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(a_0 \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(a_0 \frac{\partial P}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(a_0 \frac{\partial P}{\partial z} \right) + Q = 0 \quad \cdots \cdots (16)$$

境界条件は、①境界面 S_1 で圧力の値 $\bar{P}$ が指定される。②境界面 S_2 で、面に垂直な方向の流速 u が指定される。の二つである。

変分原理によると、(16)式を境界条件②のもとで解く

ことは次の汎関数 χ を最小にすることと等価である¹⁴⁾.

$$\chi = \int_V \left[\frac{1}{2} a_0 \left\{ \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)^2 \right\} - QP \right] dV + \int_{S_2} u P dS \dots\dots\dots (17)$$

V : 対象となる全領域

対象とする領域の幾何学的形状と不均質な通気性分布を考慮して計算できるように、数値計算法として、有限要素法を用いる¹⁴⁾. 全領域を有限の要素に分割し、要素内の圧力の分布をその要素を構成する節点における圧力の値をもとに単純な内挿関数で表し、(17)式の汎関数を最小にするような節点の圧力値を求める. 三次元の問題では、実際の幾何形状に合わせるためには、四面体一次要素のような単純な要素では多数の要素を必要とし、数値計算上得でない. そこで、20 節点のアイソパラメトリック (Iso-parametric) 要素を使用する¹⁵⁾. Fig. 1 に示すように、局所座標系 $\{r, s, t\}$ で表された立方体は、形状関数により、全体座標系 $\{x, y, z\}$ に写像され曲面要素となるので形状適応性が高い. 形状関数として変数の内挿に使用したものと同一関数を使用するので、アイソパラメトリックと呼ばれる. 内挿関数 N_i は、要素の局所座標の関数である (Appendix 3).

全体座標系における要素内の点の座標 (x, y, z) および圧力 P は、内挿関数 N_i により、要素の節点座標 (x_i, y_i, z_i) または圧力値 $P_i (i=1 \sim 20)$ との間に次の関係にある.

$$\{x\} = \{N\}^T \{C\} \dots\dots\dots (18) \quad P = \{N\}^T \{P\} \dots\dots\dots (19)$$

$\{x\}$: 座標ベクトル $\{N\}$: 内挿関数ベクトル $\{C\}$: 要素構成節点座標マトリクス $\{P\}$: 要素構成節点圧力値ベクトル

$$\{x\} = \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix} \quad \{N\} = \begin{Bmatrix} N_1 \\ \vdots \\ N_{20} \end{Bmatrix}$$

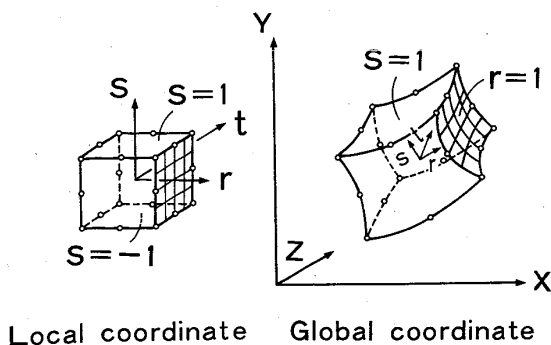


Fig. 1. Three dimensional 20 nodes 2nd order iso-parametric element.

$$[C] = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{20} & y_{20} & z_{20} \end{bmatrix} \quad \{P\} = \begin{Bmatrix} P_1 \\ \vdots \\ P_{20} \end{Bmatrix}$$

ある要素に関する汎関数を χ^e とする. 要素を構成するすべての節点圧力についての χ^e の微分をとり整理すると次のようになる.

$$\left\{ \frac{\partial \chi^e}{\partial P} \right\} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial \chi^e}{\partial P_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \chi^e}{\partial P_{20}} \end{Bmatrix} = [K]^e \{P\}^e - \{F_s\}^e + \{F_b\}^e \dots\dots\dots (20)$$

$$[K]^e = \int_{V^e} a_0 [A]^T [A] dV \dots\dots\dots (21)$$

$$\{F_s\}^e = \int_{V^e} Q \{N\} dV \dots\dots\dots (22)$$

$$\{F_b\}^e = \int_{S_2^e} u \{N\} dS \dots\dots\dots (23)$$

ここに、

$[K]^e$: 要素の通気性マトリクス $\{F_s\}^e$: 要素の発生条件ベクトル $\{F_b\}^e$: 要素の流入条件ベクトル V^e : 要素の体積 S_2^e : 要素の流入境界面の面積

$$[A] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_{20}}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \dots & \frac{\partial N_{20}}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1}{\partial z} & \dots & \frac{\partial N_{20}}{\partial z} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (24)$$

$[A]$: 内挿関数 N_i の全体座標系における導関数マトリクス

N_i は、局所座標の関数なので、全体座標に関する導関数を局所座標に関する導関数に変換する. 合成関数の微分公式から、

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial R} \right\} = [J] \left\{ \frac{\partial}{\partial X} \right\} \dots\dots\dots (25)$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial R} \right\} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial s} \\ \frac{\partial}{\partial t} \end{Bmatrix} \quad [J] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial s} \\ \frac{\partial x}{\partial t} & \frac{\partial y}{\partial t} & \frac{\partial z}{\partial t} \end{bmatrix}$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial X} \right\} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{Bmatrix}$$

ここで、 $\frac{\partial x}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\sum_{i=1}^{20} N_i x_i \right) = \sum_{i=1}^{20} \frac{\partial N_i}{\partial r} \cdot x_i$ なので、

$$[J] = [B][C] \dots\dots\dots (26)$$

$$[B] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial r} & \dots\dots & \frac{\partial N_{20}}{\partial r} \\ \frac{\partial N_1}{\partial s} & \dots\dots & \frac{\partial N_{20}}{\partial s} \\ \frac{\partial N_1}{\partial t} & \dots\dots & \frac{\partial N_{20}}{\partial t} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (27)$$

$[B]$: 内挿関数 N_i の局所座標系における導関数マトリクス

要素の全体座標と局所座標の間の対応が一意的であれば, $[J]$ の逆マトリクスが存在するので

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial X} \right\} = [J]^{-1} \left\{ \frac{\partial}{\partial R} \right\}$$

$$\text{そこで, } [A] = [J]^{-1} [B] \dots\dots\dots (28)$$

(21)~(23)式中の被積分関数は, 局所座標の関数なので, 体積分, 面積分も局所座標について行われる. 微小体積 dV は,

$$dV = |J| dr ds dt \dots\dots\dots (29)$$

$|J|$: $[J]$ の行列式

(23)式の微小境界面積 dS は, 局所座標において $r=1$ の面が流入面であるとする, 次式で表される¹⁶⁾.

$$dS = \sqrt{g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}} ds dt \dots\dots\dots (30)$$

$$g_{11} = \left(\frac{\partial x}{\partial s} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial s} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial s} \right)^2$$

$$g_{22} = \left(\frac{\partial x}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial t} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial t} \right)^2$$

$$g_{12} = g_{21} = \left(\frac{\partial x}{\partial s} \right) \left(\frac{\partial x}{\partial t} \right)$$

$$+ \left(\frac{\partial y}{\partial s} \right) \left(\frac{\partial y}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial s} \right) \left(\frac{\partial z}{\partial t} \right)$$

以上の(21)~(23), (29), (30)式から

$$[K]^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 a_0 [A]^T [A] |J| dr ds dt \dots\dots (31)$$

$$\{F_s\}^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 Q \{N\} |J| dr ds dt \dots\dots\dots (32)$$

$$\{F_b\}^e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 u \{N\} \sqrt{g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21}} ds dt \dots\dots (33)$$

(31)~(33)式の積分は, 解析的に得られないので数値積分を行う. 積分領域は立方体なので数値積分が簡単になる. これがアイソパラメトリック要素のもう一つの利点である. 数値積分法として GAUSS の方法¹⁵⁾を用いた. 積分次数は, 2 または 3 とした. この場合要素内の積分点は $2^3=8$, または $3^3=27$ となる.

各節点ごとに, 関係する要素の通気性マトリクス, 発生条件, 流入条件ベクトルを重ね合わせると,

$$\left\{ \frac{\partial \chi}{\partial P} \right\} = [K] \{P\} - \{F_s\} + \{F_b\} \dots\dots\dots (34)$$

最小化条件 $\left\{ \frac{\partial \chi}{\partial P} \right\} = 0$ から,

$$[K] \{P\} = \{F_s\} - \{F_b\} = \{F\} \dots\dots\dots (35)$$

となり, (35)式は, $\{P\}$ に関する連立方程式となる. 圧力指定境界条件① (境界面 S_1 に存在する節点の圧力値を指定) は, この(35)式を解く前に導入される.

三次元の問題では, 全体としての節点数が多くなるので, 全体の通気性マトリクス $[K]$ を合成してから解く方法では, 必要な計算機の記憶容量が大きくなるので方程式を組み立てながら, 同時に変数を消去してゆくウェーブフロント法¹⁷⁾ (Frontal solution method) を用いる.

2.3 収束計算の方法

計算の初めは, 係数 a_0 の値が未知なので, 一定値を全領域の積分点に与え, (35)式を計算し, 圧力を求める.

節点ごとの圧力 $\{P\}$ が求まると, 各要素内の圧力分布が計算できる. 要素内で圧力は, 2 次関数的に変化しており, 流速も一定でないので各積分点ごとに流速を計算する.

$$\{V\} = \begin{Bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{Bmatrix} = -a_0 \begin{Bmatrix} \frac{\partial P}{\partial x} \\ \frac{\partial P}{\partial y} \\ \frac{\partial P}{\partial z} \end{Bmatrix} = -a_0 [A] \{P\} \dots (36)$$

マトリクス $[A]$ の成分は, 各積分点ごとに計算される. 流速の大きさ V_i および流れ方向の圧力勾配

$\left(\frac{\partial P}{\partial l} \right)$ は, 次式により計算される.

$$V_i = \sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2} \dots\dots\dots (37)$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial l} \right) = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)^2} \dots\dots\dots (38)$$

ここで得られた流速と圧力勾配が ERGUN 式(13)をみたしているかどうかを全領域の積分点において判定する.

ERGUN 式(13)を用いて圧力勾配 $\left(\frac{\partial P}{\partial l} \right)$ から計算した流速 V_i^* と, V_i の偏差 $D_v = |V_i - V_i^*|$ について計算の収束判定を行う. 各要素ごとに流速偏差の全積分点における平均値がある値 M_1 以下になり, D_v の最大値がある値 M_2 以下となつたら, その要素は収束したものとし, 未収束の要素数がある数 M_3 以下となつたら, 全体として収束したと判定する. 全体として未収束の場合は, $D_v > M_1$ となる全積分点で, 次式により係数 a_0 の値を再計算し, 繰り返し計算を続行する.

$$a_0 = \frac{1}{a' + b' V_i^*} \left(\frac{P}{P_0} \right) \dots\dots\dots (39)$$

すべての積分点で, $D_v \leq M_1$, すなわち, ERGUN 式が満足されたとき, その圧力, 流速を基礎式の解とする.

3. 数学モデルの検証

予備検討から、積分次数は、2 で十分に精度があることがわかったので、以下の例では、2 で計算を行った。

3.1 解析解との比較

解析解の得られる三次元ガス流れの例として、Fig. 2 に示すように、ガスが半径 R_I の外側の球面から流入し、内側に向かつて縮流し、半径 R_O の内側の球面から流出していく場合 (Case A) について計算した。流入側の 5 個の要素の流入面に、 $V_R = 0.2639 \text{ Nm/s}$ の流入流束を与え、出口側の 5 個の要素の 24 個の節点に $P_O = 1.0 \text{ kgf/cm}^2 \text{A}$ の圧力を指定した。収束条件は、

$M_1 = 8 \text{ Nmm/s}$, $M_2 = 40 \text{ Nmm/s}$, $M_3 = 0$ である。

次に解析解を求める。基礎式 (11), (13) を三次元極座標で、発生無し、半径方向の成分のみとして示すと次のようになる。

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 V_r) = 0 \quad (40)$$

$$\frac{dP}{dr} = - (a' + b' V_r) V_r \frac{P_0}{P} \quad (41)$$

連続の式 (40) を、 $r = R_I$ で、 $V_r = V_R$ として解くと、
 $V_r = (R_I / r)^2 V_R \quad (42)$

(42) 式を (41) に代入すると、

$$\frac{dP}{dr} = - \left(a' + b' \left(\frac{R_I}{r} \right)^2 V_R \right) \left(\frac{R_I}{r} \right)^2 V_R \left(\frac{P_0}{P} \right) \quad (43)$$

(43) 式を、 $r = R_O$ で $P = P_O$ で解くと

$P =$

$$\sqrt{P_O^2 + 2a'R_I^2 V_R P_O \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R_O} \right) + \frac{2}{3} b' R_I^4 V_R^2 P_O \left(\frac{1}{r^3} - \frac{1}{R_O^3} \right)} \quad (44)$$

Fig. 2 に示す計算条件を (44) 式に代入すると半径方向の圧力変化が求められる。

解析解と数値解は、Fig. 3 に示すようによく一致している。またガスの流入量に対する流出量の比を収支係数として定義し、精度評価のもう一つの基準とする。Case A の収支係数の値は Table 1 に示すように非常に良く、0.1% の誤差である。この例に示したように本モデルは、数値計算法として、充填層三次元ガス流れの基礎式 (11), (13) を精度よく計算できることが確認された。

3.2 三次元軸対称モデルの計算結果との対比

本数学モデルの基礎式は、三次元と二次元 (三次元軸対称) の差はあるが、二次元モデルと同じである。二次元モデルの精度はすでに実験値との対比で確認されている⁷⁾。そこで、縮流モデル (Case A) について対比を行った。三次元軸対称の要素分割を Fig. 2 (b) に示す。このモデルでは、三角形一次要素を組み合わせで四角形として使用しており、要素内で流速は一定なので、収束判定は、各要素 1 点である。収束条件は、 $M_1 = 5 \text{ Nmm/s}$, $M_3 = 0$ とした。圧力の計算値を、Fig. 3 に、収支係数を Table 1 に示す。両モデルによる圧力計算値はよく一致しているが、三次元軸対称モデルのほうが収支係数の偏差がやや大きい。これは、一次要素の弱点、すなわち要素内で流速が一定で、要素境界で流速が不連続になることと、直線要素のため、形状適応性がやや悪いことが原因と考えられる。

3.3 冷間模型実験との対比

一般の三次元ガス流れについて、本数学モデルの適用性を確認するために、冷間模型実験を行い、圧力分布を測定し計算値と比較した。

3.3.1 縮流モデル (Case A)

Fig. 4 に示すような実験装置で、下面より空気を流した。充填層の上下面は、1 mm の金網で、側面は、吹抜けを防ぐために、2 mm 厚の軟質ウレタンフォームシートを張りつけた。粒子は、ガラス球 10 mmφ を使用し、側面の流れ方向の圧力を測定した。実験結果は、Fig. 3 に示すように、計算結果とよく一致している。

なお、計算結果は、空隙率の値により大きく変化する。そこで、前もって 100 mmφ の円筒に、同様に軟質ウレタンフォームシートを張りつけ、粒子を充填し、流れ方向の圧力分布を測定した。その圧力分布が ERGUN 式 (12)

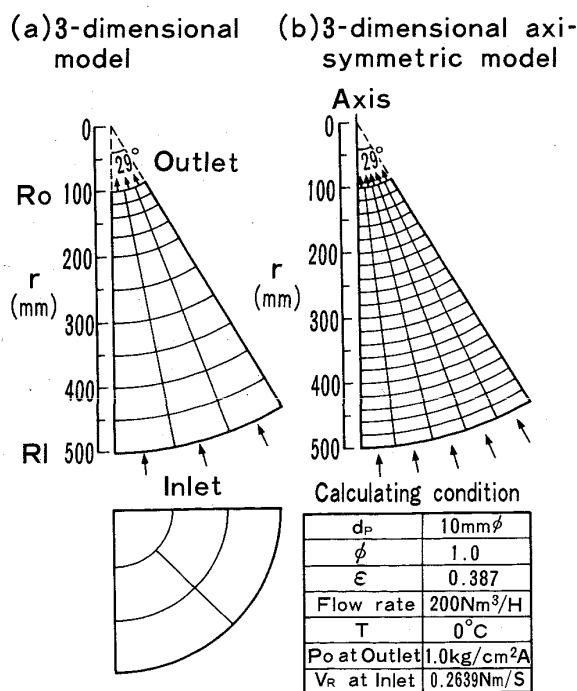


Fig. 2. Element division and calculating condition for three dimensional converging flow (Case A).

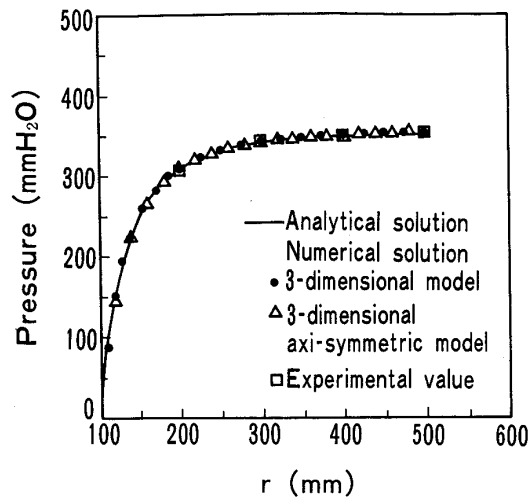


Fig. 3. Comparison among analytical solution, numerical solution and experimental value for case A.

Table 1. Examples of calculation by mathematical model of 3-dimensional gas flow in packed bed.

Case	Element division	Number of nodes	Number of elements	Balance index*	CPU time (min) (Machine)
A	Fig. 2(a)	50	364	1.0013	4.55 (IBM-4341)
A**	Fig. 2(b)	100	126	1.0072	0.88 (IBM-4341)
B	Fig. 6	312	1757	1.0032	26.15 (IBM-3081D)
C	Fig. 7	1092	5511	1.0029	131.73 (IBM-3081D)

* Balance index = Flow rate at outlet / (Flow rate at inlet + Generation rate)

** 3-dimensional axis-symmetric model

に最も近くなるように空隙率を算出した。以後の計算においても、このようにして求めた値を使用している。

3.3.2 扇形モデル (Case B)

Fig. 5 に示すような実験装置で、下部側面の吹込み支管 (70 mm ϕ) から空気を吹き込み、充填層内の圧力分布を測定した。吹込み流量が 500 Nm³/h の場合の測定結果を Fig. 6 に示す。吹込み位置近傍では、三次元的に大きな圧力勾配が発生することがわかる。

このモデルは、円周方向で、左右対称なので、半分の部分について計算を行った。要素分割図および圧力の計算値を Fig. 6 に示す。吹込み口は 70 mm ϕ の半円形ということになるが、この分割では幅 35 $\times$ 高 50 mm の長方形である。下部における圧力変化がよくシミュレートされているのがわかる。

3.3.3 円筒モデル (Case C)

Fig. 7 に示すようなモデルで、高炉の融着層を模したリング状の板、2 mm ϕ および 10 mm ϕ のガラス球を

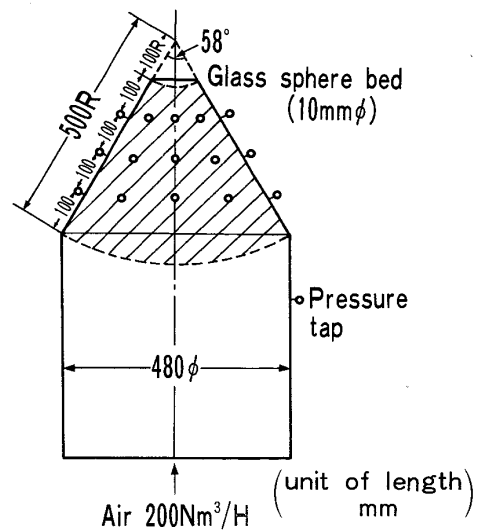


Fig. 4. Experimental apparatus for case A.

層状に配置した。小粒子が大粒子の間隙に入りこまないように、2種の層の境界面には、軟らかいナイロン製の 1 mm 目のあみをはさんだ。リングプレートも、粒子との界面で空隙率が大きくなるのを避けるために、軟質のウレタンフォーム製とした。下部の 50 mm ϕ の支管 8 本から、均一な流量で空気を吹き込み、壁側の圧力分布を、高さ方向 16 段、円周方向 16 個所で測定した。

水平断面の要素分割は高さ方向一定で、上面の 42 個の要素の 141 個の節点に 1.0 kgf/cm²A の圧力を指定し、下から 2 段目の円筒側面を形成する 10 個の要素の 16 個の流入面に 0.737 Nm/s の流束を与えて計算した。

リングプレートの中心が、円筒の中心軸から偏心しており、偏心した方向 (CA) では、高さ方向で、その存在位置が大きく異なっている。測定された圧力分布を、Fig. 7 に示すが、リングプレートの配置されている領域で、円周方向で圧力差を生じている。全体としての高さ方向の圧力変化および壁面圧力の円周方向偏差について、計算値は、測定とよく一致しているのがわかる。

扇形モデルおよび円筒モデルの計算の収支係数は Table 1 に示すように、誤差 0.3% であった。

以上の対比例から、本数学モデルは、充填層内三次元ガス流れを、十分精度よく計算できることが確認された。計算時間 (CPU Time) を Table 1 に示す。計算の収束性はよく、いずれの例も、10 回程度で収束している。計算時間は、経験的に、節点数のほぼ 1.8 乗に比例し、またフロント幅 (一つの要素における節点番号の差の最大値) が大きいと計算時間が増加するので、計算の実施にあたっては、要素分割に工夫をする必要があることがわかった。

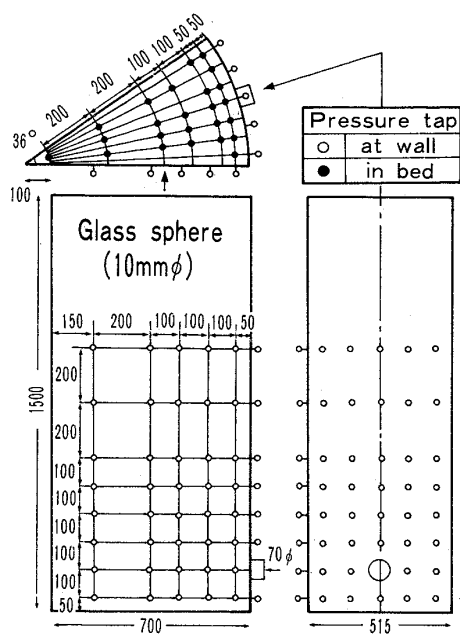


Fig. 5. Experimental apparatus for fan shape model (Case B).

4. 結 言

(1) 充填層内のガス流れを連続体力学の立場からとらえ、三次元ガス流れの基礎式を示し、流速と圧力勾配の関係を線型化することにより圧力方程式を導いた。

(2) 複雑な装置形状、通気性分布を考慮できるように、数値計算の方法として、有限要素法を採用し、三次元の問題に適した要素として、20 節点 2 次アイソパラメトリック要素を用いた場合の計算式を示した。

(3) 節点圧力に関する連立方程式の解法として、ウェーブフロント法を用いたプログラムを作成し、その計算例を示した。計算結果は解析解、すでに検証済みの三次元軸対称モデルによる計算結果、及び冷間モデル実験結果とよく一致しており、本モデルの充填層内三次元ガス流れの基礎式、数値計算方法の妥当性が検証された。

Appendix 1 ERGUN 式の三次元化

充填層内の、ある局所領域で一様な流れがあるとした場合、等方性であれば、その方向によらず、流れ方向の圧力勾配は次式で表される。

$$-\partial P / \partial l = (a + b V_l) V_l \quad \dots\dots\dots (A-1)$$

この流れを直交座標系 $\{x, y, z\}$ で考え、 x 軸を流れ方向と平行にとると、

$$-\text{grad } P = \begin{Bmatrix} \frac{\partial P}{\partial x} \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} = (a + b V_l) V_l \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad \dots\dots\dots (A-2)$$

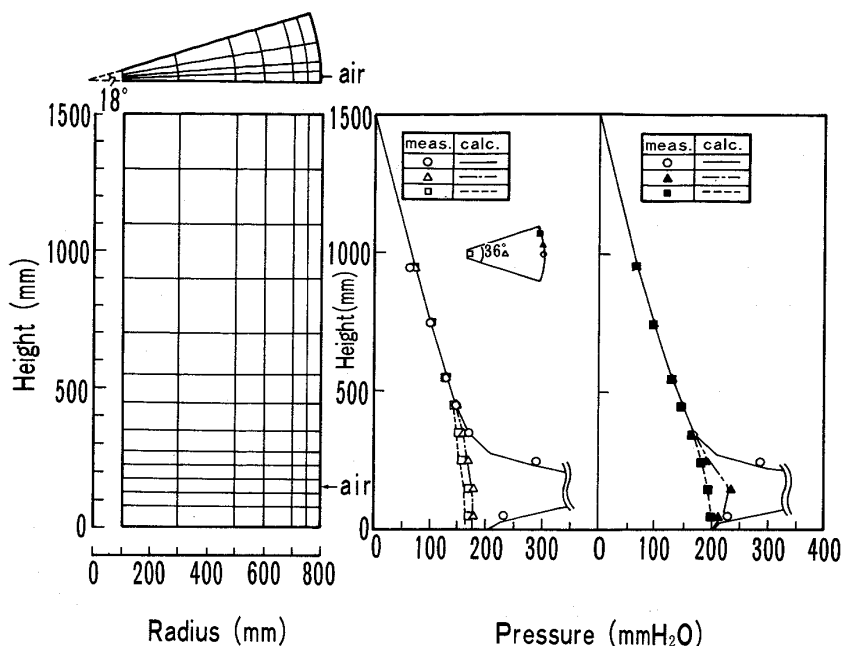


Fig. 6. Element division and comparison of pressure distribution calculated and measured for case B.

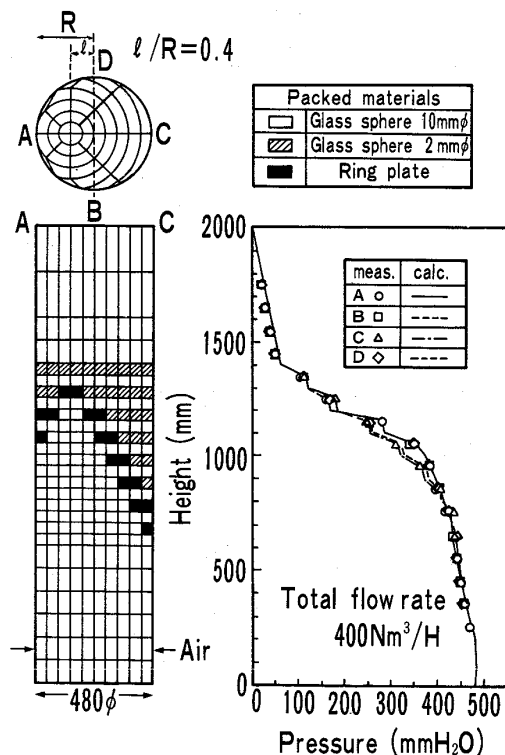


Fig. 7. Comparison of pressure distribution at wall measured and calculated for cylinder shape model with eccentric ring plate arrangement (Case C).

座標系 $\{x, y, z\}$ から座標系 $\{x, y, z\}$ に座標変換を行う。座標変換マトリクスを $[D]$ 、新しい座標系における圧力勾配を $\text{grad } P$ 、流れ方向の単位ベクトルを

$u = \{p, q, r\}^T$, 流速ベクトルを $V = \{v_x, v_y, v_z\}$ とすると
 $-\text{grad } P = -[D] \overline{\text{grad}} P$

$$= (a + bV_i) V_i [D] \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} = (a + bV_i) V_i \begin{Bmatrix} p \\ q \\ r \end{Bmatrix} \cdots (A-3)$$

流速の大きさ V_i を新しい座標系の速度成分で表すと,

$$V_i = |V| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} \cdots (A-4)$$

(A-3), (A-4)式より

$$-\text{grad } P = (a + b|V|) |V| \begin{Bmatrix} p \\ q \\ r \end{Bmatrix} \\ = (a + b|V|) V \cdots (A-5)$$

ところで, 通常のランダムに充填された充填層は, 等方的と考えられるが, 整然と配置された多管層, あるいは積層物などでは, 流通抵抗が異方性を示すと考えられる. この場合, 圧力勾配の方向と, 流速ベクトルの方向は一致せず, その関係は, 次式で表される¹⁸⁾.

$$-\text{grad } P = [H] V \cdots (A-6)$$

$[H]$: 流通テンソル

$[H]$ は, 対称テンソルなので¹⁸⁾, 座標系を選ぶことにより対角化することができる. その座標軸を $\{x, y, z\}$ とすると, (異方性の主軸と呼ぶ.)

$$-\text{grad } P = \begin{bmatrix} a_1 & 0 \\ & a_2 \\ 0 & a_3 \end{bmatrix} V \cdots (A-7)$$

等方性の場合の (A-5) とのアナロジーで, 拡張すると,

$$\begin{cases} a_1 = a_x + b_x |V| \\ a_2 = a_y + b_y |V| \\ a_3 = a_z + b_z |V| \end{cases} \cdots (A-8)$$

$[H]$ の逆マトリクス $[H]^{-1}$ は,

$$[H]^{-1} = \begin{bmatrix} 1/a_1 & 0 \\ & 1/a_2 \\ 0 & 1/a_3 \end{bmatrix} \cdots (A-9)$$

(A-7), (A-9)式から

$$-[H]^{-1} \text{grad } P = [H]^{-1} [H] V = V \cdots (A-10)$$

(A-10)式を(13)式の代わりに用いることにより圧力方程式が得られ圧力分布を計算することができる. ただし, (A-7)式が成立するのは, 異方性の主軸と座標系が一致している場合なので, 全体座標系と局所的に異方性の主軸が一致していない場合は, 座標変換して合わせる必要がある.

Appendix 2 GV と aVg_c の数値的比較

炉容 4000 m³, 操業度 2.0 t/m³日, ソリューションロス反応カーボン量 100 kg/t, 反応域の体積は, 炉容の 10% として, 400 m³ とすると, 質量生成速度 G は, 0.02 kg/m³・s となる. 一方, コークス層で, $d_p = 0.05$ m, $\varepsilon = 0.4$, $\phi_s = 0.7$, $\mu = 440 \times 10^{-7}$ kg/m・s とすると, $a \cdot g_c = 30$ kg/m³・s となる. 両者の比をとると, $G/ag_c = 0.7 \times 10^{-3}$ で, 十分に小さい. 通常の高炉条件では, GV の項は無視してもよいと考えられる.

Appendix 3 内挿関数 N_i

i	N_i	i	N_i
1	$1/8RST - 1/2(N_9 + N_{12} + N_{17})$	11	$1/4\dot{R}\dot{S}\dot{T}$
2	$1/8RST - 1/2(N_9 + N_{10} + N_{18})$	12	$1/4R\dot{S}\dot{T}$
3	$1/8RST - 1/2(N_{10} + N_{11} + N_{19})$	13	$1/4R\dot{S}\dot{T}$
4	$1/8RST - 1/2(N_{11} + N_{12} + N_{20})$	14	$1/4R\dot{S}\dot{T}$
5	$1/8RST - 1/2(N_{13} + N_{16} + N_{17})$	15	$1/4R\dot{S}\dot{T}$
6	$1/8RST - 1/2(N_{13} + N_{14} + N_{18})$	16	$1/4R\dot{S}\dot{T}$
7	$1/8RST - 1/2(N_{14} + N_{15} + N_{19})$	17	$1/4R\dot{S}\dot{T}$
8	$1/8RST - 1/2(N_{15} + N_{16} + N_{20})$	18	$1/4R\dot{S}\dot{T}$
9	$1/4R\dot{S}\dot{T}$	19	$1/4R\dot{S}\dot{T}$
10	$1/4R\dot{S}\dot{T}$	20	$1/4R\dot{S}\dot{T}$

$$R=1+r, S=1+s, T=1+t, \dot{R}=1-r^2, \dot{S}=1-s^2, \dot{T}=1-t^2 \\ R=1-r, \dot{S}=1-s, \dot{T}=1-t \quad (-1 \leq r, s, t \leq 1)$$

文 献

- 1) J. RADESTOCK and R. JESCHAR: Stahl Eisen, **90** (1970), p. 1249
- 2) S. ERGUN: Chem. Eng. Prog., **48** (1952), p. 89
- 3) V. STANEK and J. SZEKELY: AIChE J., **20** (1974), p. 974
- 4) M. CHOUDHARY, M. PROPSTER and J. SZEKELY: AIChE J., **22** (1976), p. 600
- 5) 桑原 守, 鞭 敏: 鉄と鋼, **62** (1976), p. 463
- 6) 羽田野道春, 栗田興一: 鉄と鋼, **62** (1976), p. 953
- 7) 大野陽太郎, 田島 治: 化学工学協会第 34 年会前刷集 (1974), p. 199
- 8) 大野陽太郎, M. SCHNEIDER: 鉄と鋼, **64** (1978), S31
- 9) 八木順一郎, 武田幹治, 大森康男: 鉄と鋼, **66** (1980), p. 1888
- 10) 工藤純一, 八木順一郎: 鉄と鋼, **72** (1986), p. 2032
- 11) 平岡正勝: 移動現象論 (1978), p. 14 [朝倉書店]
- 12) E. A. BRUN: Mecanique des fluides (Tome 2) (1968) [DUNOD]
- 13) 佐藤一雄: 物性定数推算法 (1954), p. 84 [丸善]
- 14) O. C. ZIENKIEWIEZ: The Finite Element Method in Engineering Science (1971), p. 295 [McGraw-Hill]
- 15) K. J. BATHE and E. L. WILSON: 有限要素法の数値計算 (菊池文雄訳) (1979), p. 141 [培風館]
- 16) H. MARGENAU and G. M. MURPHY: 物理と化学のための数学 I (佐藤次彦, 国宗真訳) (1965), p. 209, [共立出版]
- 17) E. HINTON and R. J. OWEN: 有限要素プログラミング (川井忠彦監訳) (1979), p. 175 [丸善]
- 18) A. E. SCHEIDEGGER: The physics of flow through porous media (1974), p. 79 [Univ. Toronto Press]