じゃま板付かくはん槽内の流れの数値シミュレーションと 実験による検証*

湯 晋 一^{*1}, 梅 景 俊 彦^{*1}
中 野 良 徳^{*2}, 川 上 伸 一 郎^{*2}

Numerical Simulation of a Medium Reynolds Number Baffled Stirred Tank ($Re=4500$) and Experimental Verification

Shinichi YUU^{*3}, Toshihiko UMEKAGE,
Yoshinori NAKANO and Shinichiro KAWAKAMI

^{*3} Kyushu Institute of Technology, Dept. of Mechanical Engineering,
Sensui-cho 1, Tobata-ku, Kitakyushu, Fukuoka, 804-8550 Japan

The fourth order central finite difference scheme is applied to the convection terms in three-dimensional Navier-Stokes equations to simulate directly the flow fields in a medium Reynolds number baffled stirred tank. The rotational cylindrical coordinates with angular velocities are used to express boundary conditions on impellers. On the other hand the stationary cylindrical coordinates are adopted for baffles. When the fluid is water, the phenomena during 60 seconds, which are the sufficient time for obtaining various flow mechanisms and time averaged flow characteristics in a stirred tank, are simulated using this calculation method. The calculated results are in good agreement with the measured data. Then, this study makes a way for direct numerical simulations of various type stirred tank with various type impellers and baffles.

Key Words: Computational Fluid Dynamics, Numerical Analysis, Stirred Tank, Turbulent Flow, LDV, Flow Visualization

1. 緒 言

種々の物質をかくはん混合するかくはん槽は多くのプロセスにおいて、特に製造プロセスにおいてなくてはならない装置であるが、翼の回転やバッフルの存在によって三次元の複雑な流れが引き起こされているために、最も基礎となる流体の運動を定量的に明らかにすること、特にかくはん槽では低レイノルズ数の場合でも変動流が支配的であり、それらの運動を定量的に明らかにすることは現在に至ってもまだ達成されていないといっても過言ではない。かくはん槽の設計および操作条件の最適化は工業プロセスにとって最も重要な課題の一つであるが、前述したごとく内部の流体運動が定量的に把握されていないためにいまだに経験に頼っている部分が多い。計算機シミュレーションは設計および最適化に対する最有力な方法の一つと考えられ、現在の計算機やその周辺技術の発達を考えるとかくはん槽内の変動流の運動の直接数値シミュレーションも不可能ではないと考えられる。

直接数値シミュレーションができれば時々刻々のすべての流体運動のデータが得られるので、それらをまとめれば容易に設計、最適化に用いることができる。また、それらのデータを用いることにより精密な乱流モデルを導出する道も開けてくるだろう。かくはん槽の従来のシミュレーションは乱流モデルに基づいて平均特性を計算する研究がほとんどで、それらも乱流モデルの不正確さによって実験値との一致は難しかった。そこで従来の研究を概観すると、まず平均速度分布等の平均特性をシミュレーションによって求める研究がある。ほとんどが乱流域の計算で、乱流モデルとしては $k-\epsilon$ モデルを用いている研究⁽¹⁾⁻⁽⁶⁾ および二次の微分応力モデルを用いた研究⁽⁷⁾ がある。いずれの場合も平均速度分布の計算結果を実験値と比較しているが、必ずしも十分に正しく、計算結果は実験値を表現しているとはいえない。非定常計算を含む研究としては Hiraoka ら⁽⁸⁾ の $Re < 20$ のバッフルなしかくはん槽の計算、Harvey ら⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾ の $Re < 33$ のバッフルありかくはん槽の計算がある。いずれも Re 数が非常に低い粘性流に近い流れの領域で、通常のかくはん槽内の流れに現れる変動流はまったく見られない流れである。最近、松田ら⁽¹¹⁾ は $Re=2500 \sim 50000$ のかくはん槽における二次元 ($r-z$) 断面の流れパターンの長

* 原稿受付 2000年6月22日。

^{*1} 正員, 九州工業大学工学部(☎ 804-8550 北九州市戸畑仙水町1-1)。

^{*2} 九州工業大学大学院。

E-mail: yuu@mech.kyutech.ac.jp

周期変動を流れ関数を用いることにより明らかにしている。

しかしながら、 Re 数が数千以上で乱流に近い変動流が現れるかくはん槽中の流れの厳密な非定常計算はいまだほとんど行われていない。そこで本研究では Re 数が 4500 という変動流が支配的となるバッフルありかくはん槽内の流れを直接数値計算することにより、流れの最も基礎となる瞬時瞬時の特性値を明らかにしてかくはん槽内の流れを定量化し、かつそれらをもとにして流れの時間平均特性値を明らかにすること、またそれらを実験値と比較することで計算結果の正しさを明らかにすることを試みた。

2. 計 算 方 法

数値解析に用いた基礎式は非圧縮性流体の Navier-Stokes 式と連続の式で次式となる。

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{v} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{v}$, p , Re , t , ∇ はそれぞれ無次元化された速度ベクトル、圧力、Reynolds 数、時間とナブラ演算子である。無次元化は翼端周速度 U_t 、かくはん槽半径 R_0 、動粘性係数 ν で行っている。また、バッフルありかくはん槽内の流れであることから、動的マルチブロック法⁽¹²⁾⁽¹³⁾を使用している。図 1 に示すように計算領域を回転している翼を含む内側のブロック (A) と静止しているバッフルを含む外側のブロック (B) に分割する。そして回転翼、バッフルおよびかくはん槽外周壁に固体壁境界条件を適用できるようにブロック (A) に

Fig. 1 Computational domain

は回転円筒座標系を、ブロック (B) には静止円筒座標系を用いている。そのようにするとブロック境界面でのメッシュの格子点は一致しなくなる。このためブロック (A) の外側、ブロック (B) の内側にそれぞれ外点を設け、そこで逐一メッシュのずれを計算して、各方向速度を比例配分することによりお互いの計算に必要な計算点を求め、境界面付近のデータの受渡しを行い、数値計算できるようにしている。

静止円筒座標系での速度の軸方向、半径方向、周方向速度成分を u, v, W とすると、静止円筒座標系における Navier-Stokes 式および連続の式は次式となる。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial z} + v \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{W}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} \right] \quad (3)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial z} + v \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{W}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} - \frac{W^2}{r} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} - \frac{v}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial W}{\partial \theta} \right] \quad (4)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} + u \frac{\partial W}{\partial z} + v \frac{\partial W}{\partial r} + \frac{W}{r} \frac{\partial W}{\partial \theta} + \frac{vW}{r} = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial W}{\partial r} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 W}{\partial \theta^2} - \frac{W}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} \right] \quad (5)$$

$$\frac{v}{r} + \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial W}{\partial \theta} = 0 \quad (6)$$

また回転円筒座標系における速度は、軸方向速度 u 、半径方向速度 v は変化しないが、周方向速度 w は次式となる。

$$w = W - ar \quad (7)$$

ただし上式の a は角速度である。式 (7) に基づいた回転円筒座標系⁽¹⁴⁾における Navier-Stokes 式および連続の式は次式となる。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial z} + v \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{w}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} \right] \quad (8)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial z} + v \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{w}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} - \frac{(w+ar)^2}{r} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} - \frac{v}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right] \quad (9)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial z} + v \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{w}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{vw}{r} + 2av = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \frac{1}{Re} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} - \frac{w}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} \right] \quad (10)$$

$$\frac{v}{r} + \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} = 0 \quad (11)$$

実際の計算においては式(3)～(5), (8)～(10)の発散をとって得られる圧力に関する Poisson の方程式を緩和法によって解く。また各式中の慣性項の差分には四次の中央差分を用いた。一例を式(12)に示す。

$$\left(v \frac{\partial v}{\partial z} \right)_{i,j,k} = \frac{v_{i,j,k}}{12\Delta z} (v_{i-2,j,k} - 8v_{i-1,j,k} + 8v_{i+1,j,k} - v_{i+2,j,k}) \quad (12)$$

ただし、添字の i, j, k は z, r, θ 方向のメッシュ番号をそれぞれ示す。また、形状が複雑な翼、翼を支える円板、回転軸、バッフルから2メッシュ分の内点には一次の中央差分を用いた。慣性項以外の空間微分項の差分には二次の中央差分を用いた。また、時間発展項には二次の Runge-Kutta 法を用いた。

各方向の無次元格子幅 $\Delta z, \Delta r, \Delta \theta$ はそれぞれ $\Delta z = 0.01696$, $\Delta r = 0.01639$, $\Delta \theta = 0.01689$ で全空間で一としている。流れが均質な乱流になったとしたときの平均的な Kolmogorov のミクروسケール(=0.01721)よりいずれの格子幅もわずかに小さくなるように設定している。全内点格子数は $124 \times 56 \times 372 \approx 2.6 \times 10^6$ である。また無次元時間ステップ幅は $\Delta t = 0.001$ である。レイノルズ数は $Re = U_i R_0 / \nu = 4500$ で、同一レイノルズ数の実験より各次元値を求めると、かくはん槽半径 $R_0 = 95$ mm, 翼端半径 $R_t = 37.4$ mm, $U_i = 0.0474$ m/s(水の場合), 0.711 m/s(空気の場合)である。これを回転数で表すと $N = 12.1$ rpm(水), 181.5 rpm(空気)となる。また無次元時間ステップ幅を同様に有次元に換算すると, 2.00×10^{-3} s(水), 1.34×10^{-4} s(空気)となる。翼、翼を支える円板およびバッフルの形状を図2に示す。

このような条件下で6枚翼バッフルありかくはん槽について32000 cycle(実時間換算64 s)まで計算を行った。

3. 実験装置および方法

本実験に用いた実験装置全体図を図3に、かくはん槽を図4にそれぞれ示す。プロペラ、円板は真ちゅう、駆動軸はステンレス、外筒および上下のふたにはアクリルを使用した。かくはん槽の内部の寸法は図4に示すとおりで、これらは計算条件と対応している。外筒および上下面は固定され、流体には水を使用した。このとき上ぶたの駆動軸貫通部から気泡が進入してかくはん槽内に自由表面ができることを防ぐため、かくは

ん槽上ぶたの上部には駆動軸を囲む壁を設けて水を満たした。駆動軸と穴の直径の差(すきま)は約0.2 mm

Fig.2 Impeller and baffle

Fig.3 Experimental apparatus

Fig. 4 Stirred tank

で、色素を用いた観察により、このすきまを介した流体の流れはほぼ無視できることを確認している。駆動軸は減速機付きの直流電動機によって回転する。

このとき、駆動軸の回転数は電動機に加える電圧を変えることによって変化させる。レイノルズ数は定常回転時の計算条件と同じ $Re=4500$ に設定している。

容器はトラバース装置により z 方向(上下方向)に約 700 mm, r 方向(半径方向)には約 300 mm 移動することが可能で、任意の装置の流体の各方向速度や乱流強度などを容器ごと移動させることにより、台上に固定したレーザドップラー流速計により測定する。また、トレーサ粒子には粉ミルクを用いた。図 3 に示すように、レーザの入射部が平面を通過するようにかくはん槽を直方体の水槽の中に設置した。

また、本研究では蛍光粒子を用いた可視化実験を行い、流れ場の瞬時等渦度線図の計算結果と比較した。蛍光粒子(Turner 社, No. 042)は蛍光染料が塗布された薄片状の雲母粒子(直径 $10\sim30\mu\text{m}$, 厚さ $0.3\sim0.7\mu\text{m}$, 密度 $3\times10^3\text{ kg/m}^3$)で、均一な混合を促すために微量のエチルアルコールを用いていったんペースト状にした後、純水中に質量基準で 0.025% の濃度で混合した。実験は暗室で行い、かくはん槽の側面からスリットを通してストロボスコープを発光させ、ビデオカメラを用いて 1/60 s 間隔の流れ場を撮影した。

4. 結果および考察

図 5 に $r-\theta$ 平面の $Z/R_0=0$, すなわち翼の中央断

Fig. 5 Calculated instantaneous velocity vector diagram [$t=60\text{ s}$, $r-\theta$ plane ($Z/R_0=0$)] Fig. 6 Calculated mean velocity distributions of r component ($Z/R_0=0$)

面における瞬時速度ベクトル線図を示す。

翼は左回りに回転している。始動してから 30 000 Δt (実時間換算すると水の場合で 60 s) 後で、翼は約 12 回転しており、かくはん槽として定常な流れである。翼から押し出された流れがパッフルに到達し、その前後で渦を形成している。また、翼から押し出された流れが弧を描くように広がっていることがわかる。

図 6, 7 に図 5 と同様の断面における半径方向速度分布, 周方向速度分布の計算結果をそれぞれ示す(ただし, V および $\bar{W}$ は半径および周方向有次元速度である)。図 6, 7 に用いたデータは図中に記されているサイクル数間の平均値を示している。いずれの速度分

布も回転開始から時間が経過するにしたがい増加し一定値に収束している。図 6, 7 からわかるように、この断面では半径方向速度、周方向速度ともに約 14 s 後に平均値は定常に達する。また、槽内全体が定常となるのは約 40 s 後であるため、定常状態の流れ(もちろん時間変動は存在するが平均値が一定値をとる)を吟味するために回転開始から約 40 s 以降の計算結果を用いる。

図 8 に周方向速度のエネルギースペクトルの計算結果を示す。エネルギースペクトルは $21\,760\,\Delta t$ (実時間換算 43.52 s) から $32\,000\,\Delta t$ (実時間換算 64 s) の間の瞬時の速度データを $5\Delta t$ ごとに 2 048 個サンプリングして FFT 変換することによって求めた。サンプリング位置は翼の中央断面 ($Z/R_0=0$) で翼端から 2 メッシュ外側である。値は有次元換算している。翼が 12.1 rpm で回転しているので周波数は 0.202 Hz となり、翼が 6 枚あるので、翼が通過する周波数は 1.21 Hz となる。図 8 から明らかなように、約 1.2 Hz の

Fig. 7 Calculated mean velocity distributions of θ component ($Z/R_0=0$)

Fig. 8 Calculated energy spectra of θ component fluctuating velocities ($Z/R_0=0$, $R/R_0=0.43$, $\theta=0.07$ rad)

(a) $t=8$ s

(b) $t=24$ s

(c) $t=64$ s

Fig. 9 Visualizations of flow fields (z - r plane)

倍数で周波数にピークが出ており、翼によって誘起された渦が分裂を繰返し小スケールの渦に変化していることがわかる。

瞬時の等渦度線図の計算結果と蛍光粒子を用いてかくはん槽の流れを可視化した結果との比較を図9で行った。図示したのは r - r 平面でかつ翼を含む平面である。翼の回転始動時からほぼ同時刻経過後の計算結果と実験結果を比較している。図9(a)は回転開始後約8sの結果であるが、計算、可視化実験ともに翼の回転によって押し出された流れが外周壁に到達して上下に広がり始めているようすをとらえている。図9(b)は回転開始後約24sの結果である。外周壁に到達した流れがほぼ対称性を保ちながら、上下に広がっていき、循環作用が起こり始めている。また、軸付近にも渦が発生していることがわかる。図9(c)は回転開始後約64sの結果である。流れが上下壁に達し、槽内全体が完全にかくはんされたようすがわかる。

図10～15で平均速度分布および乱流強度分布の計算結果を実験結果と比較検討した。時間平均を行ったのは計算結果は $27\,000\Delta t$ から $32\,000\Delta t$ の約 $5\,000\Delta t$ (実時間換算で約10s)間である。実験結果もほぼそれと同時間間隔で平均を行った。なお計算結果は、レーザドップラー流速計を用いて測定した静止座標系における各測定点での実験結果と比較可能なように、静止座標系の値に直した各測定点の速度を使用している。図10に平均半径方向速度の翼中央の r - θ 断面の半径方向分布の計算結果と実験結果の比較を示す。平均半径方向速度 V は翼端周波数 U_t の約0.4倍の大きさになっている。また、 $R/R_0=0.9$ 付近から外周壁の影響により次第に速度が減少していることがわかる。図11に平均周方向速度 $\bar{W}$ の半径方向分布を示す。

Fig. 10 Mean velocity distributions of r component ($Z/R_0=0$)

翼近傍では翼端周速度 U_t に近い値を示しているが、外周壁方向に行くにしたがい翼の影響が弱まり、次第に速度が減少していることがわかる。図12に翼端から2メッシュ半径方向に外側の位置の平均周方向速度の上下方向分布を示す。図11と同様に翼近傍では翼端周速度 U_t に近い値を示している。翼から上下方向に少し離れると周方向速度は急速に減少している。図12より翼の回転速度によって高い周方向速度が誘起されるのは翼幅と同程度の領域であることがわかる。それ以上翼から離れると図12からわかるように U_t の20%以下となる。いずれの平均速度分布の計算結果も実験結果と良好な一致を示している。

図13～15に半径方向および周方向速度乱流強度の半径方向分布および周方向速度乱流強度の上下方向分

Fig. 11 Mean velocity distributions of θ component ($Z/R_0=0$)

Fig. 12 Mean velocity distributions of θ component ($R/R_0=0.43$)

 Fig. 13 Turbulent intensity distributions of r component ($Z/R_0=0$)

 Fig. 14 Turbulent intensity distributions of θ component ($Z/R_0=0$)

布を示す。図5の r - θ 平面ベクトル線図に示されているように、翼近傍に強い半径方向、周方向速度が誘起されるので $Z/R_0=0$ の r - θ 断面の翼近傍の半径方向、周方向の乱流強度は大きく、 U_t の20%程度である。翼端から2メッシュ半径方向に外側の位置における上下方向分布を図15に示す。翼の回転の影響が $Z/R_0=\pm 0.10$ 程度まで及び、平均速度に与える影響とほぼ一致している。

5. 結 言

翼端速度およびかくはん槽半径基準のレイノルズ数が数千以上で、大規模渦を中心として多数の渦が形成され変動流が支配的なかくはん槽内の瞬時瞬時の流れを三次元 Navier-Stokes 式を直接数値計算することにより明らかにした。また、翼が回転開始から流体を水として実時間に換算して約64s間の瞬時瞬時の現象を計算機によって明らかにした。回転開始から64s

 Fig. 15 Turbulent intensity distributions of θ component ($R/R_0=0.43$)

間はかくはん槽内の定常な平均特性値(平均速度分布等)を得るのに十分な長さである。計算においてはマルチブロック法を用い、一定角速度で回転する複雑形状の翼、翼を支える円板、回転軸と静止しているじゃま板を固体壁境界条件を用い上記の変動流が支配的なかくはん槽内の流れを明らかにした。平均速度分布や乱流強度分布の計算結果は実験結果をよく表現しており、本計算手法および本計算結果が実際のじゃま板付かくはん槽の流れの表現に用いることができることを示した。従来、かくはん槽内の流れでは非常に低いレイノルズ数の場合でも平均速度分布でさえ計算が完全に正しく表現することは難しかった。本研究によって平均特性はもちろんのこと、瞬時瞬時の流れを明らかにすることによって、より詳細な流れのメカニズムを明らかにすることができた。かくはん槽内の流れを現在の計算技術を用いればここまで明らかにすることができるということを明らかにした。

文 献

- (1) Tavlarides, J. P. L. L. and Smith, G. W., *AIChE J.*, **32** (1986), 1771-1786.
- (2) Kresta, S. M. and Wood, P. E., *AIChE J.*, **37** (1991), 448-460.
- (3) Dong, L., Johansen, S. T. and Engh, T. A., *Chem. Eng. Sci.*, **49** (1994), 549-560.
- (4) Ranade, V. V. and Van Den Akker, H. E. A., *Chem. Eng. Sci.*, **49** (1994), 5175-5192.
- (5) Morud, K. E. and Hjertager, B. H., *Chem. Eng. Sci.*, **51** (1996), 233-249.
- (6) Launder, B. E. and Spalding, D. B., *Comput. Math.*

- Appl. Mech. Eng.*, **3** (1974), 269-289.
- (7) Clofalo, M., Brucato, A., Grisafi, F. and Torracca, N., *Cham. Eng. Sci.*, **51** (1996), 3557-3573.
- (8) Hiraoka, S., Yamada, I., Aragai, T., Nishiki, H., Sato, A. and Takagi, T., *J. Chem. Eng., Jpn.*, **21** (1988), 79-86.
- (9) Harvey III, A. D., Lee, C. K. and Rogers, S. E., *AIChE J.*, **41** (1995), 2177-2186.
- (10) Harvey III, A. D. and Rogers, S. E., *AIChE J.*, **42** (1996), 2701-2712.
- (11) 松田充夫・多田 豊・平岡節郎・上更谷幸治, 化学工学論文集, **25**-1 (1999), 99-105.
- (12) Takeda, H., Narasaki, K., Kitajima, H. and Sudoh, S., *Comput. Fluids*, **22** (1993), 223-228.
- (13) 竹田 宏, 化学工学, **58** (1994), 189-184.
- (14) Greenspan, H. P., *The Theory of Rotating Fluids*, (1968), 5, Cambridge Press.
-