

従来の格子法では困難な化学プロセスにおける 反応・拡散・揮発のモデル化を Particleworks SDK (ソフトウェア開発キット)で実現

三菱ケミカル株式会社は、日本最大の総合化学企業グループである株式会社三菱ケミカルホールディングス傘下の中核事業会社です。化学分野を中心に長年培われてきた技術基盤をもとに、広く社会に貢献し未来を拓く事業活動を展開されています。この度は、福岡県北九州市の同社黒崎事業所に訪問させていただき、開発研究所 生産技術グループ 主任研究員の菊地康晴様に、「化学プロセスの検証過程における粒子法解析ソフトウェアParticleworksの活用事例」についてお話を伺いました。

御社の事業内容や開発研究所のお仕事についてご紹介下さい。

三菱ケミカルホールディングスグループ全体としては、情報・エレクトロニクス分野向けの高付加価値製品や、広範な樹脂加工品・フィルム製品・炭素繊維などの「機能商品」、医薬品や診断製品などの「ヘルスケア」、基礎化学品・炭素製品・産業ガスなどの「素材」の3分野で事業を展開しています。その中で、三菱ケミカルは「機能商品」と「素材」の2つの事業に携わっています。わかりやすく自動車関係で例を挙げますと、車のヘッドライトのポリカーボネイト、タイヤの中に入っているカーボンブラックなどの素材を作っています。またそれらの原料や加工品に加え、電池や有機EL照明なども取り扱っています。

開発研究所では、これらの製品の開発に関わる化学プロセスに関して研究を進めています。化学プロセスとは、簡単にいうと気体・液体・固体の原料を混合、反応、分離することで製品を作るプロセスです。例えば、メタノールなどの原料をタンクに入れて混合し、その後ポンプで運んで反応器に入れます。この反応器は、主に攪拌翼によって混ぜて反応させる攪拌槽を用いております。この中で様々な攪拌翼を使って混ぜたり、熱を加えたり、空気を入れるなどして反応させる反応プロセスの研究・解析をしています。その他、医薬用での化学分離の方法として、成分を結晶化させ

て析出させる晶析というプロセスの研究・解析をしています。また、配管を経由して製品を搬送する際に滞留部やガスが発生するという問題や、熱交換機を使った冷却・余分なものを精留して再利用するプロセスに対し、シミュレーションによる解析を適用し、事前に現象を予測・対策立案しています。

Particleworksはいつ頃どのような理由で導入されたのでしょうか。

開発研究所では、25年以上前よりCADやCAEツールを様々な研究に利用しており、今では常に80%以上の稼働率でそのようなデジタルツールを活用しています。流体ものを扱う化学プロセスの性質上、流体

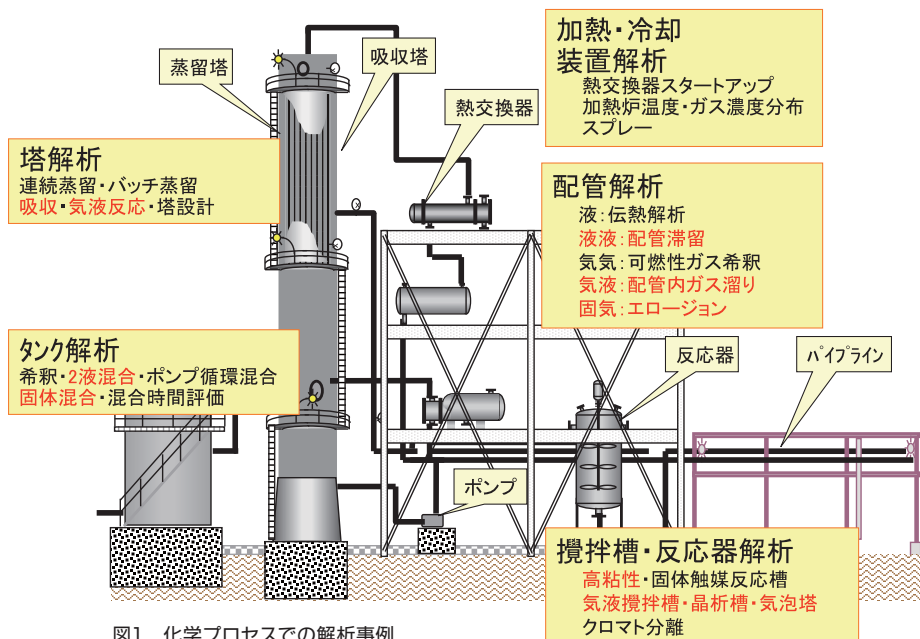


図1 化学プロセスでの解析事例

解析も長年使用してきましたが、従来の格子法流体解析ソフトウェアでは、自由表面の問題を扱う際、十分な界面精度で計算できなかったり、界面が大変形する場合は評価が上手くできないという問題がありました。そこで、別の計算手法がないか探していた際に、参加した学会で粒子法の存在を知り、粒子法を採用した商用ソフトウェアの導入を検討していたところ、Particleworksを知って購入に至ったというわけです。それが約7年前です。Particleworksは、GPUコンピューティングへの対応も早く、計算コストを改善させるといった目的も達成できました。現在はCAEを利用している20名程の技術者の中で、4名がParticleworksを利用しており、常に2~3のジョブが流れていますので、利用頻度としてはかなり高いです。

それでは、Particleworksで解析した例をご紹介しますか。

当社化学プロセスにおける様々な解析事例を図1に挙げていますが、気液や固液など2つ以上の相にまたがる多相問題が比較的多くなっています。この中で、攪拌槽・反応器への適用事例をご紹介します。一般的には攪拌槽は縦型が多いのですが、これは主に低粘度の材料を攪拌する用途で使います。縦型攪拌槽の中には攪拌翼があり、沸騰、蒸発、気泡の合一や分裂、そして回転することにより上部界面がすぼまる現象などが起こります。場合によっては触媒が入ることもあり、そのような固体粒子の沈降も見られます。これらの検証は従来から用いていた格子法流体解析ソフトウェアで、ある程度複雑な現象まで解析できるようになっていますが、激しい自由表面の変化がある解析には、Particleworksを活用しています。一方、材料が高粘度となる場合には、縦型ではなく横型反応器を使用することもあります。このように、反応させる材料の粘度に合わせて適切な攪拌槽・反応器を選択しています。

例えば、ポリマーを重合反応させる製造工程では、初めは低粘度の約1cPから攪拌するのですが、重合していくと結果的に約10000Pという高粘度になります。このような場合は、高粘度用の横型反応器を用いる場合があるのですが、そのプロセスの解析には従来の格子法流体解析ソフトウェアではあまり実績がありませんでした。その理由は、翼形状が複雑で流体の動きも複雑となりモデル化が非常に難しかったからです。また、一般的な格子法ではVOF法がよく使われるようですが、VOF法では自由表面がぼやけてしまうことがあり、はっきりと界面が表現できないことがあります。図2のように同じ解析を格子法と粒子法で比べてみました。粒子法では液面がダイナミックに変形するような場合でも界面が非常に高精度で表現できることがわかり、特に横型反応器には粒子法が非常に得意な解析方法だということがわかりまして、Particleworksの適用を進めております。

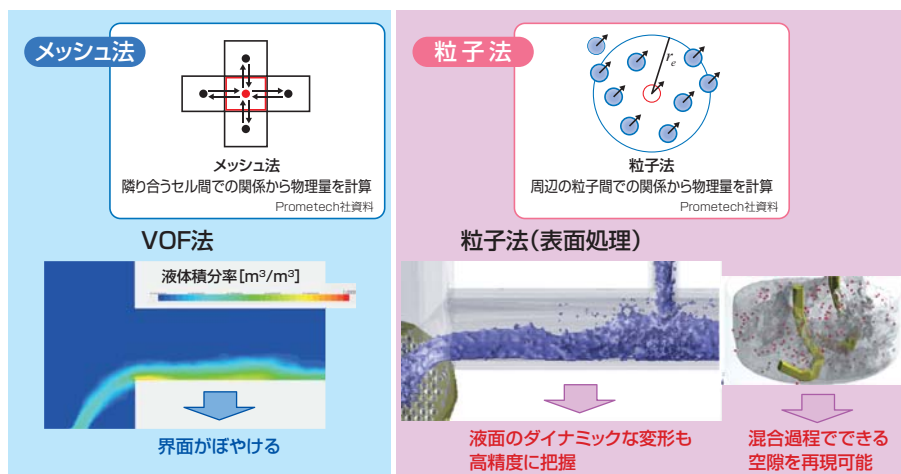


図2 格子法と粒子法による自由表面解析の比較

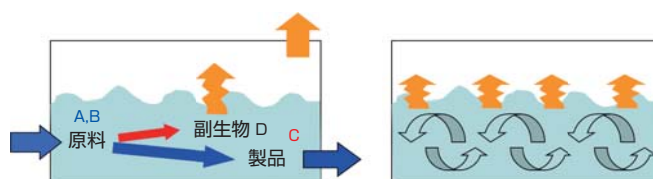


図3 横型攪拌槽による反応プロセス

具体的に、横型攪拌槽による反応プロセスについてですが、図3のように原料Aと原料Bを反応させると製品のCと副生物のDが生成します。ここで難しいのは、平衡反応と言って、CとDばかり生成してしまうとまた分解してAとBに戻ってしまいます。ですから、副生物のDを抜かないと反応が進みません。そのために、攪拌槽の中で翼を回転させ、中に滞留しているDを表面に出し除去していきます。実際の挙動としては、反応は結構速いのですが、高粘度なので中に溜まっているものはなかなか表面に出て来ないために、除去速度が非常に遅いのです。この除去を促進することが重要で、全体を十分攪拌することにより界面積や混合性を増して除去を促進しています。この反応速度は実験すれば計測できるのですが、除去速度は実験で求めるのは大変難しく、以前は運転実績から大体の速度を予測していました。また、条件を変えると除去速度がどう変化するのかも、予測は容易ではありません。ですので、ここでもParticleworksを活用して界面積や混合性を評価し、除去速度を求めることに成功しました。

| | 初期濃度 | 外部濃度 | 液中拡散係数 | 表面拡散係数 |
|---|------|------|--------|--------|
| A | 1000 | 1 | 1 | 0.1 |
| B | 1000 | 1 | 1 | 0.05 |
| C | 1000 | 1 | 1 | 0.02 |
| D | 1000 | 1 | 1 | 0.01 |

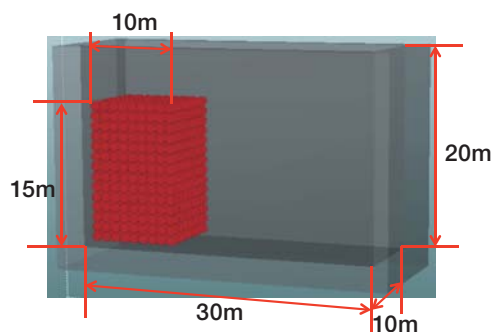


図4 ダムブレイクの問題におけるパラメータ

ソフトウェア開発キットSDKも
利用されていますが、
具体的にどのような解析に
使われているのですか。

粒子法は、界面積を高精度に捉えられる点で非常に良いのですが、Particleworksの標準機能だけでは、先ほどのDがどのように抜けていくかを計算することは出来ませんでした。そこで、Particleworksのソフトウェア開発キットSDKを導入し、攪拌槽における反応・拡散・揮発を表現すべく、モデル化の検討を行いました。SDKでのモデリングの方法ですが、ある成分Xの濃度の方程式は、液中拡散と界面揮発と反応という3つのソース項で作れます。拡散のラプラシアンは、Particleworks内の式と同じ式を使用しました。界面の揮発については浸透説の式を使用し、界面積はParticleworks内の界面判定・界面積計算式を使用しました。そして、反応は一般的なテキストに載っているような化学反応式を自分で書いています。

この拡散と揮発と反応のモデルが正しく動くかということ、**図4**のようにダムブレークの問題を使って検討しました。ここではA、B、C、Dの4成分を設定し、外と中の最初の濃度は同じとし、傾向を見るために拡散係数を変えています。また、初期粒子間距離は1mと設定しています。まず初めに拡散モデルの妥当性を検討しました。**図5**のようにダムブレークで急激に液が流れつつ、中の成分も拡散していく様子になり、正しくモデル化ができていたことを確認できました。

次に反応モデルを検討しました。例えば成分Aの変化を見ると、**図6**のように時間の経過とともにAの濃度が減少してきます。そして最後は逆転してまた色としてはオレンジに戻り濃度が上がったことがわかります。これが先に説明した平衡反応です。この反応式自体は簡単な式なので手計算

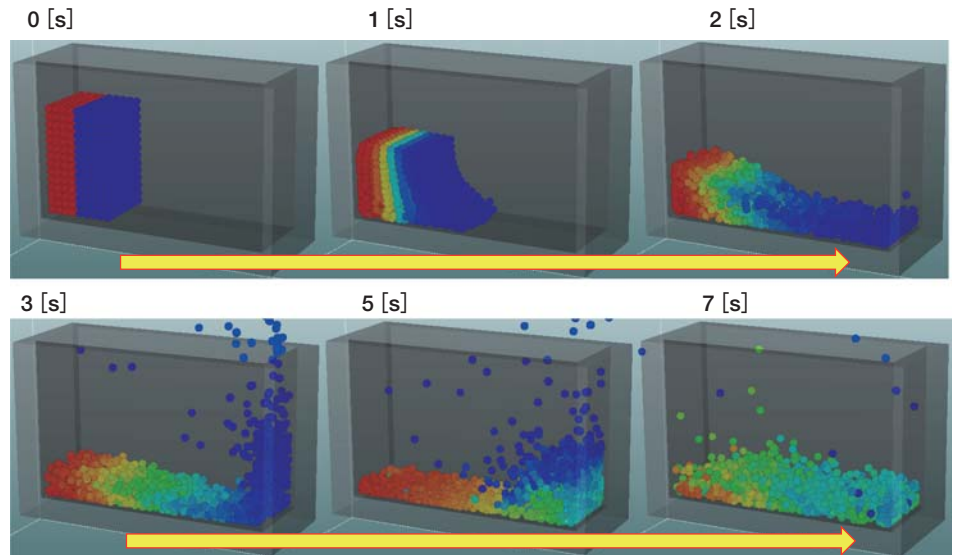


図5 拡散モデル濃度A経時変化

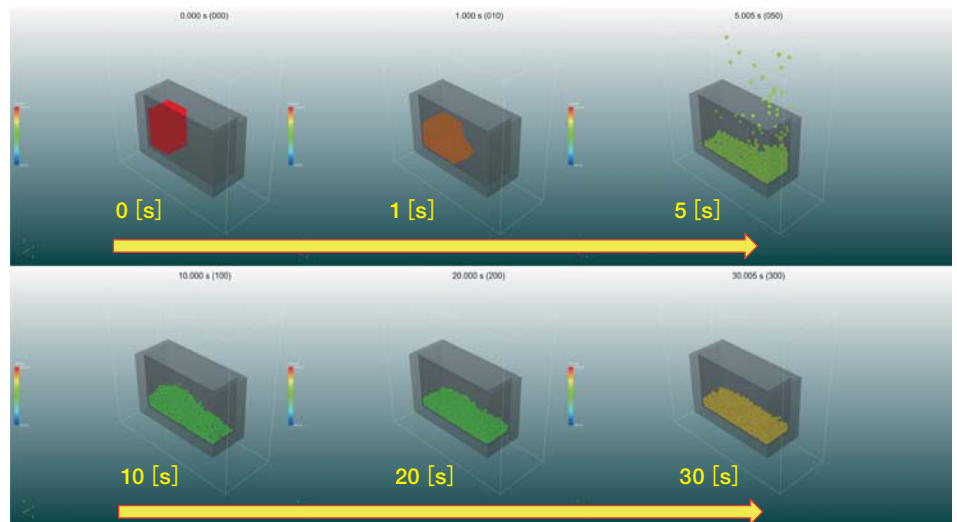


図6 反応モデル濃度A経時変化

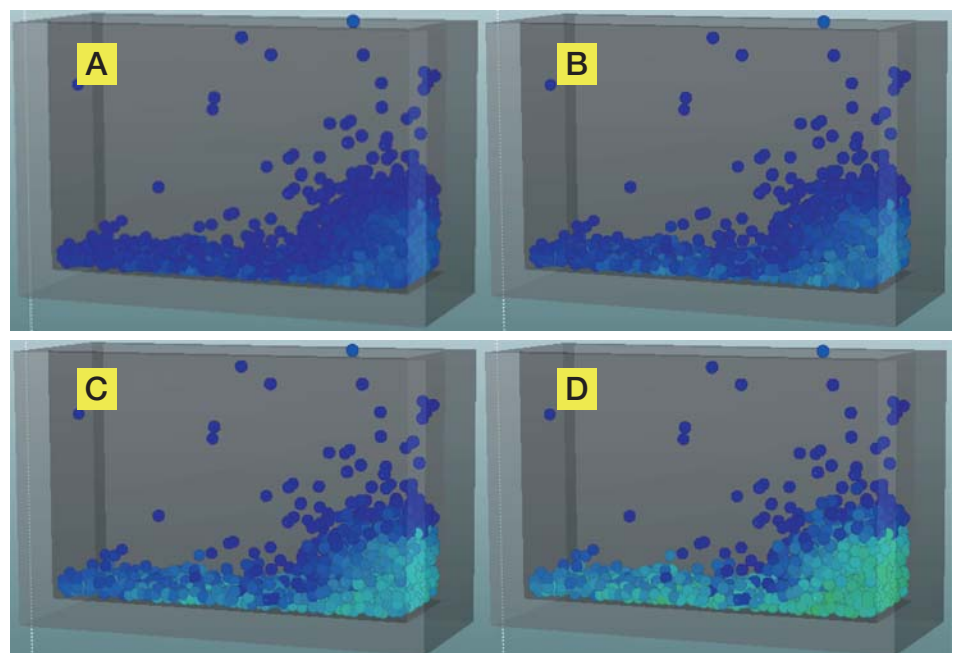


図7 揮発モデル各濃度経時変化5s時

で理論解を出したのですが、これと解析結果は一致しており、反応モデルも正しくモデル化出来ていることがわかりました。そして最後に揮発モデルを検討しました。A、B、C、Dと少しずつ異なる拡散係数を定義することにより、揮発の度合いを変えました。図7のように結果としてそれぞれ濃度が違っており、Dが一番見やすいと思いますが、表面濃度が低くなっていて中はまだ濃度が高いということで、表面からだけその成分が抜けていることが確認でき、揮発も正しくモデル化出来ていることがわかりました。

これまでで一見モデル化は問題ないように思えたのですが、実はよく見てみると、時間の経過1秒のところ、界面ではないはずのところの壁際で揮発が起きていることが判明しました。これは、最初の0.1秒で壁近傍まで界面積が計算されていることが問題でした。また、定常状態のところも理論解より界面積が大きくなっており、揮発に重要になる界面積の計算にずれがある問題も判明しました。これらは、標準で設定されている界面判定パラメータや計算方法などの問題だとわかりましたので、そのあたりはプロメテックさんに相談して、界面積の計算の仕方を変えて改善していきました。表面判定を少し工夫し、標準で採用している圧力計算とは異なる式で計算すると、理論解とほぼ同等の解が得られ、評価としては十分使えるということになりました。

化学プロセスにおいては多相問題が多く、粒子法が生かせる場面は非常に多いのですが、現時点ではParticleworksの標準機能だけでは全てを評価できない場合もあります。しかし、このようにSDKを使うことによって、反応や拡散、揮発など特殊な現象のモデル化も可能になり、わたしたちの研究を前進させることが出来ました。

今後の解析業務や研究の展望、 プロメテックへの期待などを お聞かせ下さい。

今後、実業務への適用範囲については、ラグランジュ手法が活かせるような混練系や分散系、それから剛体と流体の連成問題、またこれまでの実績を発展させて大変形する自由表面問題へのParticleworksの適用を進めたいと考えています。また、研究においては現象の可視化・具現化が研究の加速につながると考えていますので、今後も積極的に適用していきたいと思っています。Particleworksの機能そのものについては、モデル、精度、大規模計算、プリポスト拡張など項目としては要望が多いのですが、プロメテックさんには今後も着実にユーザーとともにソフトを育てて頂きたいと期待しております。



開発研究所
生産技術グループ 主任研究員
菊地康晴様

貴重なご意見ありがとうございます。三菱ケミカル様は、Particleworksのユーザーの中でも、最も初期からご活用下さっている企業の一社で、これまで開発に対して参考となる意見を多く頂戴してきました。今後もこのようなお言葉をいただきながら、より一層成長していきたいと思っています。この度は、業務のお忙しい中インタビューにご協力下さいまして誠にありがとうございました。引き続きより良い製品開発をご支援できるよう、プロメテック一同ご支援させていただきます。

参考論文

Prometech Simulation Conference 2015 講演資料

取材日 2015年12月10日

三菱ケミカル株式会社
Mitsubishi Chemical Corporation

本社所在地：東京都千代田区
創業：1933年8月
事業内容：機能商品分野（情報電子、機能化学、電池）、素材分野（基礎化学品、炭素、合成樹脂）
ホームページ：<http://www.m-chemical.co.jp>



Particleworks®
Particle-based simulation software for CAE

Particleworksは粒子法の一つとして開発されたMPS法 (Moving Particle Simulation) の理論に基づく流体解析ソフトウェアです。格子生成が不要な新しい計算手法で、流体を粒子の集まりとして表現し、飛沫などの自由表面をとまなう液体の挙動を高精度に安定して解析できます。

開発元・国内・海外総販売店

PROMETECH.

プロメテック・ソフトウェア株式会社

本社 〒113-0033 東京都文京区本郷三丁目34番3号 本郷第一ビル8階
TEL: 03-5842-4082 FAX: 03-5842-4123

西日本支社 〒460-0008 愛知県名古屋市中区栄一丁目3番3号 朝日会館7階
TEL: 052-211-3900 FAX: 052-211-3901

URL: www.prometech.co.jp
E-mail: sales@prometech.co.jp

プロメテック・ソフトウェア株式会社に事前の承諾を得ることなく、本記事の全部または一部を使用（複製・改ざん・頒布・送信・上映）することを禁止します。また、ダウンロード、プリントアウトされた複製物を、不特定または多数の人へ送信・配布することはできません。

本記事の内容は、取材時2015年12月の情報です。製品の機能および構成などは取材時より変更されている可能性がありますので、予めご了承下さい。最新の情報については、プロメテック・ソフトウェア(sales@prometech.co.jp)までお問合せください。