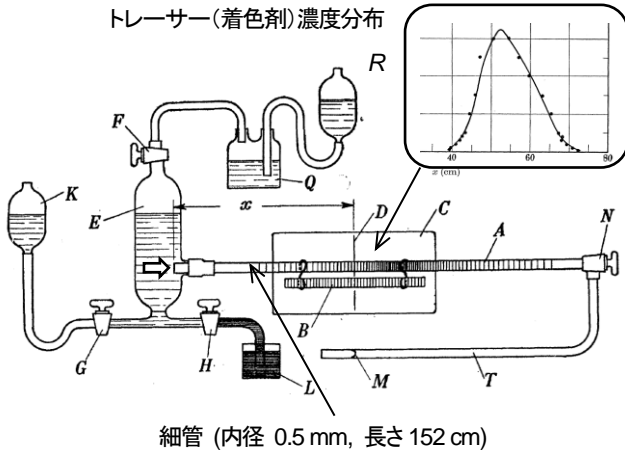


円管内流れの Taylor 分散

1. 対象とするプロセス：円管内流れにおける溶質の軸方向分散

図1 Taylor の遅い管内流れ中の染料拡散実験¹⁾

この連載第6回(2015年4号)で装置内流れの移流拡散モデルを解説した。移流拡散では1次元で考え、軸方向の混合拡散係数 D_z をパラメータとして、これにより溶質の分散(軸方向の広がり)が表された。しかしこの混合拡散係数は物性値である分子拡散係数 D_{AB} とどのような関係にあるのだろうか? Taylor¹⁾は細管内の流れについてこのことを理論と実験の両面から以下のように考察した。

2. Taylor 分散モデル

図1が Taylor の実験¹⁾である。細管内をごく遅い流速で水を流し、入口から染料により濃度のステップまたはインパルス入力を与え、下流での濃度の広がりを測定する。この現象の数学的解析は溶質濃度 $c_A(t, r, z)$ に関する非定常2次元円筒座標拡散方程式をインパルス入力条件で解くことになる。解析の詳細は教科書²⁾を参照いただくとして、ここでは定性的なモデルの考え方と結果のみを述べる。

内径 d_t (半径 R) の円管内を、平均速度 \bar{u} の放物線速度分布で流体が流れている。(図2) $t=0$ において幅 w の溶質(トレーサー)を矩形入力したとする。その後、位置 z における断面平均濃度:

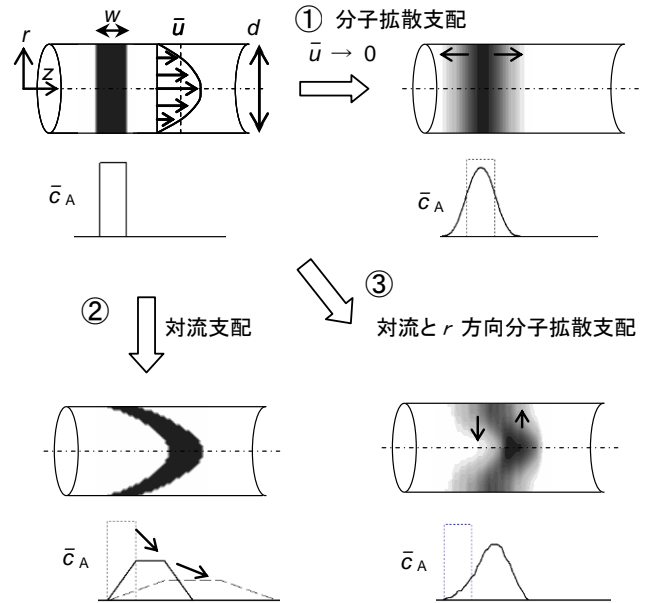
$$\bar{c}_A(z) = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^R c_A 2\pi r dr \quad (1)$$

により軸方向の濃度分布をみる。溶質は放物線速度分布で運ばれる(対流)ことと、濃度勾配による分子拡散の2つの要因で流れ方向に広がる。

流速が遅い極限($\bar{u} \rightarrow 0$)を考えると、溶質は分子拡散により幅 w を広げながら全体に濃度が低下する。(図2①)この場合の濃度分散は、

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = D_{AB} \left\{ \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right\} \quad (2)$$

に従い、濃度分布の広がりには分子拡散係数 D_{AB} に支配される。

図2 円管内流れ中の拡散に関する Taylor 分散のモデル³⁾

逆に流れが速く、対流が支配する場合は、溶質は幅 w を保ったまま、放物線流れに従って軸方向に広がる。(図2②)この場合には平均濃度 \bar{c}_A の分布は台形状を示す。現象を支配する式は

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + u(r) \frac{\partial c_A}{\partial z} = 0 \quad (3)$$

である。この台形状分布は時間がたつと台形状のまま全体に濃度が低下し、分布幅は広がる。このように半径方向速度分布(放物線速度分布)は分散を広げる効果を持つ。

実際はこれらの理想条件の中間にあり、分子拡散係数 D_{AB} と対流の両方が関与する。このときは分子拡散は半径方向が支配的である。

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + u \frac{\partial c_A}{\partial z} = D_{AB} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) \right\} \quad (4)$$

この半径方向分子拡散は対流による軸方向の濃度の広がりを抑制し、平均濃度 \bar{c}_A を正規分布形状とするような効果を持つ(図2③)。

Taylor は以上のモデルを染料による実験と比較し

つつ解析した。その結果によると、流れ方向の断面平均濃度分布 $\bar{c}_A(z)$ は 1 次元移流拡散の式:

$$\frac{\partial \bar{c}_A}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_A}{\partial z} = D_z \frac{\partial^2 \bar{c}_A}{\partial z^2} \quad (5)$$

で表せ、このみかけの混合拡散係数 D_z は分子拡散係数 D_{AB} 、平均流速 \bar{u} 、管内径 d_t と

$$D_z = \frac{(\bar{u}d_t)^2}{192D_{AB}} \quad (6)$$

の関係にある。この関係は Aris により次式のように拡張された。

$$D_z = D_{AB} + \frac{(\bar{u}d_t)^2}{192D_{AB}} \quad (7)$$

この混合拡散係数を用いれば、時間 $t=0$ 、位置 $z=0$ におけるインパルス入力 (溶質量 M [mol]) の、位置 z における応答 (軸方向平均濃度分布) は式(5)の解により、

$$\bar{c}_A(z) = \frac{(M/\pi R^2)}{\sqrt{4\pi D_z t}} \exp\left(-\frac{(z-\bar{u}t)^2}{4D_z t}\right) \quad (8)$$

のように求められることになる。

式(7)を混合拡散係数と分子拡散係数の比にすると、

$$\frac{D_z}{D_{AB}} = 1 + \frac{(\bar{u}d_t)^2}{192(D_{AB})^2} = 1 + \frac{(\text{Re} \times \text{Sc})^2}{192} \quad (9)$$

である⁴⁾。この関係を図 3 に示す。

これより、気相流れ ($\text{Sc} \approx 1$) で流速が小さい場合のみ、混合は分子拡散が支配している。液相 ($\text{Sc} \approx 1000$) 流れや通常の流速範囲では、管内の混合は対流が支配しており、混合拡散係数 D_z は分子拡散係数 D_{AB} の 100 倍以上であることがわかる。

なお、 Re の大きい乱流範囲では理論および実験的に概略次式とされている⁴⁾。

$$\frac{D_z}{D_{AB}} = 0.2(\text{Re} \times \text{Sc}) \quad (10)$$

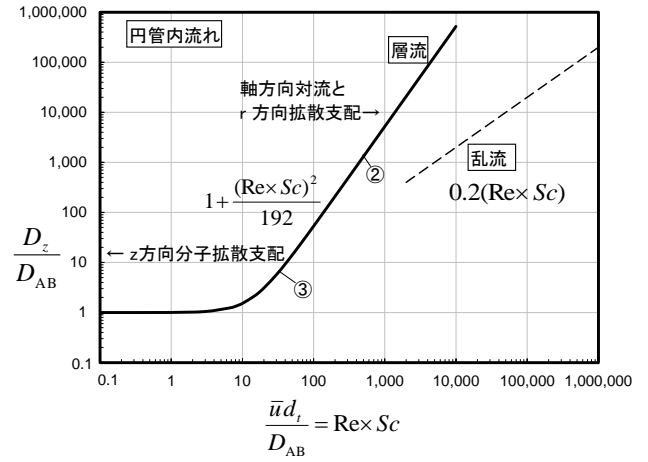


図3 円管内流れの混合拡散係数と分子拡散係数の関係

3. CFD で確かめる Taylor 分散

以上の Taylor 分散の理論では、式(6)の関係のように、「分子拡散係数 D_{AB} の小さい溶質ほど混合拡散係数 D_z が大きくなる」という結論となっている。このことは直感的には矛盾しているように感じられる。そこで数値計算で確認してみる。

この問題は3次元(t, r, z)の拡散方程式(4)を解くことになるので、残念ながら Excel の扱える範囲を超える。そこで CFD (数値流体解析) ソフト (CFD2000) により計算する。

図 4 に CFD 数値計算の設定を示す。内径 1 mm の円管内を水が放物線速度分布で流れる。流速はごく遅く、200 s で平均 8 mm 流れるものとする。入口で矩形の溶質濃度を与え、200 s 後の溶質濃度の円管内分布と断面平均濃度分布を求める。

溶質として拡散係数 D_{AB} の比較的大きい食塩とした場合、(図 4③) 200 s 後の断面平均濃度は正規分布関数状となる。これは式(9)から予測された混合拡散係数

$$(D_z / D_{AB}) = 7.1, D_z = 8.3 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$$

による分布 (式(8)) (図 4③グラフの破線) と一致した。

一方、溶質を拡散係数の小さいタンパク質 (BSA)

$$(D_{AB} = 6.8 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}) \text{ とした場合、(図 4②) 断面平均濃度の分布は確かに図 2②で示した様な台形状になる。}$$

これは溶質がほぼ放物線速度分布に従って、軸方向に広がるためである。また、平均濃度の広がりには上の食塩の場合より大きくなっている。なおこの場合は Taylor 分散の理論 (正規分布) (図 4②グラフの破線) とは相違がある。

以上の数値計算例により、「分子拡散係数 D_{AB} の小さい溶質ほど混合拡散係数 D_z が大きくなる」ということは確認された。また、その原因も図に示した管内濃度分布から明かであろう。なお、これら図 4③、②の条件を図 3 中に示した。

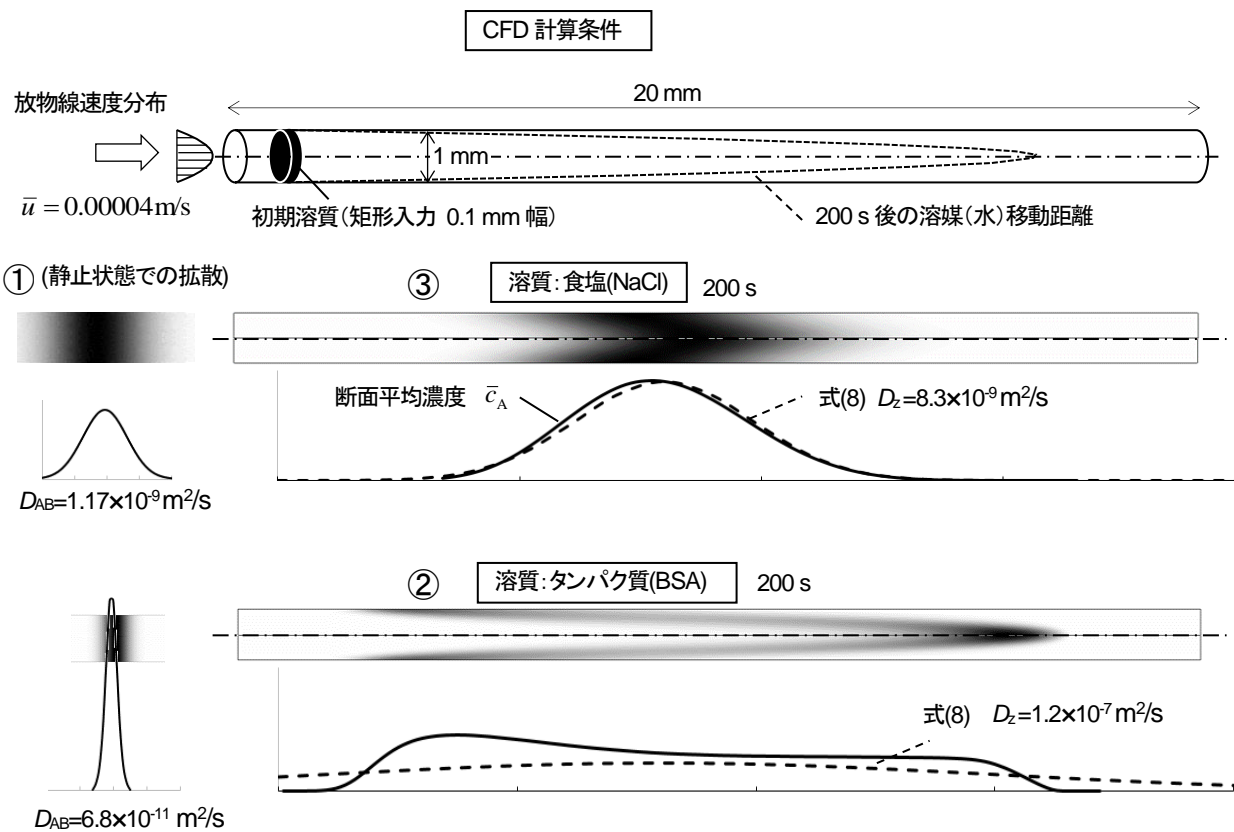


図4 CFD による Taylor 分散(食塩とタンパク質溶質の比較)

参考文献

- 1) Taylor, G.I.: Proc. Roy. Soc., A219, 186-203 (1953)
- 2) Bird, R.B., W.E. Stewart, E.N. Lightfoot: Transport Phenomena, 2nd ed., p. 643, John Wiley & Sons (2002)
- 3) 伊東 章: 物質移動解析, p. 59, 朝倉書店 (2013)
- 4) Levenspiel, O.: Chemical Reaction Engineering, 3rd ed., p. 311, John Wiley & Sons (1999)