

**日本学術振興会**  
**プロセスシステム工学第143委員会**  
**平成20年度 第4回研究会議事録**

1. 日 時： 平成20年12月19日（金）13：10～17：00

2. 場 所： 東京 弘済会館 （東京都千代田区麴町5-1）

3. 出席者：57名（順不同，敬称略）

委員長：長谷部伸治（京都大学）

委員：大杉 健（ジャパンエナジー），轡 義則（住友化学），小西信彰（横河電機），篠原和太郎（東芝），鈴木 剛（東洋エンジニアリング），高田晴夫（三菱化学エンジニアリング），山田 明（三井化学），柘植義文（九州大学），野田 賢（奈良先端科学技術大学院大学），橋本芳宏（名古屋工業大学），平尾雅彦（東京大学），瀧野哲郎（東京工業大学），山下善之（東京農工大学），加納 学（京都大学），伊藤利昭，梅田富雄（青山学院大学），北島禎二（東京農工大学），木村直樹（九州大学），栗本英和（名古屋大学），黒岡武俊（富山大学），佐渡友秀夫（製品評価技術基盤機構），島田行恭（労働安全衛生総合研究所），外輪健一郎（徳島大学），武田和宏（静岡大学），殿村 修（京都大学），堀尾正靱（東京農工大学），松本秀行（東京工業大学），矢野智之（名古屋大学），石田敏和（宇部興産），大田原健太郎（代理：濱添真一郎，クレハエンジニアリング），川村継夫（オメガシミュレーション），小崎恭寿男（日揮），坂本英幸（横河電機），志賀公司（クレハエンジニアリング），重政 隆（東芝三菱電機産業システム），大宮司理晴（代理：橋本欣二，ジャパンエナジー），中川明浩（代理：浦 大佑，日産化学工業），西澤 淳（代理：島廻昭朗，三菱化学），西野由高（代理：白石朋史，日立製作所），馬場一嘉（ダイセル化学工業），矢羽田喜彦（三井化学），藤井孝義（日揮），布野俊彦（日立ハイテクトレーディング），丸山 亨（新日本石油精製），村山 大（東芝），山田幸治（宇部興産），平井都志也（ソニー）

委員以外の出席者：内藤清嗣（三井化学），竹田 宏（アールフロー），堀口晶夫（三菱化学），佐藤昌弘（シーディー・アダプコ・ジャパン），柏屋 滋（ピーエスエージャパン），菊池康紀（東京大学），木村理一郎（東京大学），大場茂夫（ピーエスエージャパン），野口芳和（日揮）

#### 4. 研究会

##### 1) 「PSE 分野の国際的研究動向について」

≪講演者≫ 京都大学 長谷部伸治 委員（資料#1）

[概要] AIChE 2008 annual meeting の参加報告をされた。CAST Division の Computers in Operations and Information Processing セッションを中心に振り返り，スケジューリング研究の課題として，a)不確定性を考慮した最適化，b)生産計画との融合，c)標準評価基準に合致しない評価の扱い，d)現場で何が求められているかの再調査，が挙げられた。

<質疑応答>

北 島： 解法も意識した上での不確定性へシフトしすぎているのではないだろうか，現場におけるスケジューリング問題の切り分けがうまくなされていないのではないだろうか，と思う。生産計画，スケジューリング，プラント制御の全てに渡って，一番細かいところまでを一番上が把握して意思決定する話の流れになっていくのだろうか？

長谷部： スケジューリングの情報を生産計画に戻すループ，プラント制御の情報をスケジューリングに戻すループ，がポイントであろう。何を計算してどんな情報，何を戻すのかがキー，如何にうまく戻せるかがキーである。1つ1つのモデルをユニファイするアプローチにはならないだろう。

- 野 口：現場で求められているのは、不確定性を如何になくすかということであり、重要でないか。
- 長谷部：それをスケジューリングの中にどう取り込んでいくか、問題設定していくか、という研究が求められる。米国の大学に於ける研究の多くはペーパー上での議論が多い気がする。企業、現場に脚を運んで研究に取り組むことが大事であろう。
- 伊 藤：ブリジストンの話によると、生産計画見直しの頻度が高く、スケジューリングとプランニングが同じような周期で見直されている、ようである。ビジネススピードに合わせてフィードバックも速くなることがポイントであろう。海外の場合、その辺りの取り組みはどうなっているのか。
- 長谷部：少ない。フィードバックを速くすることが大事である。自動的にスケジュールを作成するシステムは（昔から言われているように）重要性が増しているように思う。

テーマ：マルチスケールシミュレーション：プロセスシミュレーションと CFD との連成

(司会：梶野哲郎 委員)

## 2) 研究会の趣旨説明

### 3) 「精緻なコンパートメントモデルによる反応器設計」

《講演者》 三井化学 内藤清嗣 氏 (資料#2)

【概要】 実機反応器内の流れを考慮した反応解析手法の獲得が必要という動機に端を発し、気泡塔型反応器の解析などの反応流動解析を紹介された。計算負荷が高すぎる CFD 計算に代わって、CFD と連成し、数千個のセルからなる精緻なコンパートメントモデルへの取り組みを述べられた。今後の取り組みとして、より厳密な反応モデルの構築、パラレルコンピューティングによる計算、ポリマー重合や晶析などの分布定数系・バッチ反応系への適用、を挙げられた。

＜質疑応答＞

- 北 島：工業化パイロットの省略を行うと、新しい生産設備の運転に関する検討はどうするのか？
- 内 藤：実際、小さなスケールでプロセスを構築し、実機のスケールダウンを用意して、エンジニアリングデータをとる。全く新しいものならパイロット試験は必要になるが、似たようなプロセスはどこかにあり、それが参考になる。
- 松 本：セル間の流れを CFD からもってくる作業は自動化されているのか？コンパートメントモデルでは熱とか物質移動は取り扱われているのか？この手法に関するアプリケーションの限界はどの辺りにあるとお考えか。情報交換は時定数に依存すると思う。
- 内 藤：一方向の情報の遣り取りでしかない。テキスト形式で吐き出させて、インハウスで作ったコンパートメントモデルがデータを取り込むだけである。今回のケースでは温度場を均一と見なせるが、熱移動の計算が必要な際には収束・繰り返し計算が必要となる。

### 4) 「ハイブリッドモデルによるマルチスケール粉体解析」

《講演者》 アールフロー 竹田 宏 氏 (資料#3)

【概要】 個々の粒子挙動については一部の粒子のみを対象とした解析を行い、その結果から統計情報を取り出して粉体の全体挙動解析に反映させ、同時に、全体挙動が個々の粒子挙動に与える影響についても考慮するハイブリッドモデルによる粉体解析について述べられた。その長所として、a)多数の粒子からなる実用の粉体解析が可能、b)粒子間接触応力のモデル化に際しての仮定が少なく信頼性が高い、c)付着力の取り込みなど複雑系への拡張が比較的容易、ということであった。一方、短所として、粒子径分布を持つ場合への拡張が困難、ということが挙げられた。

＜質疑応答＞

- 橋 本：結晶のモデル化に興味がある。溶けている状態をマイクロで見れば粒子と捉えられる。今回の話のように、一部を取り出して周期境界を適用する方法により、粘度や表面張力といっ

た流体物性を粒子レベルで説明することは可能か。

竹 田：物性自体がマクロな空間変化に依存するなら連成解析が必要で、今の方法で対応できる。

(司会：橋本芳宏 委員)

#### 5) 「CFD・プロセスシミュレーション連成解析の実際および実用化」

《講演者》 三菱化学 堀口晶夫 氏 (資料#4)

[概要] CFD とプロセスシミュレーションの連成解析のいくつかについて、手法の概要、実際の解析例を紹介された。また、実用化の際に問題となる連成による計算時間増大について、並列計算の工化について実例を交えて説明された。

<質疑応答>

長谷部：CFD 計算結果をコンパートメントの方へ引き渡すときは情報の足し算で対応できるだろうが、その逆は？戻すときは平均を戻す形でよいのか？

堀 口：この手法の難しいところである。例えば、CSTR 内の翼の周辺などは状況が違ってくるので、セルベースのアプローチになるのではないか。固体粒子が沈降する計算はできない。

橋 本：流体計算のソフトの中に Fortran で組んで反応を考慮するのと、gPROMS とでは、27 倍違うという話があった。並列計算するなら 30 台あれば勝つ、という話があった。それ自体が速くなることはあり得るか？

堀 口：反応計算に時間がかかっている。その話は、PSE 社や ASPEN 社に於いて、高速計算化に関して努力して頂く内容だと思う。

山 田：充填層層触媒に於いて、取り組まれた方法と他のケースとの計算結果に違いはあるのか？

堀 口：実機がある場合には比較ができる。しかし、実機がない場合、今回話した厳密モデルで検討することが意味をもってくる。

#### 6) 「化学反応を伴う CFD におけるマルチスケールモデリングの実例」

《講演者》 シーディー・アダプコ・ジャパン 佐藤昌弘 氏 (資料#5)

[概要] 実用装置の CFD 解析では、装置スケールが大きな場合、化学反応には単純な総括反応が適用される。化学反応の精度を確保し、可能な限り詳細な反応の適用を目指した手法を紹介された。

<質疑応答>

堀 口：すす生成シミュレーションについて。ガス反応だけでなく、凝縮して固化する相変化シミュレーションも可能か？核生成、固体粒子がガス化するといった物理モデルも考慮できる可能性はあるか？

佐 藤：今回の例は析出という過程は入っていないが、考慮することは可能である。素反応計算が重いので、計算負荷が気になりである。エンジン内のすすの話はカーネル形成のモデルが提案されているが、やはり計算負荷が気になる。並列計算が求められる。

野 口：軽油の性状によってディーゼルエンジンの性能がどうかわってくるか、(ガソリンの場合の) ノッキング性能、についてシミュレーションは可能か？実際、エンジンの設計に使用されているのか？

佐 藤：ノッキング性能の評価は可能である。軽油性状の影響度解析は、実験との照合を経てからなら可能である。自動車会社では今回話したツールが利用されている。

橋 本：ラボでのビーカー実験に対して、こういうツールを使うと、精度の高い反応解析ができて、精度良く反応モデル同定ができるか？

佐 藤：CFD という箱のポテンシャルは高い。反応メカニズムのアレニウスパラメータの確からしさに依存する。完全に実験を代替するというレベルには至らないと思う。

#### 7) 「Multiscale Modelling and Simulation」

《講演者》 ピーエスイー・ジャパン 柏屋 滋 委員 (資料#6)

[概要] 固定床触媒反応器の開発・設計、溶液晶析槽の運転最適化・トラブルシューティング、また、

燃料電池スタックの解析において、マルチスケールモデリングの適用例の事例紹介と、最近の技術動向について解説された。

<質疑応答>

野 口：（分子レベルで考えたなら）結晶の1次核生成を、結晶の分子が2つ以上くっついた現象と想像する。一次核はアボガドロ数的な数で発生しているのではないだろうか。実際、晶析が進むにつれて、ある粒度分布をもって小さい分子が少なくなっていく。このあたりの現象はどのように解釈されるのか。

柏 屋：1次核生成モデルに関しては、現状何らかの文献に載っているものがシミュレータに入っている。分子運動論という話であれば、そのまま取り込むことはできない。我々の実績があるのは、2次核生成からである。

## 8) 総合討論

**配布資料：**

- #1: PSE 分野の国際的研究動向について
- #2: 精緻なコンパートメントモデルによる反応器設計
- #3: 粒子力学
- #4: CFD・プロセスシミュレーション連成解析の実際および実用化
- #5: 化学反応を伴う CFD におけるマルチスケールモデリングの実例
- #6: Multiscale Modelling and Simulation

以上