

日本学術振興会  
プロセスシステム工学第143委員会  
平成17年度第3回研究会議事録

1. 日時：平成17年10月7日（金）13:10～17:00

2. 場所：名古屋国際会議場 2号館231会議室（愛知県名古屋市熱田区熱田西町1-1）

3. 出席者：44名（順不同）

委員長：小野木克明（名古屋大学）

委員：大杉 健（ジャパンエナジー）、小西信彰（横河電機）、重政 隆（東芝ITコントロール）、鈴木 剛（東洋エンジニアリング）、高田晴夫（三菱化学）、黒田千秋（東京工業大学）、長谷部伸治（京都大学）、柘植義文（九州大学）、平尾雅彦（東京大学）、山下善之（東北大学）、橋爪進（名古屋大学）、佐渡友秀夫（製品評価技術基盤機構）、伊藤利昭（名古屋工業大学）、栗本英和（名古屋大学）、中岩 勝（代理：松田圭悟、産業技術総合研究所）、橋本芳宏（名古屋工業大学）、吉田雅俊（東北大学）、村上佳広（関西大学）、武田和宏（静岡大学）、矢野智之（名古屋大学）、島田行恭（産業安全研究所）、外輪健一郎（徳島大学）、黒岡武俊（富山大学）、加納 学（京都大学）、ホサム ガッパール（岡山大学）、北島禎二（東京農工大学）、濱口孝司（名古屋工業大学）、野田 賢（奈良先端科学技術大学院大学）、小木曾公尚（奈良先端科学技術大学院大学）、松本秀行（東京工業大学）、殿村 修（京都大学）、小川達也（協和発酵工業）、大田原健太郎（クレハエンジニアリング）、薄 豊文（ジャパンエナジー）、大宮司理晴（代理：白川義之、ジャパンエナジー）、響 義則（住友化学）、馬場一嘉（ダイセル化学工業）、藤井孝義（日揮）、藤田宗宏（代理：上田宣孝、三井化学）、坂本英幸（横河電機）

委員以外の出席者：

David A. Street（Fluent Asia Pacific）、堀口晶夫（三菱化学科学技術研究センター）、菊池康紀（東京大学）

#### 4. 研究会

##### 1) WS25 報告「制御性能診断ソフト"LoopDiag"の紹介とその実用化例」（資料#1）

京都大学 加納 学 委員

平成16年10月の最終報告以降のWS25の活動について報告があった。また、WS25の成果の一つである制御性能診断ソフト"LoopDiag"とその実用化例（住友化学、三菱化学、昭和電工）について紹介があった。

<質疑応答>

ガッパール：診断ソフトに与えるデータは何か特別な信号処理をしているのか。

加納：何もしていない。基本的にデータベースに入っている測定データをそのままこのソフトで解析している。

テーマ：「CFD とプロセスシミュレーション」

##### 2) 「Recent Applications of Fluent's Computational Flow Modeling Software for the Chemical and Process Industries」（資料#2）

Fluent Asia Pacific David A. Street 氏

Fluentの簡単な紹介の後、化学産業におけるCFDの例として、攪拌・混合、混相流動、population balance modeling（バブルカラム、晶析）、粒子状流れへのDEM（Distinct Element Model）の適用、マイクロ流路などの紹介があった。

<質疑応答>

ガッパール：モデルのverificationはどうしているのか。

Street : Fluent にはきれいなアニメーションが用意されているが、結果が実際のシステムと違っては意味がない。モデルの verification はアプリケーションによって違う。攪拌では CFD と実験結果はかなり近いものとなっている。Multiphase やシステムが複雑になるとモデルのチューニングが重要となってくる。そのときのポイントはエンジニアであると考えている。エンジニアはアプリケーションにより CFD を注意深く使う必要がある。

ガッパール : Fluent にはどのようなライブラリがあるか。

Street : 攪拌のアプリケーションはかなり well-defined なケースである。タンク、バッフルなどの基本要素のいろんなタイプをライブラリとして用意して、使いやすい攪拌のアプリケーションを作った。ライブラリの数は攪拌が一番多い。

橋本 : グリッドコンピューティングの可能性はあるのか。

Street : 非常に細かいメッシュで早く結果が欲しいときに、グリッドコンピューティングでアウトソーシングした経験はある。しかし、米国とヨーロッパでの企業はよく使っているが、日本では会社のポリシー（企業秘密）のために使っていない。

山下 : 講演で示した例は、どのくらいのコンピュータでどのくらいの計算がかかったのか。

Street : 最後のスライドの例は、120 万メッシュで、ラップトップコンピュータで 3~4 時間ぐらいである。

### 3) 「ダイナミックプロセスモデルへの拡散現象モデルの融合」(資料#3)

東京工業大学 松本 秀行 委員

CFD とプロセスシミュレーションを組み合わせるハイブリッドシミュレーションの適用事例として、高分子重合プロセスの非定常運転シミュレーション、マイクロリアクタの混合・反応プロセスシミュレーション、マイクロ電気泳動プロセスの熱拡散シミュレーションの紹介があった。また、インターフェイスモデルの重要性について説明があった。

#### <質疑応答>

山下 : 定性推論モデルとの組み合わせとは具体的にはどのようなことを考えているのか。

松本 : データマイニングでの自己組織化マップなどのネットワークモデリングを使って可視化情報をうまく整理してモデル化することを考えている。以前、拡散現象をペトリネットを使ってモデル化したが、時間による現象の変化を表せたものの空間的な広がりをうまく表すことができなかった。この辺りをうまくモデル化できたらよいと考える。

吉田 : ポリスチレンの重合の計算では、重合の計算を LPSS で、温度と流れの計算を Fluent で行ったのか。

松本 : 使った反応速度式などプロセスモデルはどちらも同じものを使って解いている。違いは、Fluent の方は流れを入れて解くことと、拡散モデルは LPSS に入っていない。LPSS の方が計算が軽く、細かく計算したい部分は Fluent で解いたり、逆に解くのが難しい部分は完全混合として LPSS で解いたりして、うまく分割して全体を計算する。

長谷部 : Fluent から LPSS へ流速データを引き渡すところは何か工夫はあるのか。

松本 : 境界条件で分布がある場合にデータを集中定数系に引き渡すとき、どういう仮定のインターフェースのモデルを構築するかは非常に問題であり、今回は平均化して引き渡している。

### 4) 「3次元流体解析とプロセスシミュレーションを組み合わせたハイブリッドモデリング技術の活用」

(株)三菱化学科学技術研究センター 堀口 晶夫 氏

最近のプロセス開発の現状について述べられた後、CFD とプロセスシミュレータの連成させたハイブリッドモデルの利用する際のモデルの接続形態（セル、ゾーン、境界条件）の説明があり、実際の適用例も交えて紹介があった。

#### <質疑応答>

橋本 : 計算結果により、例えばホットスポットがあることがわかったとき、それをどうやって実験で確かめるのか。

堀口 : 2つの方法がある。一つはパイロットプラントで検証する。もう一つは実機に計算結果よりきもとなりそうなところに熱電対を入れてみることである。

長谷部 : 熱電対を入れることにより状態が変わるため、シミュレーションでも熱電対を入れた状態を想定して行っているのか。

堀口：そこが難しいところである。一応その影響を考慮して触媒の量を減らすなどをしているが、それにより 100%再現できているかどうかはいつも議論になっている。

佐渡友：ハードウェアの価格性能比がものすごく改善されたが、一方ソフトウェアのコストパフォーマンスはどのようになっているのか。

堀口：ソフトウェアはハードウェアほどあまり下がっていないというのがユーザーの実感である。ただし、パラレル計算ができるようになり、パラレルのライセンスは安くなっているの、それを考えれば年々安くなってきている。流体計算をする場合のソフトウェアとハードウェアの費用割合は最近圧倒的にソフトウェアに寄っている。トータルのコストは下がってきていると言える。

鈴木：CFD と gPROMS の接続形態にはセル、ゾーン、境界条件があるとのことだったが、境界条件を考えたとき、どの部分を CFD で計算し、どの部分を gPROMS で計算すればよいのか、その分け方はどのようにしているのか。

堀口：流体解析の中にあまり複雑な反応は入れられないため、可能な限り流体解析で行ってしまうのが簡単であるが、どうしても詳細な反応を入れたい部分を gPROMS で計算している。両方を見つ、よい組み合わせを使っている。

野田：反応の中で使われているモデルパラメータはマクロな実験で求めたオーバーオールな数値であり、今後より精度の高い反応速度定数が必要ではないかと考えるが、その辺りの動向はどうか。

堀口：実機を設計してオーバーオールな数値でずれなければそれでよいが、反応条件を変えるとずれる場合があるので、その場合にはパラメータの精度を上げる必要がある。また、物性データの精度もネックになっている実感である。例えば、プロセスシミュレータでは複雑な物性データの式をいろいろ使えるが、流体解析では使えない。流体解析の中で反応や物性の精度をどうやって上げていくが重要となっている。

Street：反応が複雑になるとスティックネスの問題があり、収束が長くなるのでは。

堀口：CFD と gPROMS が独立にタイムステップが取れるので、タイムスケールが違っていても gPROMS 側を細かく切った結果を CFD に渡すことができ、スティックネスの問題に対して使う価値があると考えます。

長谷部：CFD シミュレーションを行おうとするとどうしてもメッシュが多くなってしまいますので、例えば攪拌翼が 6 つあれば 1/6 の部分だけを計算して使うことが考えられるが、どちらか一方から原料が流入していたり流出しているとその方法が使えない。そのような場合に対して何か方法があるか。

堀口：実際の入口と出口は変なところについていることが多く、攪拌槽のほとんどはフルモデルでシミュレーションを行っている。

## 5) 総合討論

最初に長谷部委員から今回のテーマを取り上げた理由が説明された後、PSE の観点から CFD とプロセスシミュレーションの設計や制御への展開について議論があった。

### <質疑応答>

長谷部：PSE はこれまで集中定数系で扱えるようなモデルをもとにした最適設計、最適操作、制御の問題などを考えてきたが、それに留まっていたのは PSE の価値はなくなってきているのではないかと。そういう意味で CFD のシミュレーションをプロセスの設計、制御を考えていく手段に利用という観点で今回のテーマを設定した。

鈴木：CFD は局所的なところを解析するために使っている。一方、今までの集中定数系のプラントシミュレータはプラント全体の構成の最適化などに使ってきた。今日の講演のように、マイクロなところからマクロまで解析できるようなツールを使っていくと、全体をよりよい検討をすることができるようになるのか。

長谷部：講演の中で、シミュレーションをしてバツフルの位置を変えていく話があったが、それをさらに進めて装置の形さえもユーザーが変えていくという時代になってきたと考える。マイクロリアクタは形状設計が非常に重要であり、そのようなニーズがある。新しい発想に基づいた装置がどんどん出てくる時代になって欲しい。

橋本：横河電機からミラーモデルといって、シミュレーションを同時に行ってその結果を制御に使うことが考えられている。CFD シミュレーションにより分布が変化したことがわかり、例えばホットスポットの移動により制御の管理点を動的に変えることなどに使えるのか。

長谷部：そういう使い方はありうると考える。

堀口：反応器の中のどこがどんな状況で危ないかがシミュレーションによりわかってくるので、どんなアク

ションをとればよいか制御として有用な情報が得られると考える。

長谷部：CFDにより状態がわかってくると実際に合っているかどうか確認したいが、現状では温度や圧力などの情報から反応器内の状態がシミュレーションと一致しているかどうかをチェックするしかないのか。

堀口：シミュレーションによりどこを見ればよいかかわってくれば、新しい機械があれば是非とも実際に中を見たいと常々思っている。しかし、実際に実機に入れようとするときはコンベンショナルな実績のあるものを入れることになり、なかなか叶わない。

平尾：CFDはコンピュータを使っているのでPSEと関連あるようなイメージがあるが、実際には実験屋さんがCFDというツールを手に入れただけであって、この辺りの分野からPSEから離れていっているのではないか。

長谷部：CFDを単に使うだけならば触媒や反応工学に携わる人の方がPSEの人よりも使いこなせる。よって、PSEがPSEなりのCFDの使い方を見つけて、どんどんと発展していかなければならないと考える。その一つがプロセスシミュレータとの組合せであり、それをどのように設計に組み込んでいくかである。

配布資料：

#1: WS25 最終報告第二弾！「制御性能診断ソフト LoopDiag の紹介とその実用化例」

#2: Recent Applications of CFD for the Chemical and Process Industries

#3: ダイナミックプロセスモデルへの拡散現象モデルの融合