

## 紹介 1

## CFD (熱流体解析) の紹介

中央技術研究所 ソリューションセンター  
解析・シミュレーショングループ

せき ゆり  
関 友里



## 1. はじめに

CFDとは、Computational Fluid Dynamicsの略で、熱流体シミュレーションとも言われている。流体の流れや熱の移動をモデル化した方程式を、コンピュータで解くことによって、数値的に“模擬実験”を行い現象の予測を行う技術である(図1)。

当社でも、製油所・製造所におけるトラブル対策支援、水素ステーション関連や膜分離などの研究開発などにCFDを活用してきた。本稿では、CFDの原理・解析手順、適用例について紹介する。適用例としては、炭化水素膜分離への適用を挙げる。

なお、CFDには有限要素法、有限体積法、粒子法など様々な手法があり、当社でも解析目的によりこれらの手法を使い分けている。本稿では以降、炭化水素膜分離の解析で用いた有限体積法のCFDについて述べる。

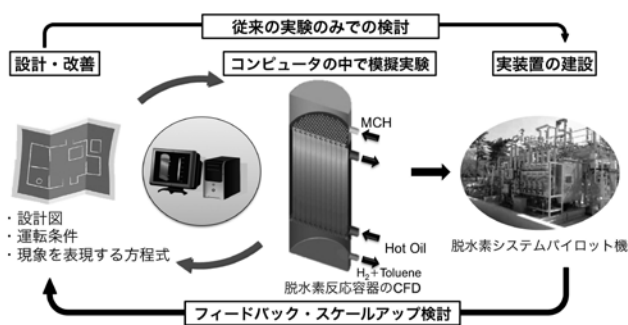


図1 CFDの活用

## 2. CFDの原理・解析手順

## 2.1 原理

CFDの計算では、まずメッシュ(図2右)を用意し、このメッシュ毎に各種方程式を計算する。方程式には基本式として以下(式1)～(式3)の質量、運動量、エネルギー保存式がある<sup>1)</sup>。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (\text{式1})$$

$$\frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (\text{式2})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v} (\rho E + p)) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\bar{\tau}_{eff} \cdot \vec{v})) + S_h \quad (\text{式3})$$

ここで、 $\rho$ :密度、 $t$ :時間、 $\vec{v}$ :流体の速度、 $p$ :圧力、 $\rho \vec{g}$ :重力体積力、 $\vec{F}$ :外部体積力、 $T$ :温度、 $k_{eff}$ :有効熱伝導率、 $\vec{J}_j$ :化学種jの拡散流速、 $\bar{\tau}$ :応力テンソル、 $E$ :単位質量あたりの全エネルギーである。また、 $S_m$ はプログラムなどで加えられる質量(設定しなければ0)で、 $S_h$ は反応熱やプログラムなどで加えられる熱である。

これらの式に、反応速度、蒸発、コーキング、透過などの現象を表す式を追加することで様々な現象についてのシミュレーションが可能となる。

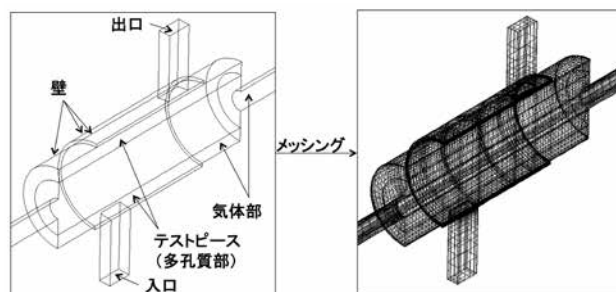


図2 形状作成とメッシュ

## 2.2 メッシュの作成

始めに計算領域である3D形状を作成する(図2左)。基本的には設計図に従って作成するが、計算負荷(計算時間やコンピュータの使用数)を抑えるために流れへの影響が限定的である微細な形状は簡素化する。図2では計算負荷軽減のためハーフモデルとしている。つぎに、図2左に示すように気体部、多孔質部、また液体部、固体部などの領域や、壁や出入口などの境界に分割する。

各領域・境界に分割した領域を更に細かいメッシュに分割する。メッシュは直線で表現された立体であり、細かくすればするほど精緻な形状を表現できる。しかし、前述した通り、各メッシュで各方程式を計算するため、メッシュが多くなると計算負荷が上昇する。そのため、変化が起りやすい加熱部や反応部位などではメッシュは細かくする

が、それ以外のところではメッシュは大きくして、計算負荷の低減を図る。

### 2.3 計算

各メッシュで計算する方程式は、定常/非定常、単相/混相、層流/乱流、エネルギー(伝熱、輻射、反応)のそれぞれの現象に、様々なモデルが提案されており、各解析目的に合ったモデルを取捨選択する必要がある。また、物性や流体の温度、流出量などの各種条件を設定する。また、必要に応じて攪拌槽回転翼、圧損抵抗係数、形状変形などの設定を行う。また、実験や文献に基づき、独自の追加モデル開発・プログラム作成を行い設定することも可能である。

CFDの計算では、最終的に各方程式の近似解を求める。計算実行中はすべてのメッシュで方程式の残差(前の計算の解との差)が小さくなるように変数が更新されていく。この際には、計算が発散せず安定に進むよう、緩和係数の調整や計算する方程式の選択などのコントロールが必要である。計算が十分行われ、残差が一定以下で安定すること、物質と熱の収支が合っていること、結果に矛盾が無いことを確認し、計算終了とする。

### 2.4 結果の視覚化・解析

結果を解析するためには、目的に応じ、任意の場所について現象を理解しやすいパラメータで視覚化する必要がある。基本的には、流速分布、温度分布、濃度分布などがあるが、各メッシュでの値を取り出すこともできる。その他にも、様々な切口で計算結果をわかりやすく表示させることができる。このような詳細な解析が可能のため、事前予測では捉えられない気づきがあり、CFD解析の醍醐味である。また、この気づきに合わせケーススタディを再構築し、更に解析を深めることができる。

## 3. 適用例「炭化水素膜分離の CFD モデル開発」

### 3.1 炭化水素膜分離プロセスの開発

当社では、経済産業省 資源エネルギー庁平成28年度「石油精製高付加価値化等技術開発補助金」事業を活用し、石油留分やオフガスから水素、アロマ・オレフィン・ノルマルパラフィン等を高濃度で分離回収する分離膜・膜分離プロセスの実用化技術開発を行っている。<sup>2)</sup> この技術開発により、付加価値の低い原料から付加価値の高い製品を製造し、石油のノーブルユース化を推進することで製油所競争力強化への貢献を目指している。

分離膜としては、高温での耐溶剤(石油留分)性の高いゼオライト膜が有望である。ゼオライト膜は一般的に、図3のように、支持体上にゼオライトを結晶成長させたものであり、薄く隙間なく製膜することで高性能が得られる。

ゼオライト膜を石油精製プロセスとして用いるには、複雑な組成からなる実石油留分・実ガスでも選択性を発現す

る分離膜を開発・選定することに加え、石油精製の現場で使用できる規模まで性能を落とすことなくスケールアップすることが重要である。そこで、図4に示すようにテストピースでの膜の開発・選定、1m長尺エレメントでの高表面積化検討、1m長尺エレメントを束ねた膜のモジュール化、プロセス化へと開発を進めている。

膜分離技術は、幅広い用途展開が期待できるプロセスであるが、本稿では特に軽質ナフサからのノルマルパラフィン分離を対象とした検討に焦点を当てる。膜分離導入により期待される効果は、軽質ナフサのオクタン価(ROK: Research Octane Number)向上、オレフィンの増産、アロマの増産である(図5)。

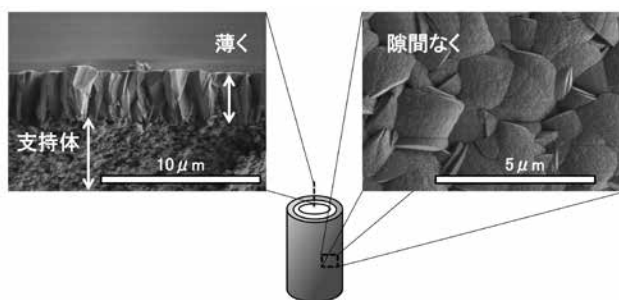


図3 支持体上に成長させたゼオライトの結晶



図4 開発のステップ

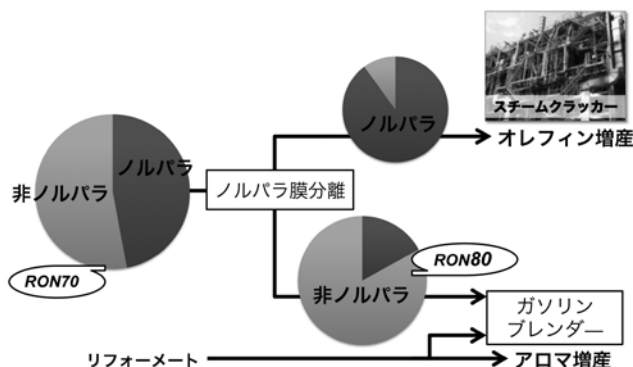


図5 軽質ナフサからのノルマルパラフィン分離

### 3.3 炭化水素膜分離プロセスの CFD モデルの構築

膜分離プロセスの開発については、開発をさらに加速させることを目的としてCFDの活用を検討中である。CFD活用の最終的な目的は、1m長尺エレメントを束ねたモジュールの流動状態の把握を行うことで、高効率化や長寿命化等、膜分離プロセスの開発に寄与することである。

これまでに、テストピースの CFD モデルの構築を行ったので紹介する。

(1) テストピースの CFD モデルの構築

テストピースは、図 4 のように長さ 3cm の円筒形である。円筒形の外側に分離膜層が形成されている。実験ではテストピースの外側に原料ガスを流入させ、透過するガスはテストピースの外側から内側に透過する。透過側流体にはキャリアガス (ヘリウムガス等) を流す。今回の CFD では、支持体は再現せず、分離膜を厚みのない円筒形の面として、図 6 左の塗りつぶし部のように表現した。

計算条件は、流量、圧力、温度条件を実験と合わせた。計算モデルについては、定常計算、单相、層流、化学種モデル、さらに実験から得た分離膜の透過特性式 (式 4) を追加した。なお、温度は一定としたので、エネルギー方程式は使用しなかった。

$$Q_i = q_i \times S \times (p_{i,in} - p_{i,out}) \tag{式 4}$$

$Q_i$  は物質  $i$  の透過量、 $q_i$  は物質  $i$  の透過係数、 $S$  は分離膜の面積、 $p_{i,in}$  および  $p_{i,out}$  は、それぞれ、物質  $i$  の供給側、透過側での分圧を示す。この式では、透過量が膜の面積と分離膜の両面の分圧差に比例することを示している。

この式 4 の CFD への適用方法を、図 6 を用いて説明する。図 6 はテストピースの概観図と分離膜部の断面模式図を示している。この分離膜と、分離膜両面に接する原料側、透過側それぞれの流体の一部を模式化したものを図 6 右に示した。

図 6 右の格子は、メッシュを表現している。この格子 1 マスごとに前述した各種モデル式の計算が行われるが、その計算に加えて式 4 の計算を分離膜部だけに適用する。まず、膜の両面 (供給側と透過側) に接するメッシュ (図 6 の網掛け部と斜線部) で計算された各透過物質の供給側と透過側それぞれの分圧 ( $p_{i,in}$ ,  $p_{i,out}$ ) を求める。つぎに、各物質の透過特性式 (式 4) を用いて各物質の透過量 ( $Q_i$ ) を算出する。この透過量を、図中の矢印のように、供給側 (図 6 網掛け部) で消滅させ、膜を挟んで向かい合う透過側のメッシュ (図 6 斜線部) で発生させる。このようなプログラムを作成することで、これを膜の両面に接するメッシュ全てに適用することで、CFD 上で分離膜による「透過」を再現した。

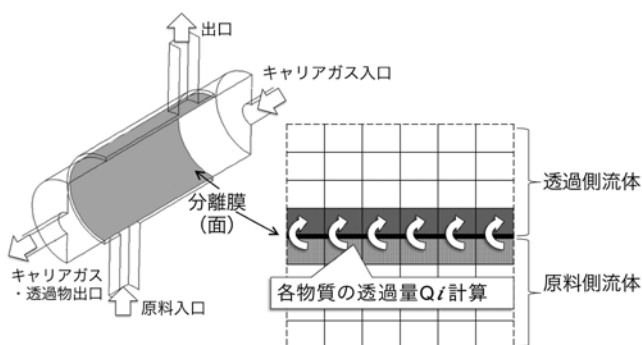


図 6 テストピース概観と透過モデルのイメージ

(2) テストピースの CFD 解析結果

CFD の計算結果例を図 7 に示す。図 7 左はテストピース断面でのノルマルパラフィン (以下 NP) の濃度分布を表す。断面図から、NP 濃度は透過側のキャリアガス入口部では低いが、原料中の NP を分離膜が選択的に透過することで、透過側の出口に向かうに従い高くなっていることがわかる。また、原料入口付近で NP 濃度が高くなっていることがわかる。図 7 右には原料側流体の出入口の断面と、分離膜近傍のノルマルパラフィンの濃度分布を示す。原料側での NP 濃度は、出口へ向かうに従い、低下していくことが確認できる。

その他、CFD の結果から計算した透過流束、NP 回収率、選択率などの指標は、実験結果とも良く一致しており、本計算モデルが問題なく機能することを確認している。一例として、図 8 に実験での透過流束と透過物中の NP 濃度を基準として、CFD の結果についての相対比較を示した。CFD の値は、実験結果と同等の値であった。また、原料側の流路断面の濃度勾配が小さいことを確認できた。原料側流路を狭くすることで濃度勾配が低くなるよう設計していたが、この設計効果を確認することができた。

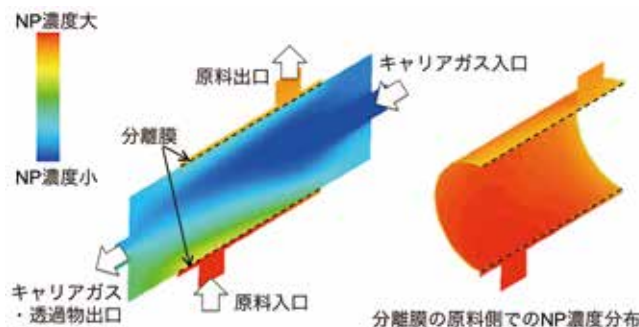


図 7 テストピースの CFD 結果

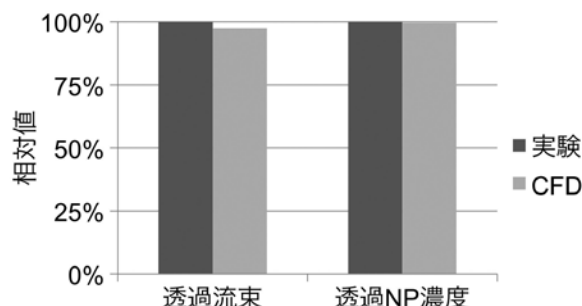


図 8 実験結果と CFD 結果の相対比較 (実験結果を 100 としたときの値)

(3) テストピースの多孔質支持体を再現した CFD 解析

CFD では多孔質である支持体を再現することも可能である。例として、図 9 に支持体を多孔質として再現した結

果を示す。多孔質としたことで、支持体部分ではガスの流れが遅くなり、透過した NP 濃度が高くなっている様子がわかる。支持体中でのガスの拡散速度や拡散の異方性は、多孔質の構造の違いにより変化すると考えられるが、これらを反映した流動状態の解析も可能である。例えば、図 9 のように支持体中での透過した NP 濃度が高くなると、式 4 より透過量が抑えられてしまうため、多孔質の構造をどの程度変えれば、どの程度透過した NP が低くなり、その結果、性能向上にどの程度寄与するかなどを定量的に解析し、開発の目標をより具体化することができると考えられる。また、支持体だけではなく、分離膜自体を面ではなく厚みのあるモデルとして計算することで、支持体同様に構造の寄与を計算することもできる。

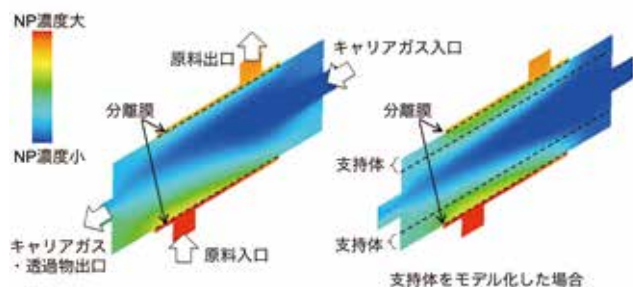


図 9 支持体モデル化の有無の CFD 結果の比較

以上のように、CFD での膜分離モデル開発を行い、流動状態の可視化を行った。予想していた流動状態と CFD の結果を比較検討し、プロセスと構造の妥当性確認や、改良アイデアの創出に繋げることもできる。また、本稿では紹介しなかったが、1m 長尺エレメントのモデル化も行っている。今後も膜分離プロセス開発に CFD を役立てていく予定であり、実験から得られた温度や圧力などの依存性や劣化予測を反映させたモデルも開発予定である。今後は、1m 長尺エレメントを束ねたモジュール形状での解析を行い、モジュール内の温度分布や濃度分布を把握することで、モジュール設計に寄与していく予定である。

#### 4. おわりに

CFD では、目には見えない装置内部の流速分布、濃度分布、温度分布等を把握することができる。また、実験では得られない箇所のデータや、実在しない新しい物性を持つ流体について試すこともできる。また、これらの解析から改善提案までを行うなど、より価値の高い解析を目指している。今後も、CFD を最大限に活用し研究開発の加速、製油所・製造所での収益改善等に貢献していく所存である。

#### － 参考文献 －

- 1) ANSYS, Inc.; ANSYS FLUENT 理論ガイド, (2015)
- 2) 小出隆太郎, 池田雅一; 経済産業省資源エネルギー庁 平成 28 年度「石油精製高付加価値化等技術開発補助金」成果報告書「先進的膜分離による高付加価値品回収技術開発」(2017)