4.物質移動

基礎方程式

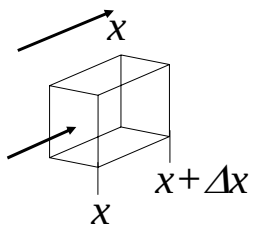
対流拡散方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t}+\underbrace{\frac{\partial v_x C}{\partial x}+\frac{\partial v_y C}{\partial y}+\frac{\partial v_z C}{\partial z}}_{\text{対流}}=\underbrace{D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right)}_{\text{拡散}}$$

物質移動の形式

1)**拡散**
2)**対流**

物質収支



1)**拡散** $J=-D\dfrac{dC}{dx}$

入: $-D\left.\dfrac{\partial C}{\partial x}\right|_x \cdot A$　**出**: $-D\left.\dfrac{\partial C}{\partial x}\right|_{x+\Delta x} \cdot A$

2)**対流**　vC

入: $v_x C|_x A$　　**出**: $v_x C|_{x+\Delta x} A$

↓ **収支をとると**

$$\frac{\partial C}{\partial t}A\Delta x=(v_x C|_x - v_x C|_{x+\Delta x})A+\left(-D\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_x + D\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{x+\Delta x}\right)A$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{v_x C\big|_x - v_x C\big|_{x+\Delta x}}{\Delta x} + \frac{\left(-D\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_x + D\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x+\Delta x} \right)}{\Delta x}$$

↓ 三次元

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial v_x C}{\partial x} + \frac{\partial v_y C}{\partial y} + \frac{\partial v_z C}{\partial z}}_{\text{対流}} = \underbrace{D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)}_{\text{拡散}}$$

対流拡散方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial v_x C}{\partial x} + \frac{\partial v_y C}{\partial y} + \frac{\partial v_z C}{\partial z} = D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)$$

↓ $\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$ **(連続の式)**

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + v_z \frac{\partial C}{\partial z} = D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)$$

方程式の解:濃度分布の経時変化 ⟶ 混合過程

数値解析

物質移動と流動の相互関係

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \underbrace{v_x \frac{\partial C}{\partial x}}_{\text{対流}} = \underbrace{D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}}_{\text{拡散}} \qquad (2\cdot11)$$

対流：流速を含む　　流速 ⟶ 物質移動

拡散：流速とは無関係？

拡散流束が大きい場合　物質移動(拡散) ⟶ 流速

↓

速度場と濃度場を独立に解くことはできない

拡散流束が大きくない場合

撹拌槽内の流速$\underline{\boldsymbol{v}(t,x,y,z)}$を独立に計算

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \underbrace{v_x \frac{\partial C}{\partial x}}_{\text{対流}} = \underbrace{D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}}_{\text{拡散}}$$

↓

対流拡散方程式を解く

↓

槽内の濃度分布の経時変化を求める

5.乱流の数値解析

乱流の場合の基礎式

連続の式 $\dfrac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_i} = 0$

運動方程式 $\rho\left(\dfrac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \overline{u_j}\dfrac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}\right) = -\dfrac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu\dfrac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \rho\overline{u_i'u_j'}\right)$

レイノルズ応力

どのようにして閉じた方程式にするか

↓

乱流モデル

乱流モデル

- **渦粘性モデル（*k-e*モデル）**
- **応力方程式モデル**
- Large Eddy Simulation(LES)

渦粘性モデル

$$-\overline{u_i'u_j'} = \underline{\underline{\nu_t}}\left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i}\right)$$:Boussinesq**近似**

渦粘性:**物性ではない**
位置、方向により異なる

Plandtl**の混合距離理論**:0**方程式モデル**

$$\nu_t = l^2\left|\frac{d\overline{u}}{dy}\right| \qquad l: \text{混合距離} \longrightarrow \text{閉じた方程式}$$

$$l = \kappa y$$

1方程式モデル

$$\nu_t = \underline{\underline{k}}^{1/2} l$$

乱流エネルギー: $\frac{1}{2}\overline{u_i'^2}$

***k*の輸送方程式**

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{u_j}\frac{\partial k}{\partial x_j} = -\overline{u_i'u_j'}\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \underline{\underline{\varepsilon}} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\underline{\underline{\frac{1}{2}\overline{u_i'u_i'u_j'} + \overline{\frac{p}{\rho}u_j'}}}\right) + \nu\frac{\partial^2 k}{\partial x_j^2}$$

モデル化が必要

$$\frac{\partial k}{\partial t}+\overline{u_j}\frac{\partial k}{\partial x_j}=-\overline{u_i'u_j'}\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}-\varepsilon-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{1}{2}\overline{u_i'u_i'u_j'}+\overline{\frac{p}{\rho}u_j'}\right)+\nu\frac{\partial^2 k}{\partial x_j^2}$$

$$\frac{1}{2}\overline{u_i'u_i'u_j'}+\overline{\frac{p}{\rho}u_j'}=-\frac{\nu_t}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x_j}$$

$$\varepsilon=C^*\frac{k^{3/2}}{l}$$

2方程式モデル

kとεの輸送方程式

乱流場における物質移動の解析

対流拡散方程式の時間平均

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\overline{v_r}\overline{C}+\frac{1}{r}\frac{\partial \overline{v_\theta}\overline{C}}{\partial \theta}+\frac{\partial \overline{v_z}\overline{C}}{\partial z}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\overline{v_r'C'}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\overline{v_\theta'C'}+\frac{\partial}{\partial z}\overline{v_z'C'}$$
$$=D\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial \overline{C}}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial \theta^2}+\frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial z^2}\right)\quad(2\cdot7)$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\overline{v_r'C'}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\overline{v_\theta'C'}+\frac{\partial}{\partial z}\overline{v_z'C'}$$

変動値の積の平均 ← モデル化が必要

$\overline{v'C'}$:速度と濃度の積

↓

対流による物質移動流束

↓

乱流による変動に基づく

↓

拡散流束と同じ形にモデル化

(レイノルズ応力の扱いと同様)

$$\overline{v_r'C'} = J_r = -D_{tr}\frac{\partial \overline{C}}{\partial r}$$

D_t :乱流拡散係数

- ◆物性ではない
- ◆位置，方向により異なる値

$$D_t = \frac{\nu_t}{Sc_t}$$

ν_t :渦粘性係数

Sc_t :乱流シュミット数(0.5から1の間の値)

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\overline{v_r}\,\overline{C}+\frac{1}{r}\frac{\partial \overline{v_\theta}\,\overline{C}}{\partial \theta}+\frac{\partial \overline{v_z}\,\overline{C}}{\partial z}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\overline{v_r'C'}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\overline{v_\theta'C'}+\frac{\partial}{\partial z}\overline{v_z'C'}$$

$$=D\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial \overline{C}}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial \theta^2}+\frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial z^2}\right)$$

$$\overline{v_r'C'}=-D_{tr}\frac{\partial \overline{C}}{\partial r},\quad \overline{v_\theta'C'}=-D_{t\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial \overline{C}}{\partial \theta},\quad \overline{v_z'C'}=-D_{tz}\frac{\partial \overline{C}}{\partial z}$$

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\overline{v_r}\,\overline{C}+\frac{1}{r}\frac{\partial \overline{v_\theta}\,\overline{C}}{\partial \theta}+\frac{\partial \overline{v_z}\,\overline{C}}{\partial z}$$

$$=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r(D+D_{tr})\frac{\partial \overline{C}}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial \theta}(D+D_{t\theta})\frac{\partial \overline{C}}{\partial \theta}+\frac{\partial}{\partial z}(D+D_{tz})\frac{\partial \overline{C}}{\partial z}$$

数値拡散

対流項：流速と濃度勾配の積

↓

差分と元の方程式との誤差が拡散項と同等のはたらき

刻み巾により実際より広い範囲に物質が拡散

対流による移動のみの式(u:流体の速度)

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}=0$$

↓ **差分化**

$$\frac{C_i^{n+1}-C_i^n}{\Delta t}+u\frac{C_i^n-C_{i-1}^n}{\Delta x}=0$$

前進差分　　**風上差分**

↓C_i^{n+1} **について解く**

クーラン数 $c=\dfrac{u\Delta t}{\Delta x}$

$$C_i^{n+1}=C_i^n-\frac{u\Delta t}{\Delta x}(C_i^n-C_{i-1}^n)=C_i^n-c(C_i^n-C_{i-1}^n)$$

$$C_i^{n+1}=C_i^n-\frac{u\Delta t}{\Delta x}(C_i^n-C_{i-1}^n)$$

$$C_i^{n+1}-C_i^n=-\frac{u\Delta t}{\Delta x}(C_i^n-C_{i-1}^n)$$

$$C_i^{n+1}=C_i^n+\Delta t\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{1}{2!}\Delta t^2\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}+O(\Delta t^3)$$

$$C_{i-1}^n=C_i^n-\Delta x\frac{\partial C}{\partial x}+\frac{1}{2!}\Delta x^2\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+O(\Delta x^3)$$

↓

$$C_i^{n+1}-C_i^n=\Delta t\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{1}{2!}\Delta t^2\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}+O(\Delta t^3)$$

$$C_i^n-C_{i-1}^n=\Delta x\frac{\partial C}{\partial x}-\frac{1}{2!}\Delta x^2\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-O(\Delta x^3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}=-\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}+\frac{u\Delta x}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+O(\Delta t^2,\Delta x^2)$$

上の差分による誤差

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}=-\frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}+\frac{u\Delta x}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+O(\Delta x^2,\Delta x^2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t}=-u\frac{\partial C}{\partial x}\rightarrow\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}=-u\frac{\partial^2 C}{\partial x\partial t}=-u\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)=u^2\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}=\frac{u\Delta x}{2}\left(1-\frac{u\Delta x}{\Delta t}\right)\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

$$\underbrace{\frac{\partial C}{\partial t}}_{\text{時間項}}+\underbrace{\frac{\partial v_x C}{\partial x}}_{\text{対流項}}=\underbrace{D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}}_{\text{拡散項}}$$

拡散項と同じ働き

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}=\frac{u\Delta x}{2}\left(1-\frac{u\Delta x}{\Delta t}\right)\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

$$=\frac{u\Delta x}{2}(1-c)\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

数値拡散における拡散係数

↓

クーラン数により決まる

対流項の差分をより高精度に
対流拡散方程式以外の計算方法の検討

6.固液二相流の解析

例：固液撹拌における混合過程の解析

高濃度の場合

粒子挙動が流れ場に影響

↓

固液二相流：固体液体の相互作用を考慮

比較的低濃度の場合

流動と粒子の運動を独立に扱うことが可能

槽内流動解析 ⟶ 流れ場における粒子の挙動の解析

流体中の固体粒子の運動方程式

$$\frac{dv_p}{dt} = \underbrace{g}_{\text{重力}} - \underbrace{\frac{\rho}{\rho_p} g}_{\text{浮力}} + \underbrace{\frac{R_f}{m}}_{\text{抗力}} + \underbrace{F}_{\text{その他の力}} \qquad (3\cdot1)$$

抗力:粒子流体の相対速度と逆向き

$$R_f = \frac{1}{2}\rho(v - v_p)|v - v_p| C_D \frac{\pi d_p^2}{4}$$

↓

$$\frac{R_f}{m} = \frac{3\rho(v - v_p)|v - v_p| C_D}{4\rho_p d_p} \qquad (3\cdot2)$$

$$R_f = \frac{1}{2}\rho(v - v_p)|v - v_p|C_D \frac{\pi d_p^2}{4}$$

C_D : **抵抗係数** [-]

↓ **レイノルズ数** $\mathrm{Re} = \dfrac{\rho|v - v_p|d_p}{\mu}$ **の関数**

$$\mathrm{Re} < 0.4 \rightarrow C_D = \frac{24}{\mathrm{Re}}$$

それ以外の範囲:種々の実験式

粒子の軌跡の数値計算

$$\boldsymbol{x} = \int \boldsymbol{v_p} dt = \iint \frac{d\boldsymbol{v_p}}{dt} dt$$

↓

$$\frac{dv_p}{dt} = g - \frac{\rho}{\rho_p} g + \frac{R_f}{m} + F$$ **の積分により計算**

積分時間間隔の検討

7.気液二相流の流動解析

気体の挙動 ⟷ 液体の挙動

激しい相互作用

独立に解くことは不可能

↓

両相の流れを同時に解く

気液各相の流れ

連続の式:質量保存式
運動方程式:運動量保存式　により記述される
エネルギー保存式

↓

界面で不連続

↓

界面での条件を満たすように各保存式を解く

界面の形状が複雑に変動

↓

物理量の統計量により計算

↓

モデル

◆二流体モデル

◆混合体モデル

1)二流体モデル

気液それぞれの相を別の流体として扱う

相間の物理量収支を適当な方程式で表現

2)混合体モデル

1つの混合流体とみなす

相間の速度差などに相関式を用いる

・均質流モデル

・スリップ流モデル

・ドリフトフラックスモデル

二流体モデル

各相の保存式

質量保存式

$$\frac{\partial}{\partial t}\alpha\rho + \frac{\partial}{\partial x_i}\alpha\rho v_i = \Gamma \qquad (4\cdot1)$$

α：各相の体積分率(気相の場合ボイド率)

運動量保存式

$$\frac{\partial}{\partial t}\alpha\rho v_i + \frac{\partial}{\partial x_j}\alpha\rho v_i v_j = -\alpha\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}\alpha\tau_{ji} + \alpha\rho f_i + M_i$$

$$(4\cdot2)$$

エネルギー保存式

$$\frac{\partial}{\partial t}\alpha\rho\left(e+\frac{v^2}{2}\right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\alpha\rho\left(e+\frac{v^2}{2}\right)v_i$$

$$= -\frac{\partial}{\partial x_i}\alpha p v_i - \frac{\partial}{\partial x_j}\alpha\tau_{ji}v_i + \alpha\rho f_i v_i - \frac{\partial}{\partial x_i}\alpha q_i + E$$

e：内部エネルギー
q：熱流束

$$(4\cdot3)$$

各保存式中のΓ, M, E：相界面を通って移動する量

質量: $\Gamma = -\rho(v_i - u)a$ (4・4)

運動量: $M_i = -\{\rho v_i(v_i - u) + p + \tau_{ji}\}a$ (4・5)

エネルギー: $E = -\left\{\rho\left(e + \frac{v^2}{2}\right)(v_i - u) + q_i + pv_i + \tau_{ji}v_i\right\}a$ (4・6)

↑

界面，壁面の摩擦の計算

界面，壁面の摩擦の計算

界面:**気泡を球とみなしたときの抵抗力**

$$K = \frac{3C_D\alpha}{4d_b}\rho_l v_l|v_l| \qquad (4・7)$$

壁面:fanning**の式**

$$F_{wl} = \frac{2f_m}{d_h}\alpha_l\rho_l v_l|v_l| \qquad (4・8)$$

$$F_{wg} = \frac{2f_m}{d_h}\alpha_g w\rho_g v_g|v_g| \qquad (4・9)$$

w：**気相と壁面の摩擦についての補正**

テキスト(4・12)-(4・14)のように離散化

以下の手順で解く

1)時刻n+1の速度を時刻n+1の圧力の関数として表す

運動量保存の式

$$\frac{v_{i+1/2}^{n+1}-v_{i+1/2}^{n}}{\Delta t}+v_{i+1/2}\frac{v_{i+1}^{n}-v_{i}^{n}}{\Delta x}=-\frac{1}{\rho_{i+1/2}^{n}}\frac{p_{i+1}^{n+1}-p_{i}^{n+1}}{\Delta x} \qquad (4\cdot 13)$$

$$-\frac{\alpha_{i+1}^{n}\tau_{xxi+1}^{n}-\alpha_{i}^{n}\tau_{xxi}^{n}}{\Delta x}+\alpha_{i}^{n}\rho_{i}^{n}f+M_{i}^{n}$$

2) 時刻n+1の体積率を時刻n+1の速度，圧力，時刻nの変数の関数として表す

質量保存の式

$$\frac{\alpha_{i}^{n+1}\rho_{i}^{n+1}-\alpha_{i}^{n}\rho_{i}^{n}}{\Delta t}=\frac{(\alpha^{n}\rho^{n}v^{n+1})_{i-1/2}-(\alpha^{n}\rho^{n}v^{n+1})_{i+1/2}}{\Delta x}+\Gamma_{i}^{n} \qquad (4\cdot 12)$$

3)**内部エネルギーを時刻n+1の速度，圧力，時刻nの変数の関数として表す**

エネルギー保存式

$$\frac{\alpha_i^{n+1}\rho_i^{n+1}e_i^{n+1}-\alpha_i^n\rho_i^n e_i^n}{\Delta t}+\frac{(\alpha^{n+1}\rho^{n+1}e^{n+1}v^{n+1})_{i+1/2}-(\alpha^{n+1}\rho^{n+1}e^{n+1}v^{n+1})_{i-1/2}}{\Delta x}=$$

$$\alpha_i^{n+1}\left(\frac{p_i^{n+1}-p_i^{n+1}}{\Delta t}+\frac{(v^{n+1}p^{n+1})_{i+1/2}-(v^{n+1}p^{n+1})_{i-1/2}}{\Delta x}-p_i^{n+1}\frac{v_{i+1/2}^{n+1}-v_{i-1/2}^{n+1}}{\Delta x}\right)$$

$$-\alpha\tau_{xxi}^{n+1}\frac{v_{i+1/2}^{n+1}-v_{i-1/2}^{n+1}}{\Delta x}+\alpha_i^{n+1}\rho_i^{n+1}fv_i^{n+1}-\frac{q_{i+1/2}^{n+1}-q_{i-1/2}^{n+1}}{\Delta x}+E_i^{n+1}$$

(4・14)

4)**時刻n+1の体積率，内部エネルギーを仮定**

↓

時刻n+1の圧力に関する連立方程式を導いて反復計算により解き，圧力を求める

5)計算された圧力から1), 2)の関数より速度，体積率，内部エネルギーを計算
仮定した値と一致するまで(収束するまで)4) , 5)を繰り返す