

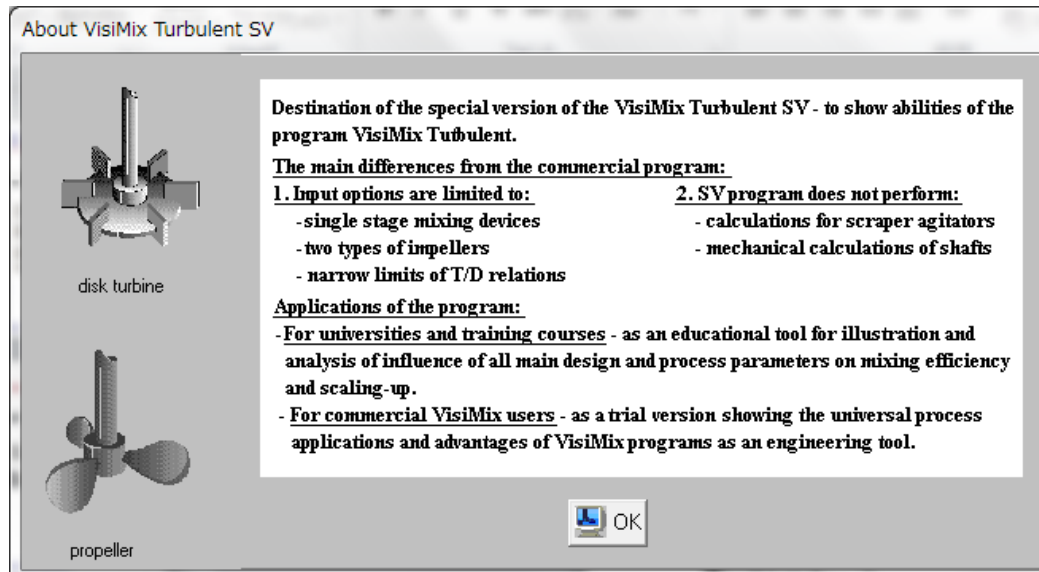


VisiMix

# VisiMix SV（無償版）チュートリアル

本資料では、攪拌装置シミュレータ VisiMix のトライアル版によるシミュレーションの手順を、例題を用いて説明します。

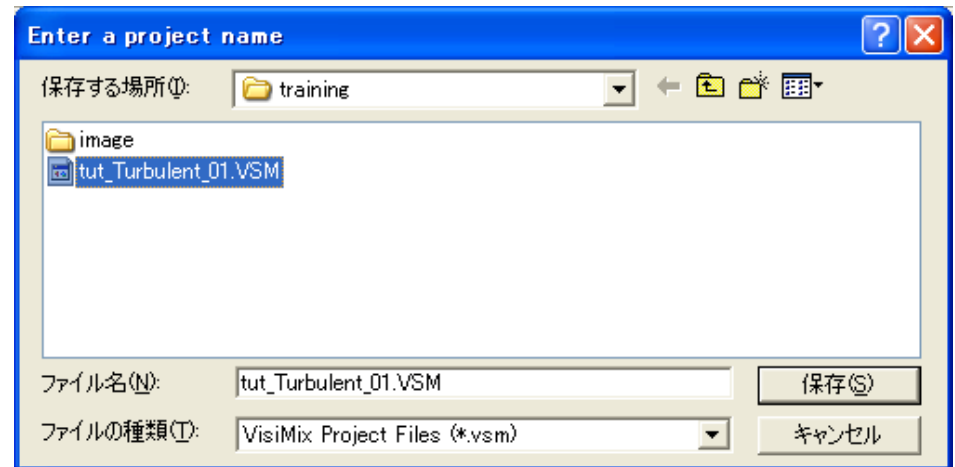
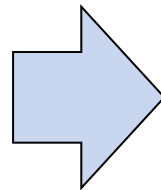
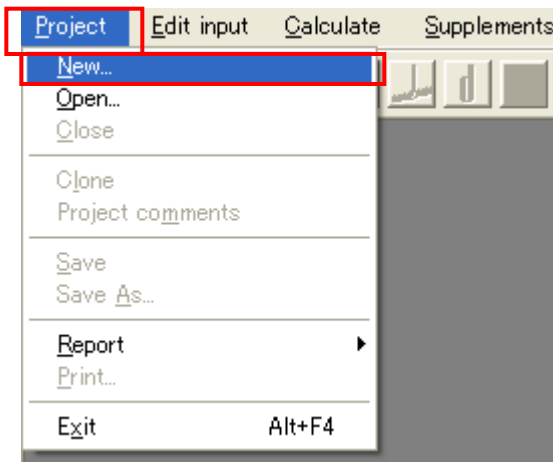
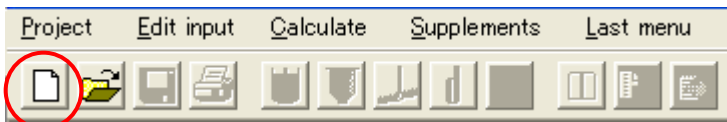
トライアル版を起ち上げると、機能制限について説明したダイアログが表示されます。




- 指定できる攪拌翼の形状は 2種類(ディスクタービン、プロペラ)です
- 入力できる寸法は制限されています
- 多段翼の指定は制限されています
- シャフト、スクレーパーの計算は実装されておりません

# 1. プロジェクトの作成

VisiMix SV を起動して、新規プロジェクトを作成します。

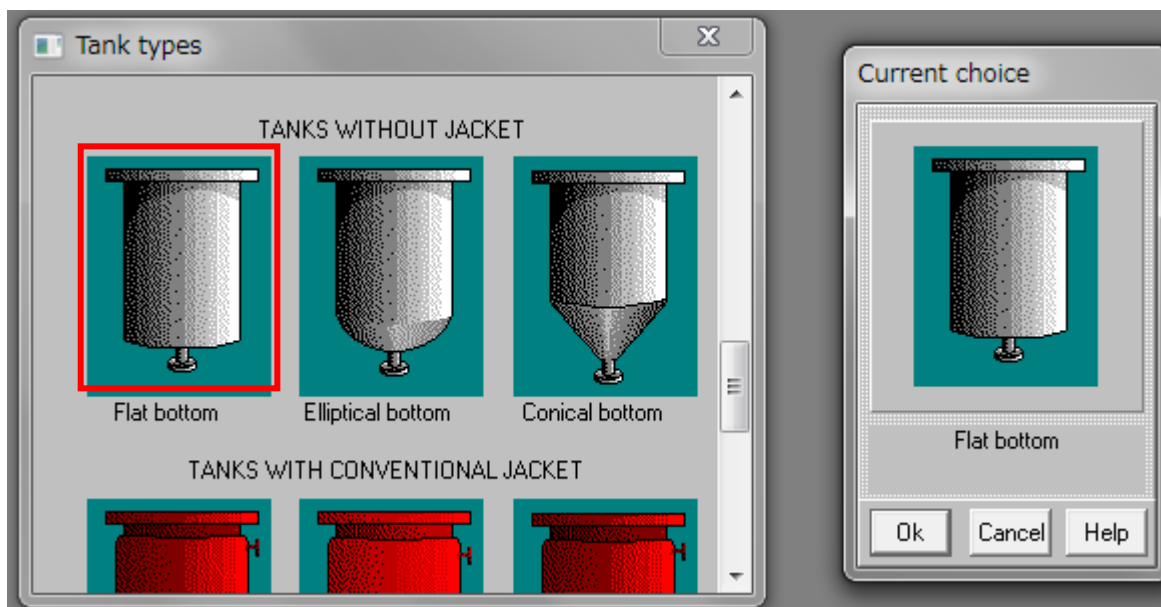


ツールバーの  アイコン、  
あるいは、メニュー Project > New を選択するとファイルの  
保存を指定するダイアログが表示されますので、任意の  
名前をつけて保存をしてください。

## 2. 装置の指定

プロジェクトを作成すると、計算に必要な指定\* が順次表示されます (\* 指定は後で変更が可能です)。

### 2-1. タンクの指定



表示されているダイアログから、該当する槽底の形状を選択します。  
ここでは、「Flat bottom(平型)」を選択してください。

形状を選択すると、次にタンクの指定(寸法と液量)を入力するダイアログが表示されます。

TANK WITH FLAT BOTTOM

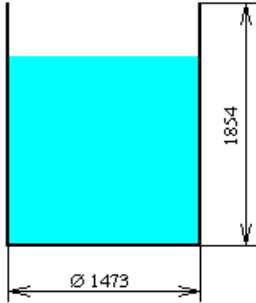
Inside diameter

Total tank height

Total volume

Level of media

Volume of media



OK Cancel Choose new tank Print Help

単位系はプルダウンメニューから変更が可能です。

Inside diameter (槽内径) = 58 [in]  
 Total tank height (槽全長) = 73 [in]  
 Total volume (槽容量) = 3161 [l]  
 Level of media (液高さ) = 56.82 [in]  
 Volume of media (液量) = 650 [gal]

Tips : 槽の寸法が指定されている場合、液量を入力すると液高さが自動で与えられます。

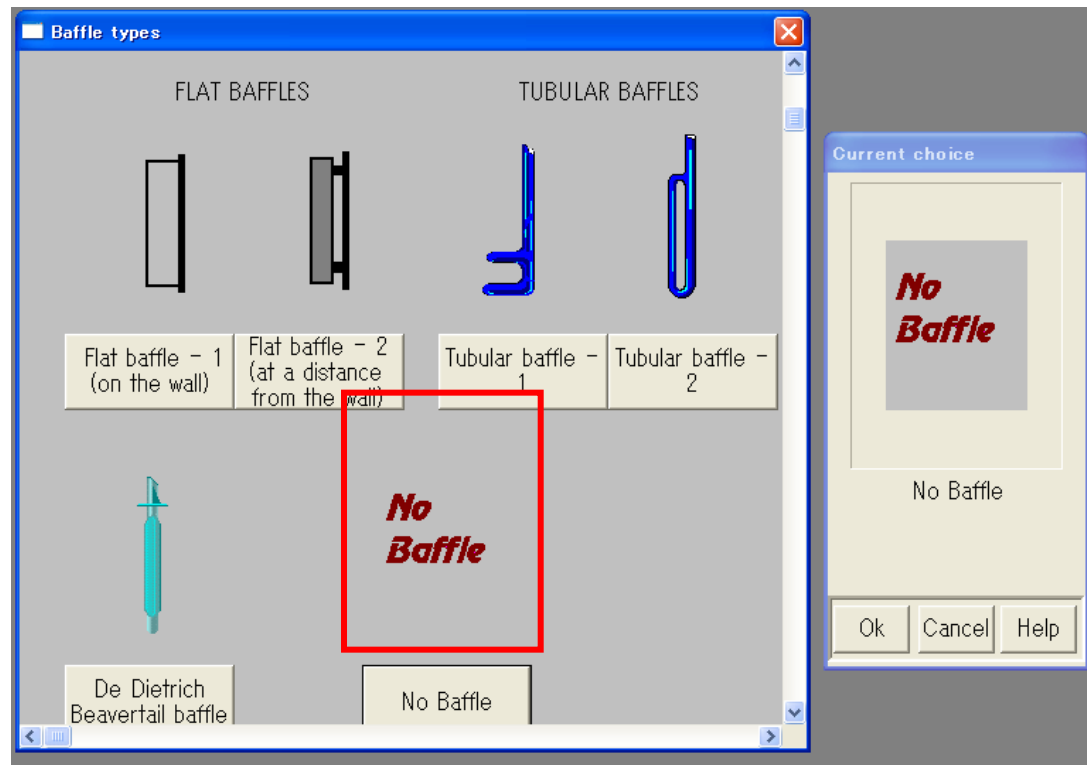
#### 各ボタンについて

Chose new ## : 形状の選択に戻ります。  
 Print : 現在入力されている形状情報を印刷します。  
 Help : ユーザーガイドの該当ページを開きます。

寸法を入力したら、OKを押してください。

## 2-2. バッフルの指定

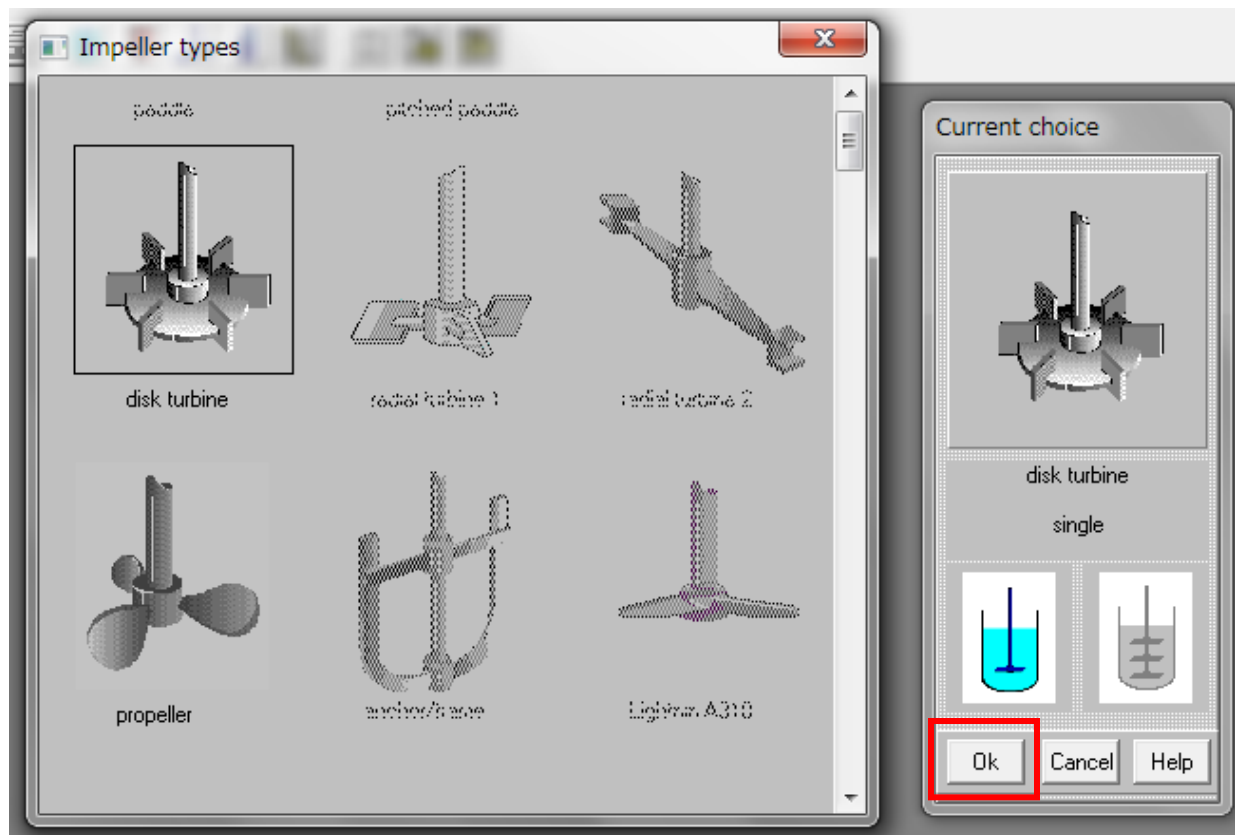
タンクの指定が終了すると、次にバッフルの形状を選択するダイアログが表示されます。



ここでは、「No baffle(バッフル無し)」を選択してください。

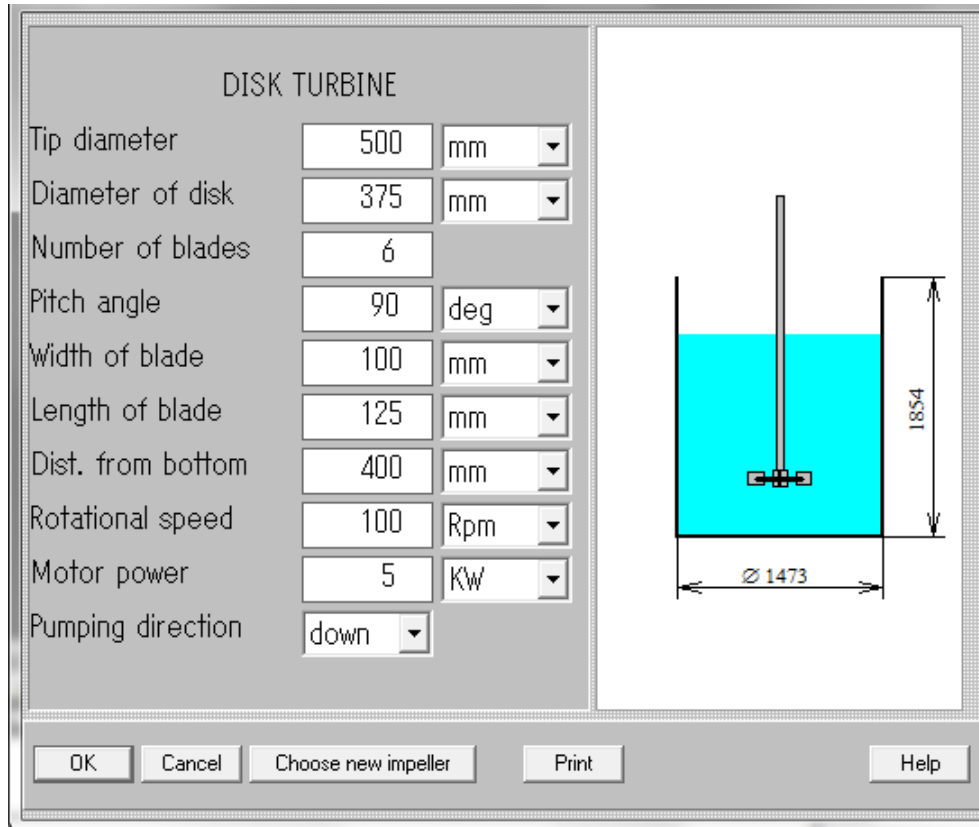
## 2-3. 攪拌機の指定

バツフルの指定が終了すると、次に攪拌翼の形状を選択するダイアログが表示されます。



ここでは、「disk turbine (ディスクタービン)」を選択し、**OK** を押してください。

攪拌翼の形状を選択すると、次に寸法と運転条件を入力するダイアログが表示されます。



- Tip diameter (翼径) = 500 [mm]
- Diameter of disc (ディスク径) = 375 [mm]
- Number of blades (羽根枚数) = 6
- Pitch angle (羽根傾斜角) = 90 [度]
- Width of blade (翼幅) = 100 [mm]
- Length of blade (翼長さ) = 125 [mm]
- Dist. from bottom (槽底からの距離) = 400 [mm]
  
- Rotational speed (回転数) = 100 [rpm]
- Motor power (モーター動力) = 5 [kW]
  
- Pumping direction (吐出流方向) = down

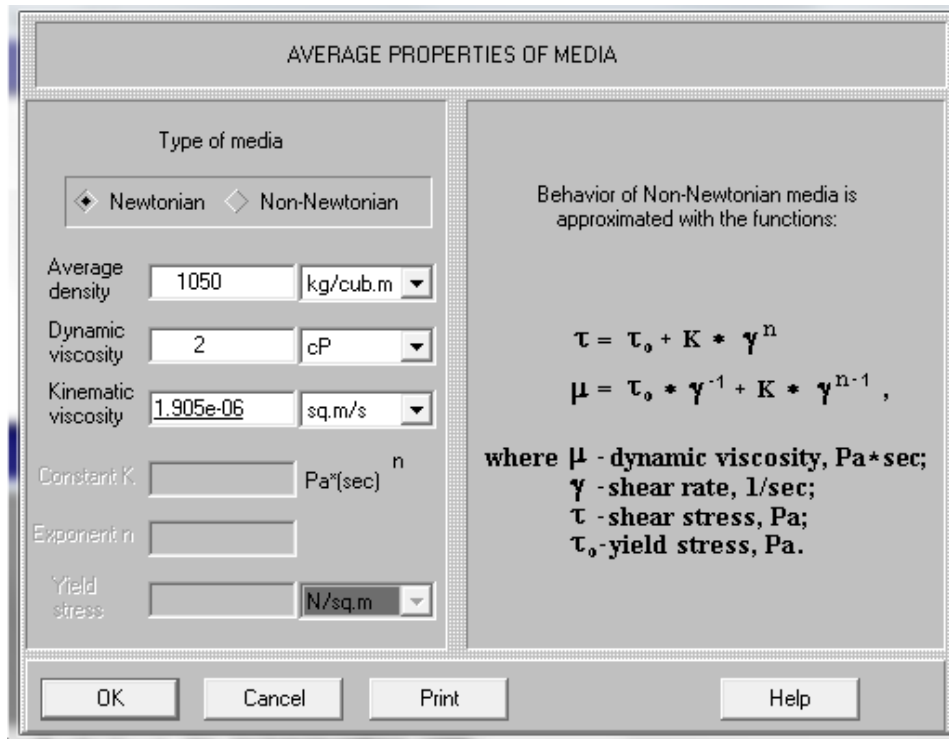
寸法を入力したら、**OK**を押してください。



# 3. 物性の指定

流体の物性(密度と粘度)を指定します。

粘度には、Dynamic viscosity(絶対粘度)か Kinematic viscosity(動粘度)のいずれかを入力します(Enterを押すと、密度の値を用いて入力されていないもう一方の値が与えられます)。



AVERAGE PROPERTIES OF MEDIA

Type of media

◆ Newtonian ◆ Non-Newtonian

Average density: 1050 kg/cub.m

Dynamic viscosity: 2 cP

Kinematic viscosity: 1.905e-06 sq.m/s

Constant K: Pa\*(sec)<sup>n</sup>

Exponent n:

Yield stress: N/sq.m

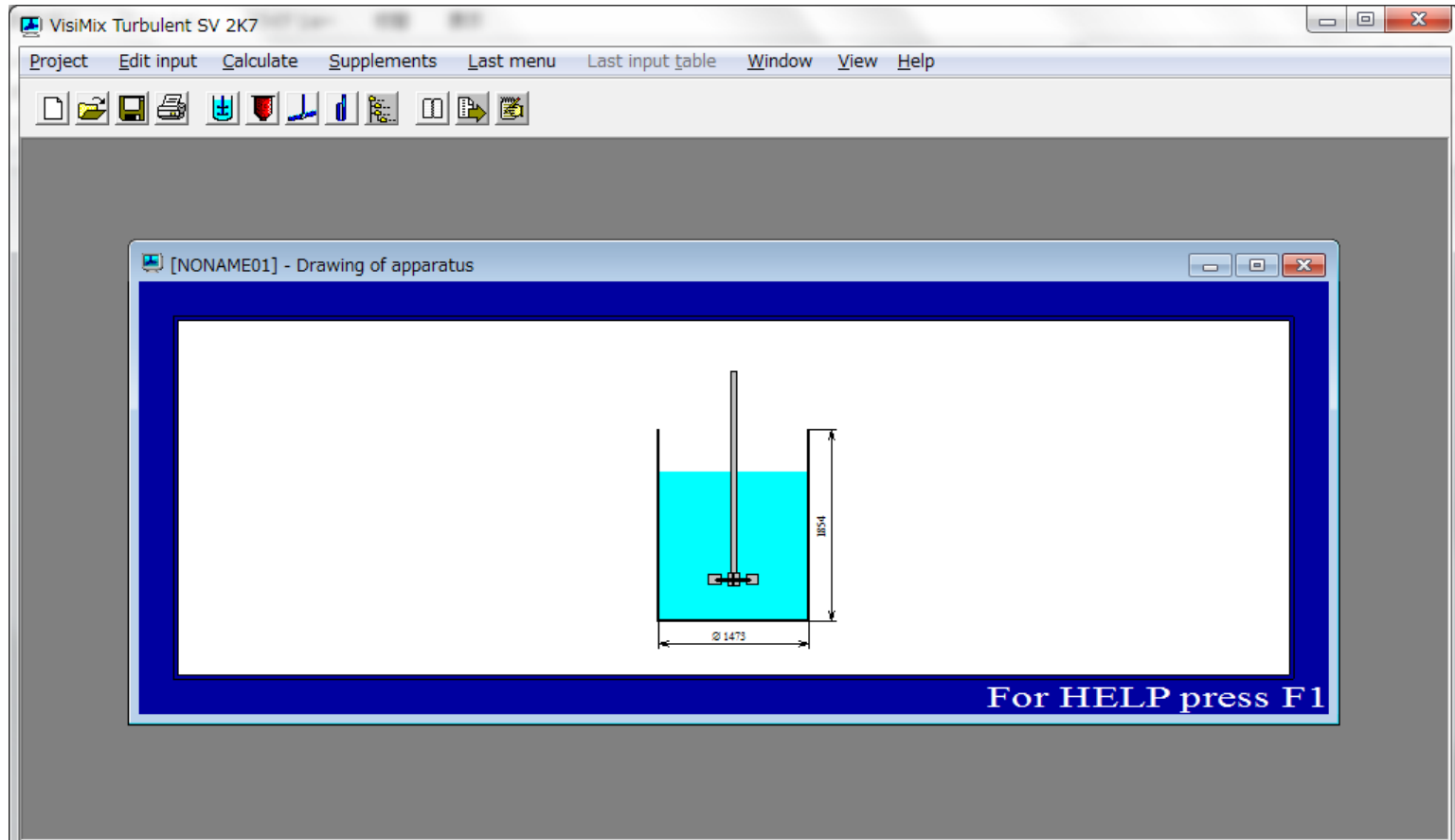
Behavior of Non-Newtonian media is approximated with the functions:

$$\tau = \tau_0 + K * \gamma^n$$
$$\mu = \tau_0 * \gamma^{-1} + K * \gamma^{n-1},$$

where  $\mu$  - dynamic viscosity, Pa\*sec;  
 $\gamma$  - shear rate, 1/sec;  
 $\tau$  - shear stress, Pa;  
 $\tau_0$  - yield stress, Pa.

OK Cancel Print Help

Average density (平均密度) = 1050 [kg/m<sup>3</sup>]  
Type of media = "Newton" (ニュートン流体)  
Dynamic viscosity = 2 [cP]



全ての指定が終了すると、指定した装置が描画されます。  
これで基本的な攪拌特性を計算するのに必要な入力は完了です。

# 4. 攪拌特性の計算

## 4-1. Hydrodynamics 計算結果

メニュー Calculate > Hydrodynamics >

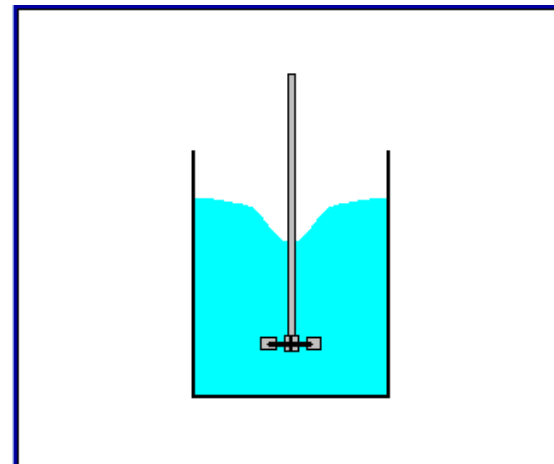
- ・ Mixing Power (攪拌動力) [W]

MIXING POWER		
Parameter name	Units	Value
Mixing power	W	96.5

- ・ Circulation flow rate(吐出流量) [ $m^3/s$ ]

CIRCULATION FLOW RATE		
Parameter name	Units	Value
Circulation flow rate	cub.m/s	0.0245

- ・ VORTEX FORMATION (ボルテクス形状)



- ・ VORTEX PARAMETERS (ボルテクス数値データ)

VORTEX PARAMETERS		
Parameter name	Units	Value
Vortex depth	m	0.340
Vortex volume	cub.m	0.0681
Area of media surface	sq.m	1.80
Media level increase due to vortex formation	m	0.0399

## 4-2. Turbulence 計算結果

メニュー Calculate > Turbulence >

- LOCAL VALUES OF ENERGY DISSIPATION (各位置でのエネルギー散逸率) [W/kg]

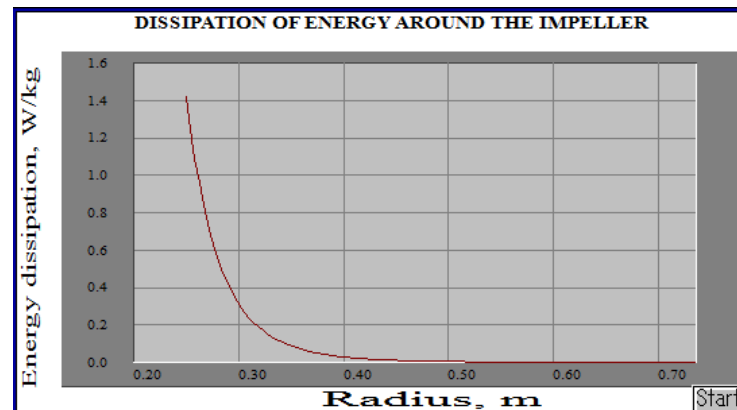
Parameter name	Units	Value
Energy dissipation - maximum value	W/kg	11.2
Energy dissipation - average value	W/kg	0.0374
Energy dissipation near baffles	W/kg	0.0246
Energy dissipation in the bulk volume	W/kg	0.0246

- TURBULENT SHEAR RATE IN DIFFERENT ZONES (各位置でのせん断速度) [1/s]

Parameter name	Units	Value
Turbulent shear rate near the impeller blade	1/s	2430
Turbulent shear rate near the baffle	1/s	114
Turbulent shear rate in the bulk volume	1/s	114

Tips: インペラーでのせん断速度がせん断作用の強さを決定します。

- DISSIPATION OF ENERGY AROUND THE IMPELLER (翼周辺のエネルギー散逸率)



## 4-3. Single-phase liquid mixing 計算結果

メニュー Calculate > Single-phase liquid mixing >

- ・ SINGLE-PHASE MIXING. MAIN CHARACTERISTICS (1相系の混合特性時間) [s]

Parameter name	Units	Value
Macromixing time	s	48.5
Mean period of circulation	s	100
Characteristic time of micromixing	s	16.8

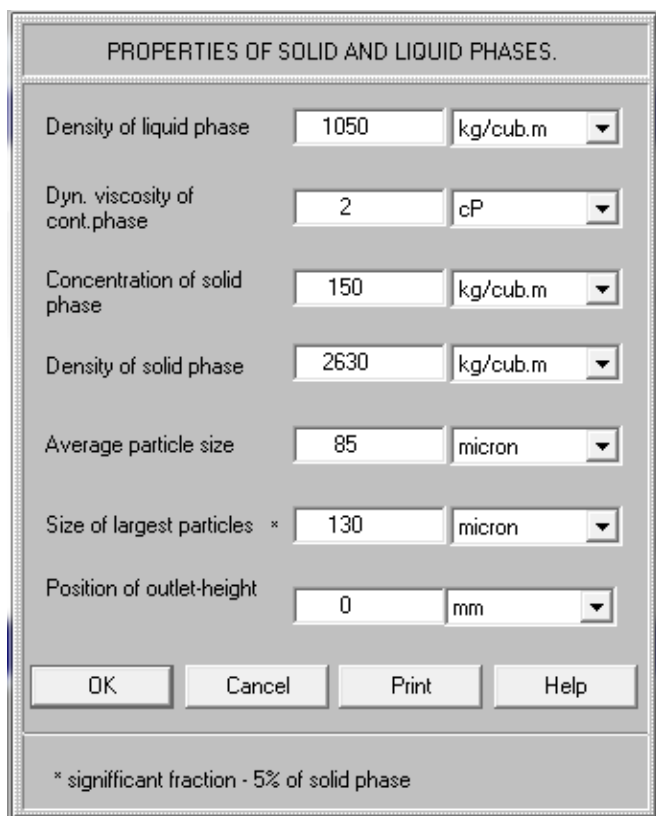
- ・ Macromixing time : マクロスケールの混合時間  
(トレーサーを瞬間的に注入し、不均一性 1%未満を達成するのに要する時間)
- ・ Mean period of circulation : 平均循環時間 (液量および吐出流量からの計算)
- ・ Characteristic time of micromixing : マイクロスケールの混合時間  
(溶解物などの分子レベルでの均一を達成するのに要する時間)

Tips: プロセスの完全混合時間 = マクロスケールの混合時間 + マイクロスケールの混合時間

# 5. 固-液混合の計算

## 5-1. 固-液混合の指定

メニュー Calculate > Liquid-solid mixing のいずれかの項目を選択すると、固-液混合の指定を行うダイアログが表示されます。



PROPERTIES OF SOLID AND LIQUID PHASES.		
Density of liquid phase	1050	kg/cub.m
Dyn. viscosity of cont.phase	2	cP
Concentration of solid phase	150	kg/cub.m
Density of solid phase	2630	kg/cub.m
Average particle size	85	micron
Size of largest particles *	130	micron
Position of outlet-height	0	mm

OK Cancel Print Help

\* significant fraction - 5% of solid phase

Density of liquid phase (液相密度) = 1050 [kg/m<sup>3</sup>]  
Dyn. viscosity of cont. phase (液相粘性) = 2 [cP]

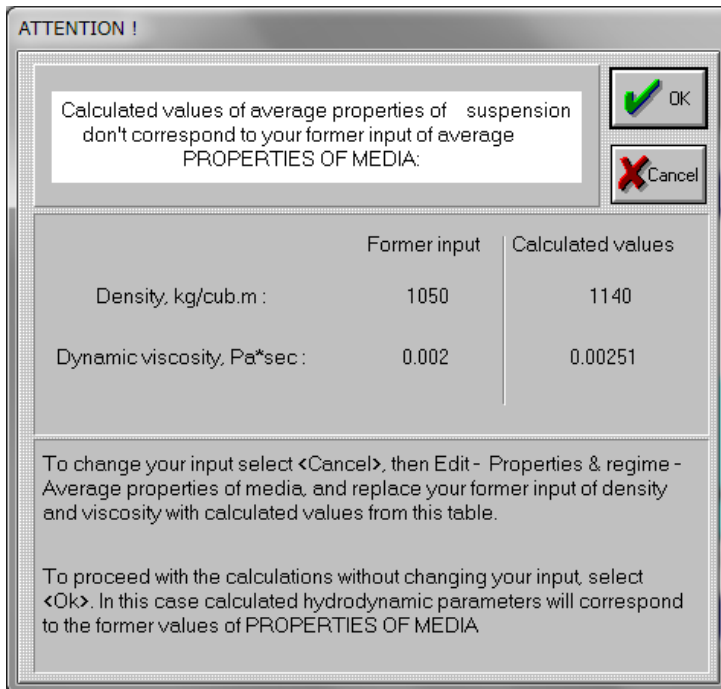
Concentration of solid phase (固体濃度) = 150 [kg/m<sup>3</sup>]  
Density of solid phase (固体密度) = 2630 [kg/m<sup>3</sup>]

Average particle size (平均粒径) = 85 [micron]  
Size of largest particle (最大粒径) = 130 [micron]

Position of outlet height (出口位置高さ) = 0 [mm]

## 5-2. 混合物の物性の提案

指定を終えると、VisiMixは混合溶液全体の物性を提案します。



Former input : ユーザーによる入力値

Calculated values : 固体や分散媒の存在を考慮した物性値

密度は各相の体積比によって重みづけられた平均の密度です。  
 粘性は以下のアインシュタインの粘度式で与えられます。

$$\mu = \mu_0 \cdot (1 + 2.5\varphi)$$

$\mu_0$  : 連続相の粘性

$\varphi$  : 分散相の体積分率

Edit input > Properties & regime > Average properties of media から、物性を提案された値に変更します。

AVERAGE PROPERTIES OF MEDIA

Type of media

Newtonian
  Non-Newtonian

Average density:  kg/cub.m

Dynamic viscosity:  Pa\*s

Kinematic viscosity:  sq.m/s

Constant K:  Pa\*(sec)<sup>n</sup>

Exponent n:

Yield stress:  N/sq.m

Average density:  kg/cub.m

Dynamic viscosity:  Pa\*s

Behavior of Non-Newtonian media is approximated with the functions:

$$\tau = \tau_0 + K * \gamma^n$$

$$\mu = \tau_0 * \gamma^{-1} + K * \gamma^{n-1},$$

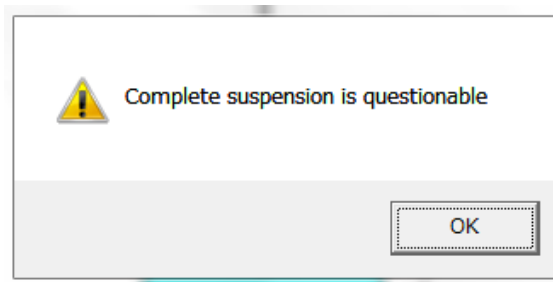
where  $\mu$  - dynamic viscosity, Pa\*sec;  
 $\gamma$  - shear rate, 1/sec;  
 $\tau$  - shear stress, Pa;  
 $\tau_0$  - yield stress, Pa.



条件によっては、攪拌の特性が液体のみ考慮した計算と、大きく異なる場合があります。

	液体の物性による 計算結果	固-液混合の物性による 計算結果
攪拌動力 [W]	96.5	108
吐出流量 [m <sup>3</sup> /s]	0.0245	0.0244
翼シアレート [1/s]	2430	2290
マクロ混合時間 [s]	48.5	48.5
ミクロ混合時間 [s]	16.8	20.6

## 5-3. Liquid-solid mixingの計算結果



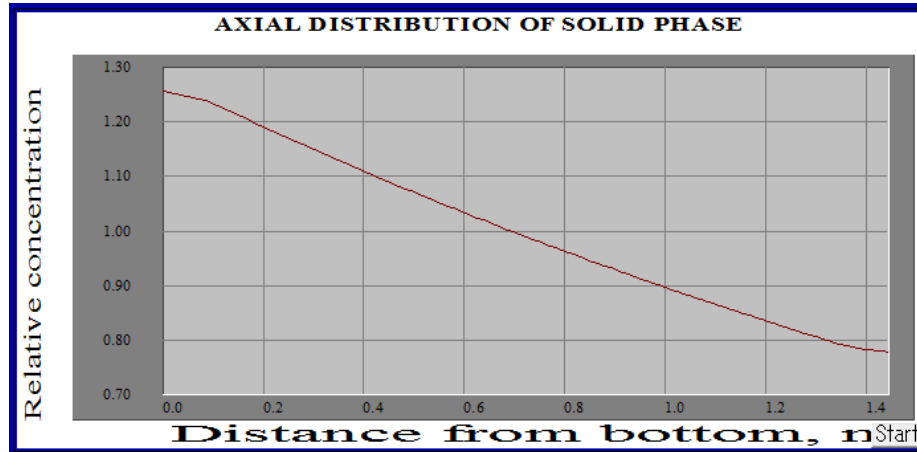
固液混合の計算が行われると、VisiMixはこの条件では懸濁が不十分であることが考えられる、という内容の警告がでます。

- LIQUID-SOLID MIXING. MAIN CHARACTERISTICS (固-液混合の代表的な特性値)

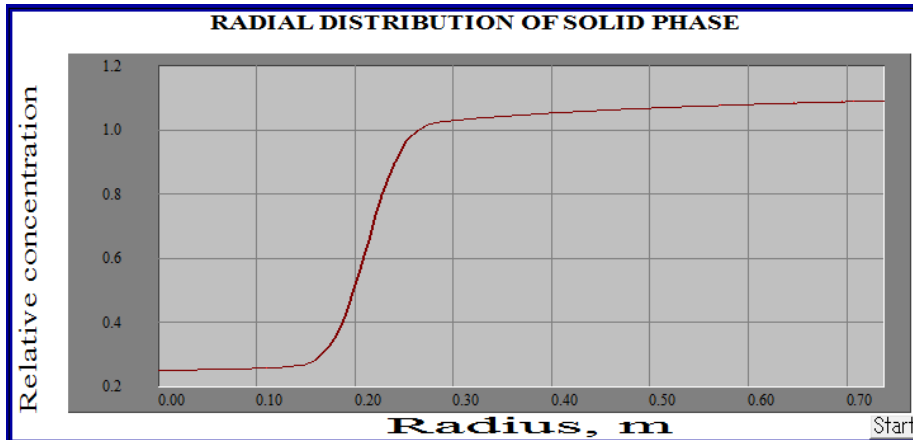
LIQUID-SOLID MIXING. MAIN CHARACTERISTICS		
Parameter name	Units	Value
Maximum degree of non-uniformity - axial, %		27.8
Maximum degree of non-uniformity - radial, %		74.9
Average concentration of solid phase in continuous flow	kg/cub.m	209
Maximum energy of collisions	J	2.58e-12
Characteristic time between two strong collisions	s	78.9

Tips: VisiMixは不均一性(non-uniformity)が 25%以上であると、混合が不十分であると見なします。

・ AXIAL DISTRIBUTION OF SOLID PHASE (固体の軸方向分布)



・ RADIAL DISTRIBUTION OF SOLID PHASE (固体の半径方向分布)



\* このグラフはローカルの値ではなく、  
平均値で表されます。

# 6. 液-液混合の計算

## 6-1. 液-液混合の指定

メニュー Calculate > Liquid-liquid mixing のいずれかの項目を選択すると、液-液混合の指定を行うダイアログが表示されます。

PROPERTIES OF CONTINUOUS AND DISPERSE LIQUID PHASES.

Continuous phase		Interfacial surface tension	
Density	1050 kg/cub.m	0.03	N/m
Dynamic viscosity	0.002 Pa*s		
Disperse phase		Index of admixtures	
Volume fraction	0.15	0	
Density	940 kg/cub.m	-1 - 0.5 - coagulants (de-emulsifiers)	
Dynamic viscosity	0.03 Pa*s	-0.5 - 0.1 - 2- and 3-valent ions of electrolytes	
		-0.1 - 0.1 - no significant admixtures (pure oil - water)	
		0.1 - 0.25 - electrolytes	
		0.25 - 0.5 - small quantities of deterqents	
		0.5 - 1 - deterqents,emulsifiers	

OK Cancel Print Help

### Continuous Phase (連続相)

Density (密度) = 1050 [kg/m<sup>3</sup>]

Dyn. viscosity (粘性) = 0.002 [Pa·s]

### Disperse phase (分散相)

Volume fraction (体積分率) = 0.15

Density (密度) = 940 [kg/m<sup>3</sup>]

Dyn. viscosity (粘性) = 0.03 [Pa·s]

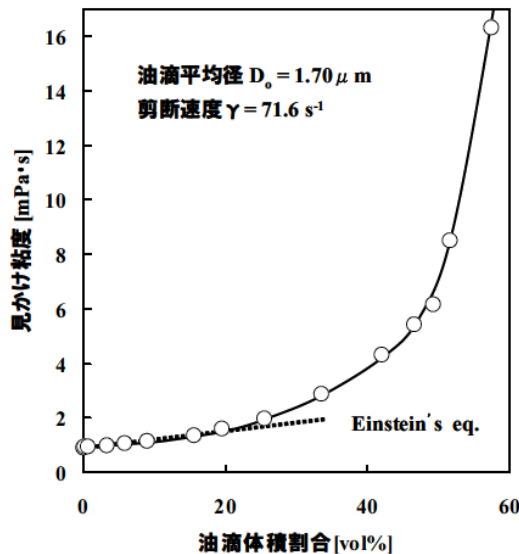
Interfacial surface tension = 0.03 [N/m]  
(界面張力)

Index of admixtures = 0  
(混和状態を表す指数)

	Former input	Calculated values
Density, kg/cub.m :	1050	1034
Dynamic viscosity, Pa*sec :	0.002	0.00275

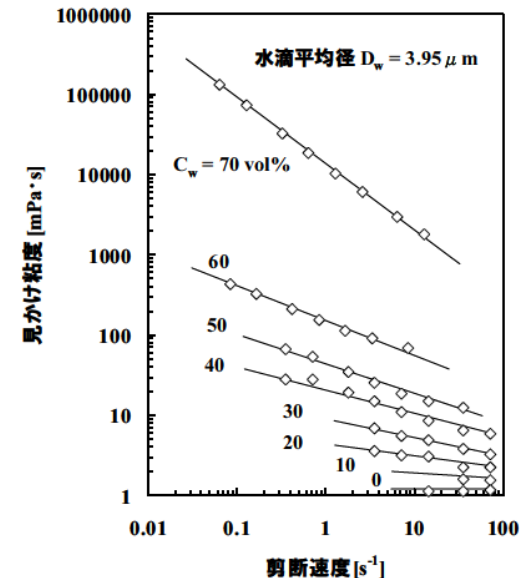
固液混合の計算と同様に、  
混合物の平均物性が提案されます。

## Note: エマルションの粘性について



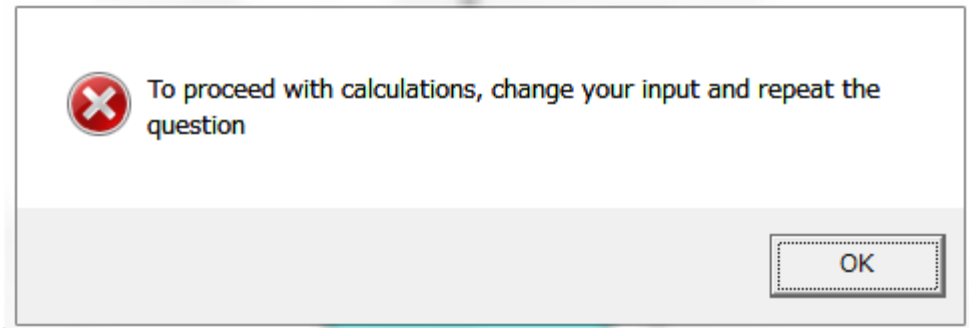
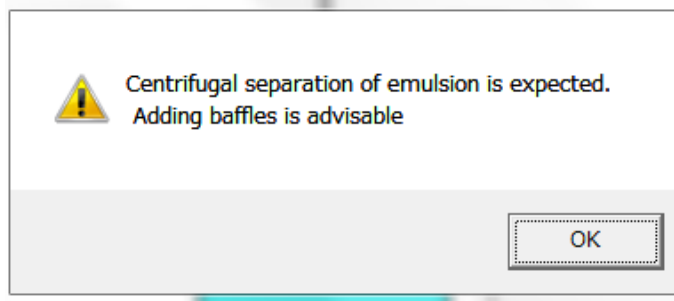
分散媒の体積割合が小さい場合、  
その振る舞いは剛体球と近似しており  
アインシュタインの粘度式で  
混合物の粘性を推算できます。  
しかし、分散媒が多くなると  
推算と離れた粘性を示します。  
(左図参照)

また、w/oエマルションの場合は  
分散媒の割合が増えると  
非ニュートン的な挙動を示すことも  
ご注意ください。  
(右図参照)



W/O エマルションの見かけ粘度と剪断速度の関係

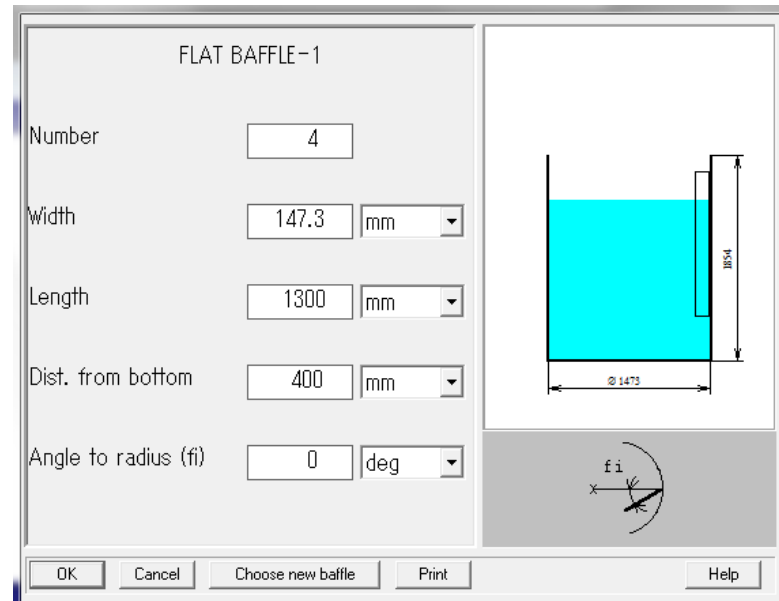
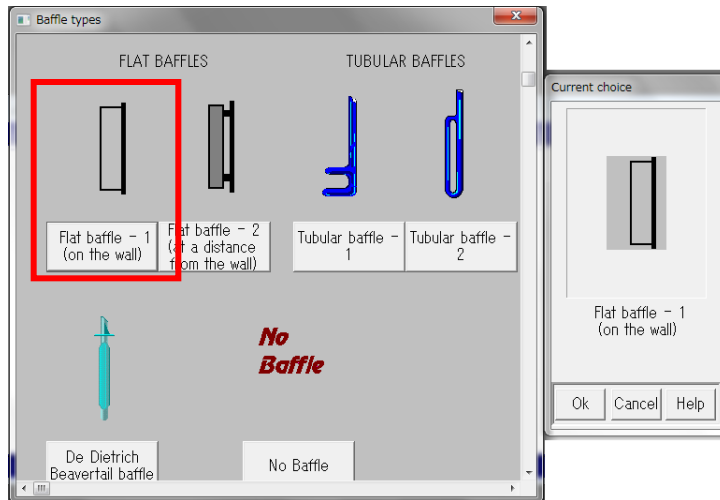
\* 参考文献: 清水正高, 宮崎県工業技術センター・宮崎県食品開発センター研究報告(2008)



液液混合の計算が行われると、VisiMixはエマルションが形成されないことを予測し、バッフルの追加を提案します。

## 6-2. バッフルの追加

ツールバーのバッフルのアイコンを押すと、バッフルを選択するダイアログが表示されますのでFlat baffle - 1(壁付きバッフル板)を選択して、寸法を入力します。



Number (枚数) = 4

Width (ノバフル幅) = 147.3 [mm]

Length (ノバフル高さ) = 1300 [mm]

Dist. from bottom (底からの距離) = 400 [mm]

Angle to radius(壁との接触角) = 0

バッフルの有無による計算結果の違いは以下のようになります。

	バッフル無し	バッフル有り
攪拌動力 [W]	101	736
吐出流量 [m <sup>3</sup> /s]	0.0243	0.388
翼シアレート [1/s]	2120	5810
マクロ混合時間 [s]	48.5	23.5
ミクロ混合時間 [s]	27.0	15.3

\* 液-液混合で提案された物性値を用いています。



## 6-3. Liquid-liquid mixingの計算結果

- ・ Sauter mean drop size (分散媒のザウター平均径) [m]

SAUTER MEAN DROP SIZE		
Parameter name	Units	Value
Sauter mean drop size	m	0.000420

- ・ Specific mass transfer area (比界面面積) [1/m]

SPECIFIC MASS TRANSFER AREA		
Parameter name	Units	Value
Specific mass transfer area	sq.m/cub.m	2140

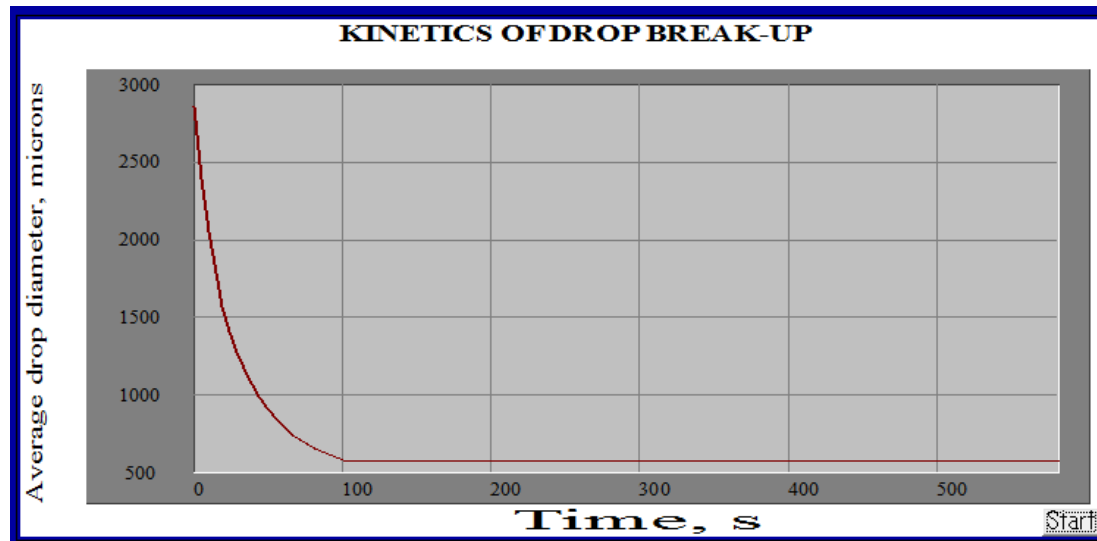
- ・ Mean drop size (分散媒の平均径) [m]

MEAN DROP SIZE		
Parameter name	Units	Value
Mean drop size	m	0.000571

- Mean micromixing time inside drop (液滴内のミクロ混合時間)

MEAN MICROMIXING TIME INSIDE DROP		
Parameter name	Units	Value
Mean micromixing time inside drop	s	31.5

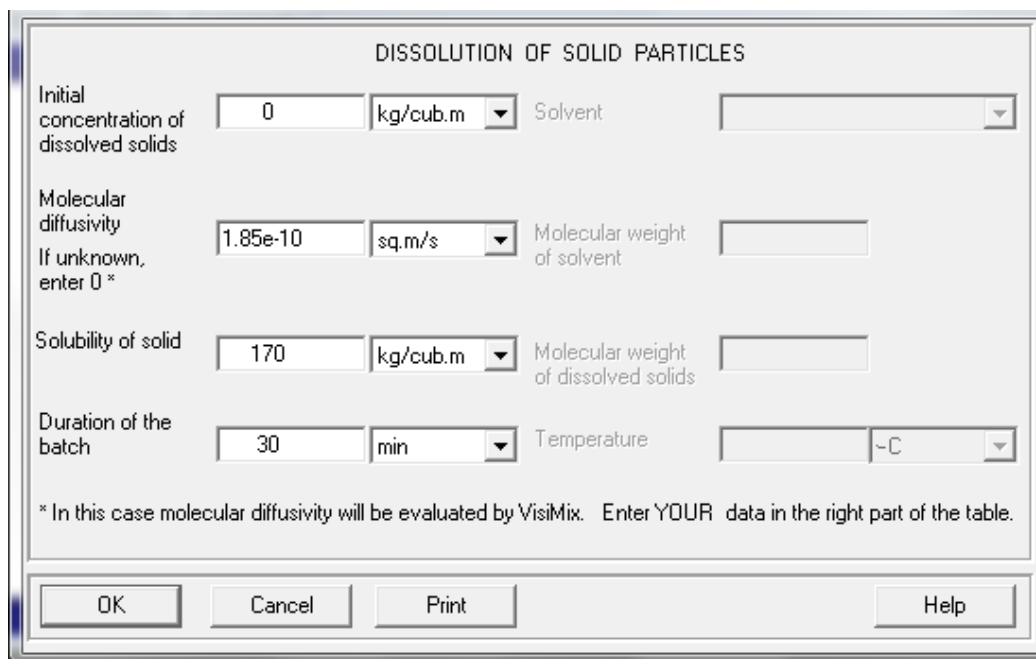
- KINETICS OF DROP BREAK-UP (平均液滴径の時間変化)



# 7. 溶解の計算

## 7-1. 固体の溶解を指定

メニュー Calculate > Liquid-solid mass transfer のいずれかの項目を選択すると、固体の溶解を指定するダイアログが表示されます。



DISSOLUTION OF SOLID PARTICLES			
Initial concentration of dissolved solids	0	kg/cub.m	Solvent
Molecular diffusivity If unknown, enter 0 *	1.85e-10	sq.m/s	Molecular weight of solvent
Solubility of solid	170	kg/cub.m	Molecular weight of dissolved solids
Duration of the batch	30	min	Temperature

\* In this case molecular diffusivity will be evaluated by VisiMix. Enter YOUR data in the right part of the table.

\* 拡散係数が不明な場合は、溶媒と溶質の分子量と温度から推算して与えます。

Initial concentration of dissolved solids (溶液中の初期濃度) = 0 [kg/m<sup>3</sup>]

Molecular diffusivity\* (溶液中での拡散係数) = 1.85e-10 [m<sup>2</sup>/s]

Solubility of solids (固体の溶解度) = 170 [kg/m<sup>3</sup>]

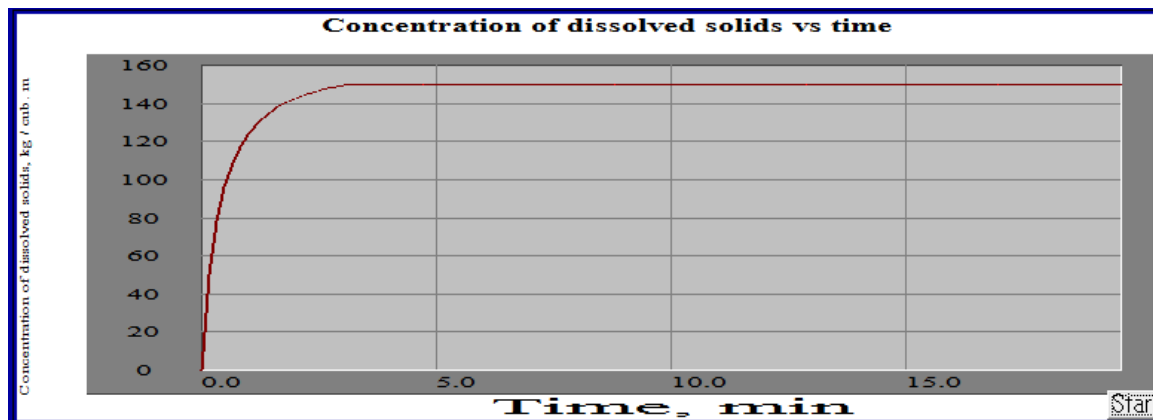
Duration of the batch (プロセスの時間) = 30 [min]

## 7-2. Liquid-solid mass transferの計算結果

- Time of complete dissolution (完全溶解時間) [s]

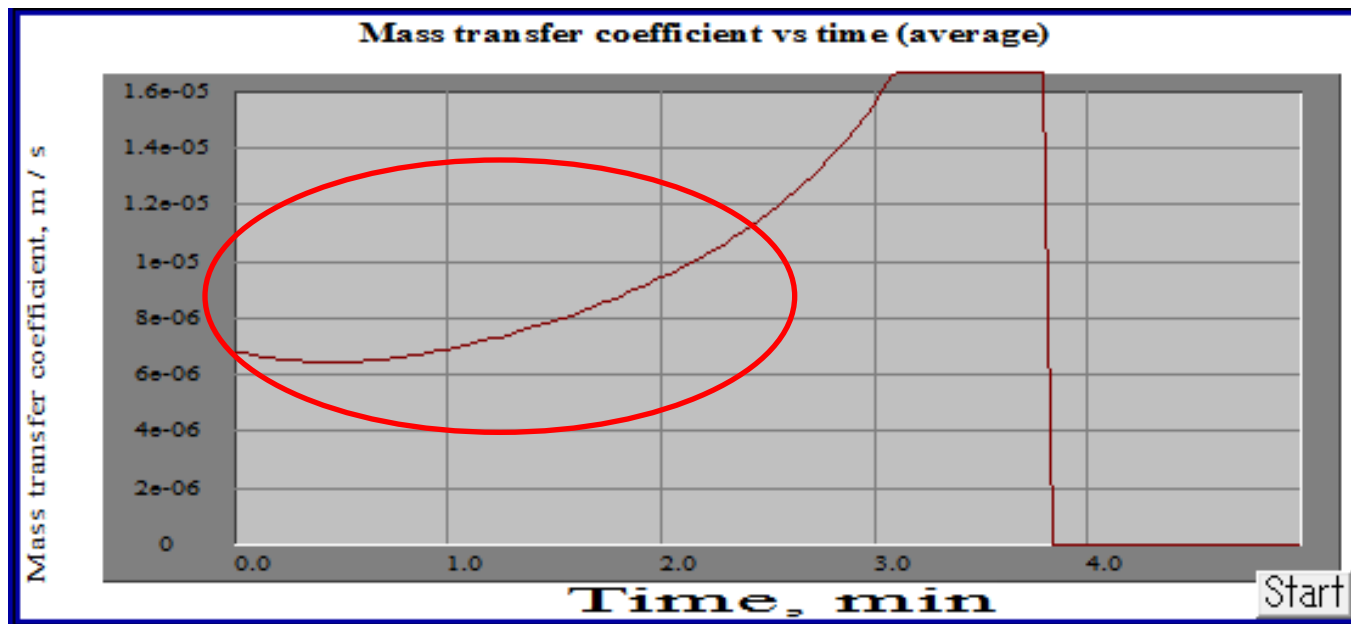
TIME OF COMPLETE DISSOLUTION		
Parameter name	Units	Value
Estimated dissolution time	s	232
Dissolution time for largest particles	s	1100

- Concentration of dissolved solids vs time (溶質濃度の経時変化)



## 7-2. Liquid-solid mass transferの計算結果

- ・Mass transfer coefficient vs time (average) (平均物質移動係数の経時変化)

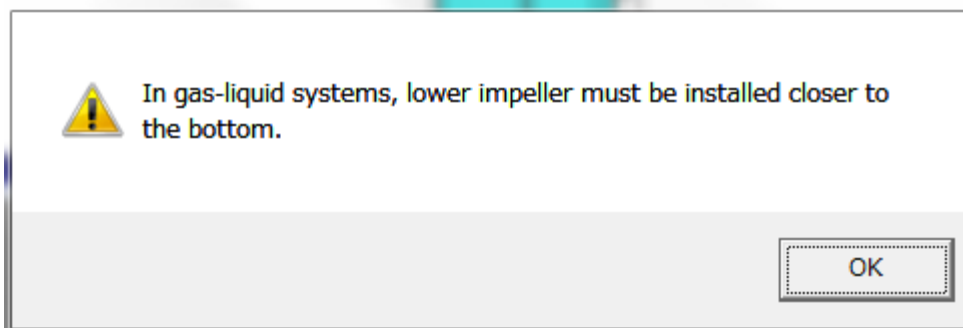


Tips: 晶析などについては、その運転条件での物質移動係数を評価します。  
 その場合、比較的初期(上図で赤く囲んでいる箇所)の数値が指標となります。

# 8. 気-液混合の計算

## 8-1. 攪拌機指定の変更

メニュー Calculate > Gas dispersion and mass transfer > Gas mass transfer rateを選択すると、攪拌機を底に近づけて配置するよう、警告が表示されます。



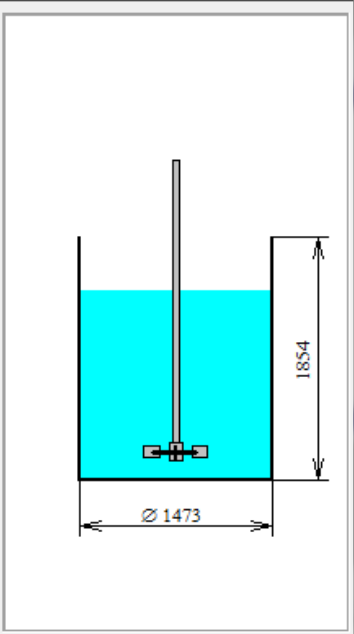
VisiMixにおいて通気用のスパージャーは翼下部に付設されているとし、槽の下方で十分な通気が行われなくなることが予測される場合、攪拌翼を底に近づけるよう警告を表示します。



ツールバーのインペラーのアイコンを押すと、  
現在選択している攪拌翼 (ディスクタービン) の寸法を指定する  
ダイアログが表示されますので、槽底からの距離を変更します。

DISK TURBINE

Tip diameter	500	mm
Diameter of disk	375	mm
Number of blades	6	
Pitch angle	90	deg
Width of blade	100	mm
Length of blade	125	mm
Dist. from bottom	200	mm
Rotational speed	100	Rpm
Motor power	5	KW
Pumping direction	down	



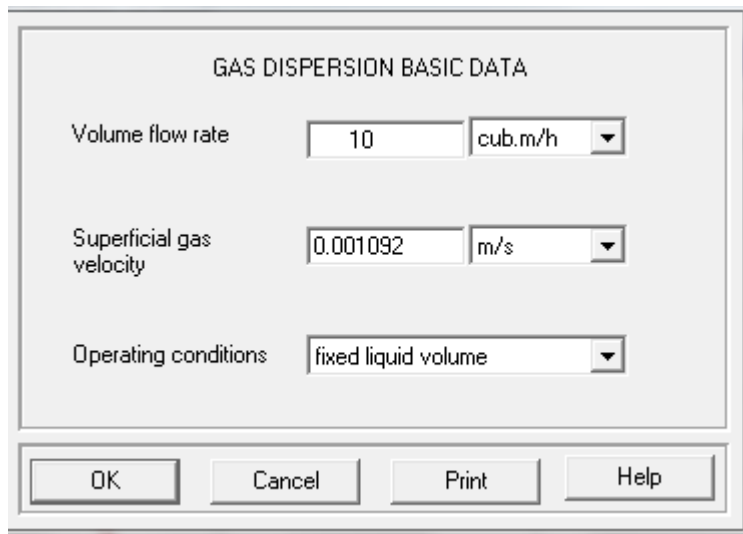
OK Cancel Choose new impeller Print Help

Dist. from bottom (底からの距離) = 200 [mm]

## 8-2. 気-液混合の指定

メニュー Calculate > Gas dispersion and mass transfer > Gas mass transfer rateを選択すると、ガスの分散、溶解を指定するダイアログが順次、表示されます。

まずは、ガスの供給について指定します。



Volume flow rate(体積流量) = 10 [m<sup>3</sup>/h]

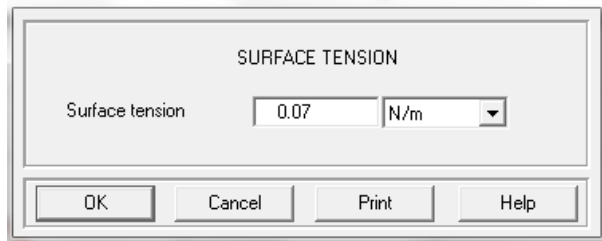
\* 体積流量と供給ガス速度(Superficial gas velocity)は片方が入力されれば、以下の関係からもう一方が計算されます。

体積流量 = 供給ガス速度 × 槽断面積

Operating condition (操作条件)\* = fixed liquid volume (液体積固定)

\* 一般にバッチ操作は液体積が固定、連続操作は液位が固定となります。



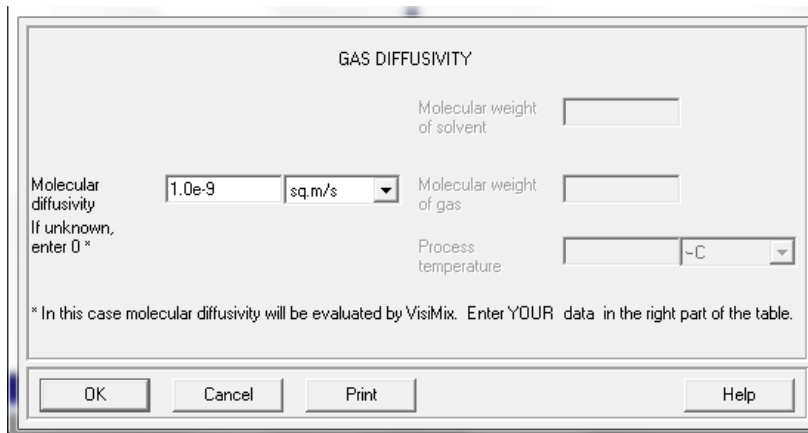


SURFACE TENSION

Surface tension

OK Cancel Print Help

Surface tension(表面張力) = 0.07 [N/m]



GAS DIFFUSIVITY

Molecular weight of solvent

Molecular weight of gas

Molecular diffusivity

Process temperature

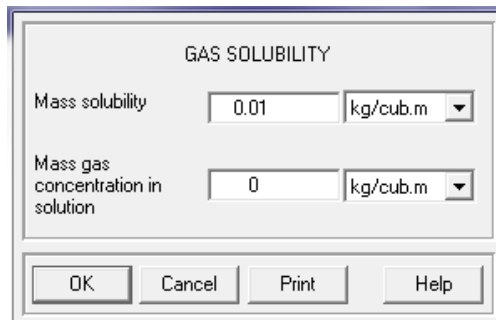
If unknown, enter 0 \*

\* In this case molecular diffusivity will be evaluated by VisiMix. Enter YOUR data in the right part of the table.

OK Cancel Print Help

Molecular diffusivity(拡散係数) = 1e-9 [m<sup>2</sup>/s]

\* 拡散係数が不明な場合は、気体と液体の分子量と温度から推算して与えます。



GAS SOLUBILITY

Mass solubility

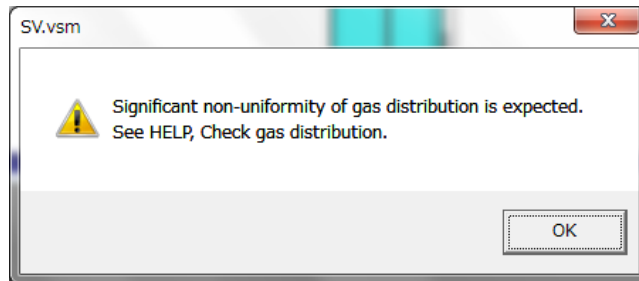
Mass gas concentration in solution

OK Cancel Print Help

Mass solubility(ガス溶解度) = 0.01 [kg/m<sup>3</sup>]

Mass gas concentration in solution(溶液中のガス濃度) = 0 [kg/m<sup>3</sup>]

## 8-3. Gas dispersion and mass transferの計算結果



槽内の気泡の分散が不十分である場合、VisiMixは各計算結果の前に警告を表示します。

気泡の分散状態については、Check gas distributionで表示されるメッセージから予測できます。

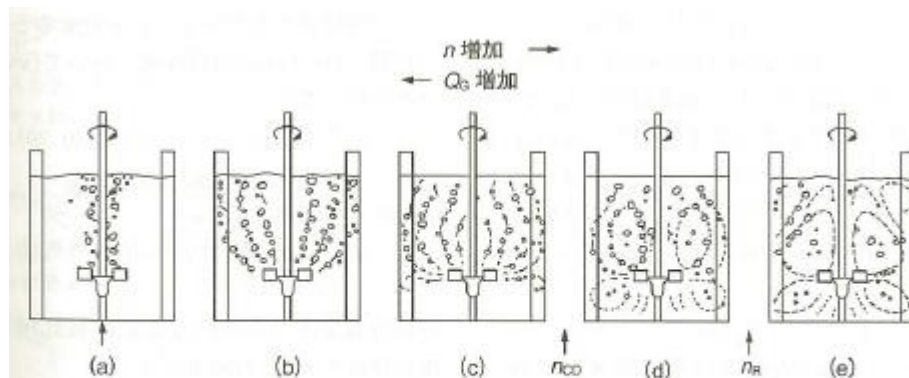


図 6・19 気泡分散状態の変化

[Nienow, A. W., D. J. Wisdom and J. C. Middleton : Proc. 2nd Euro. Conf. Mixing, BHRA, Cranfield, Paper F1(1977)]

$n$ : 回転数

$Q_G$ : 通気量

左図は改訂七版 化学工学便覧より引用

- Gas mass transfer rate (ガス物質移動速度) [kg/h]

GAS MASS TRANSFER RATE, KG PER HOUR		
Parameter name	Units	Value
Gas mass transfer rate, kg per hour		0.171

Tips : ガス吸収量[kg/l] = 物質移動速度 × プロセス時間 / 液体積

- Media depth (気体混入時の液位) [m]

MEDIA DEPTH		
Parameter name	Units	Value
Media depth	m	1.45

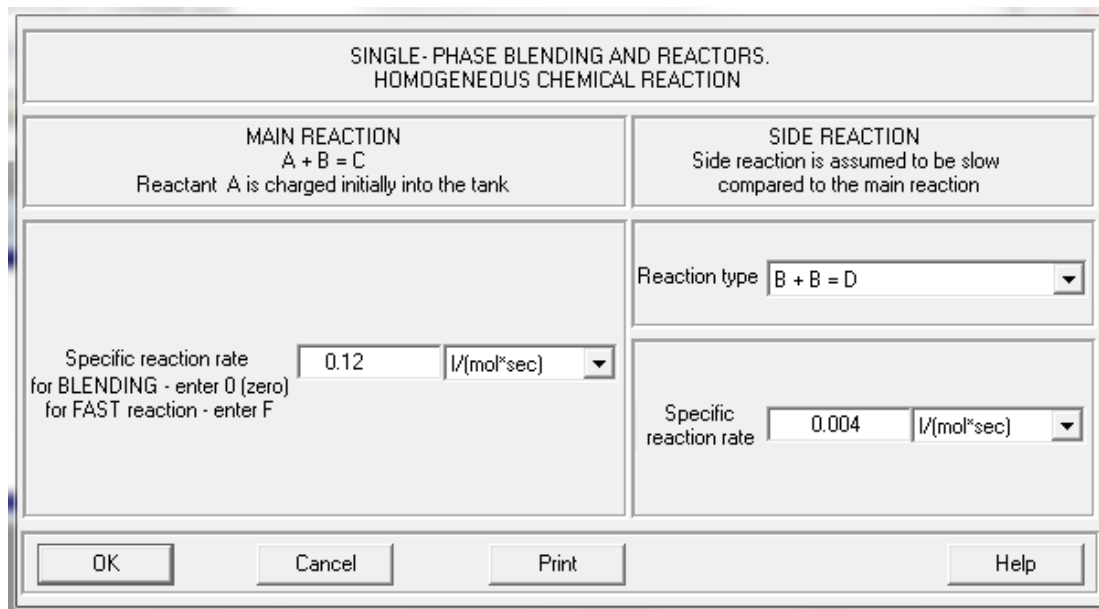
- Specific mass transfer coefficient (比物質移動係数)

SPECIFIC MASS TRANSFER COEFFICIENT, GAS-LIQUID		
Parameter name	Units	Value
Specific mass transfer coefficient, gas-liquid	1/sec	0.00192

# 9. 反応器の計算 (バッチ, セミバッチ)

## 9-1. バッチ反応器の指定

メニュー Calculate > Batch reaction/blending のいずれかの項目を選択すると、反応を指定するダイアログが表示されます。



SINGLE-PHASE BLENDING AND REACTORS.  
HOMOGENEOUS CHEMICAL REACTION

**MAIN REACTION**  
A + B = C  
Reactant A is charged initially into the tank

Specific reaction rate for BLENDING - enter 0 (zero) for FAST reaction - enter F: 0.12 l/(mol\*sec)

**SIDE REACTION**  
Side reaction is assumed to be slow compared to the main reaction

Reaction type: B + B = D

Specific reaction rate: 0.004 l/(mol\*sec)

Buttons: OK, Cancel, Print, Help

A, B: 反応物  
C: 主生成物  
D: 副生成物

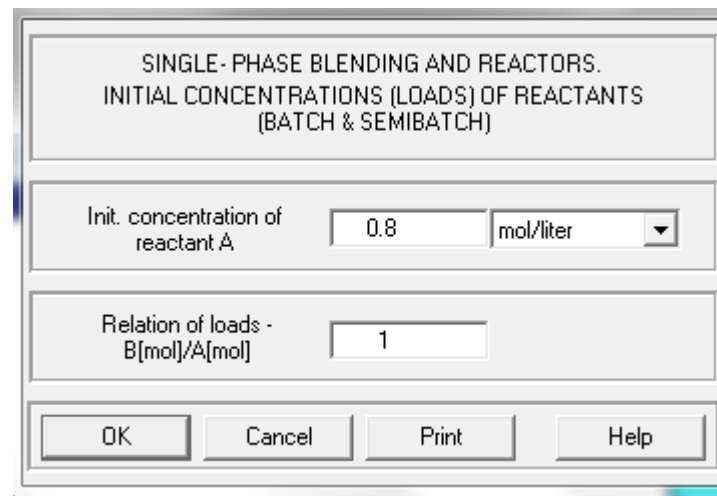
主反応は  $A + B \rightarrow C$  の形式で固定ですが、副反応は  $B + C \rightarrow D$ ,  $B + B \rightarrow D$  の形式のいずれかで表せます。

MAIN REACTION > Specific reaction rate (主反応の反応速度定数) = 0.12 [l/(mol·s)]

SIDE REACTION > Reaction type = "B + B = D"

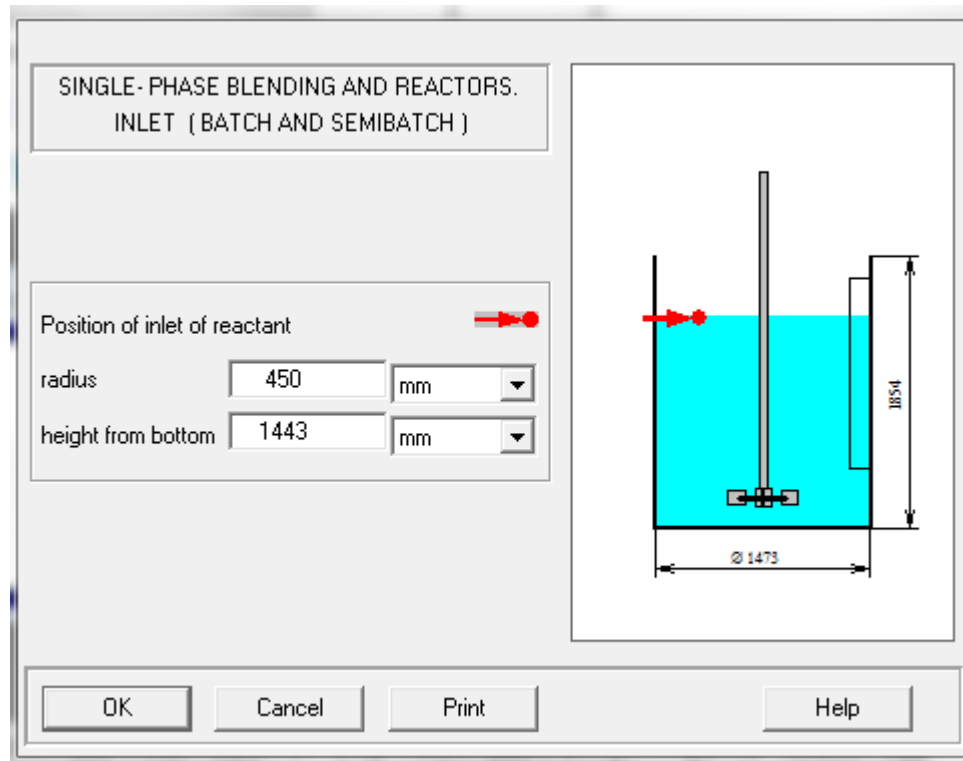
SIDE REACTION > Specific reaction rate (副反応の反応速度定数) = 0.004 [l/(mol·s)]

反応物 A の初期濃度を指定します。  
 反応物 B については、A の量に対する比でその量を指定します。



Init. concentration of reactant A (反応物 A の初期濃度) = 0.8 [mol/l]  
 Relation of loads B[mol]/A[mol] (反応物 B と A の存在量比) = 1 [-]

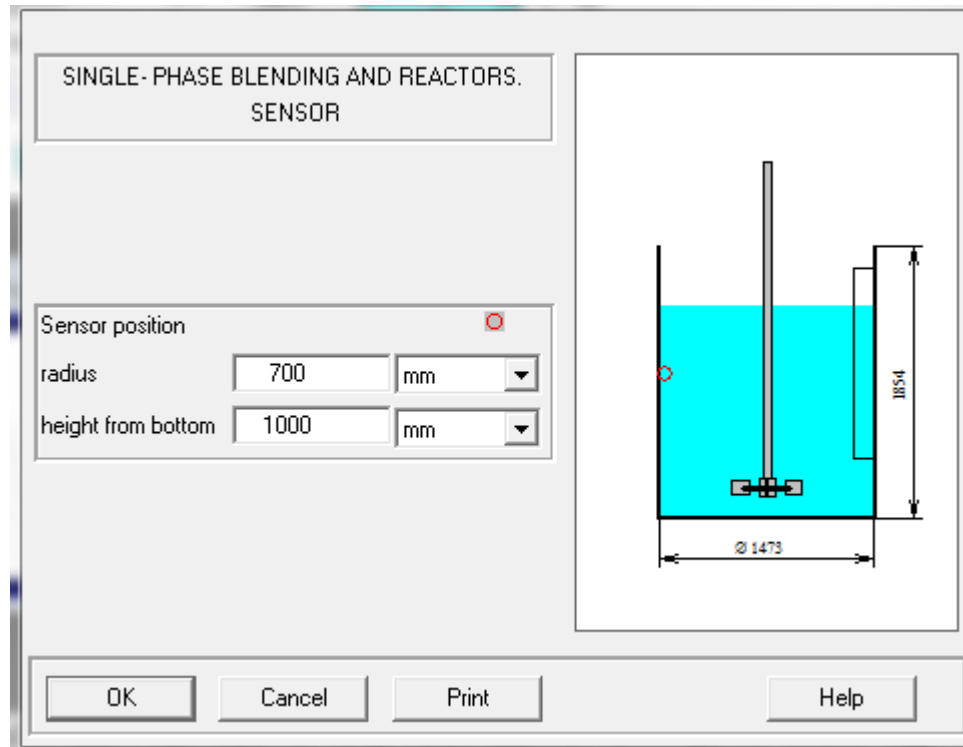
バッチ反応器の場合、反応物 A は完全に均一な状態とされています。  
 それに対し、反応物 B が指定位置に瞬間的に投入された、とします。その位置を指定します。



Position of inlet of reactant > radius (反応物入口の半径方向位置) = 450 [mm]

Position of inlet of reactant > height from bottom (反応物入口の底からの距離) = 1443 [mm] \*液面位置

センサーの位置を指定します。  
 指定した箇所の局所的な濃度変化を確認することが可能です。

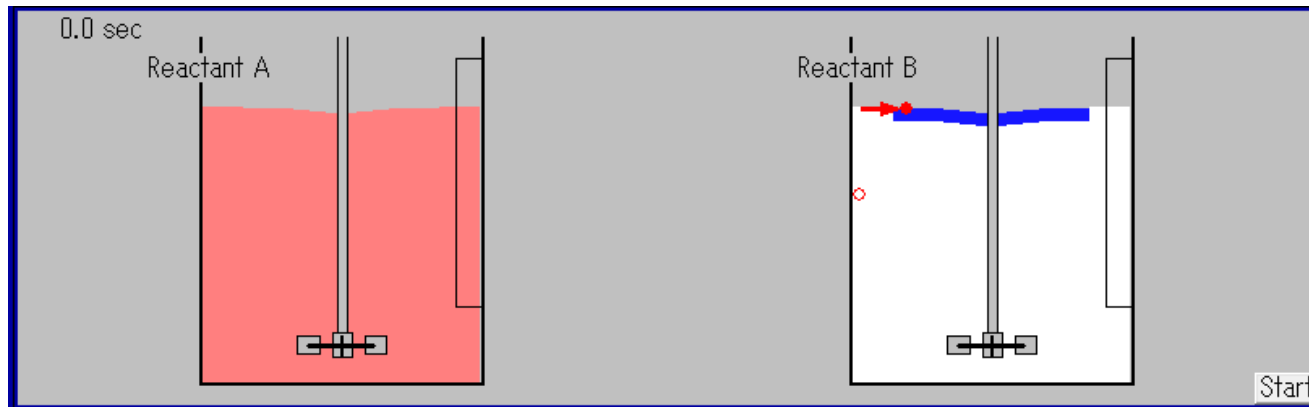


Sensor position > radius (センサーの半径方向位置) = 700 [mm]

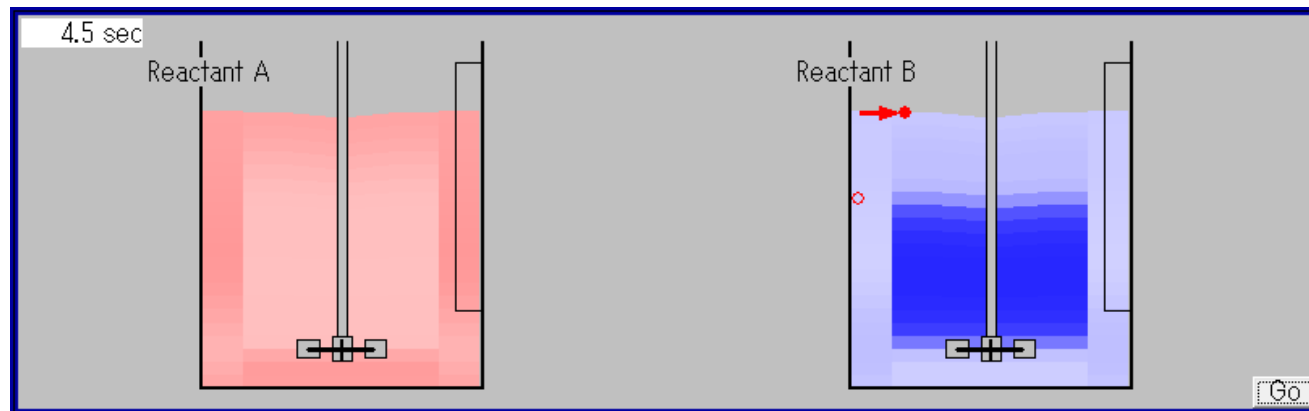
Sensor position > height from bottom (センサーの底からの距離) = 1000 [mm]

## 9-2. バッチ反応器の計算結果

- Batch reactor. General pattern (バッチ反応器内の濃度変化パターン)

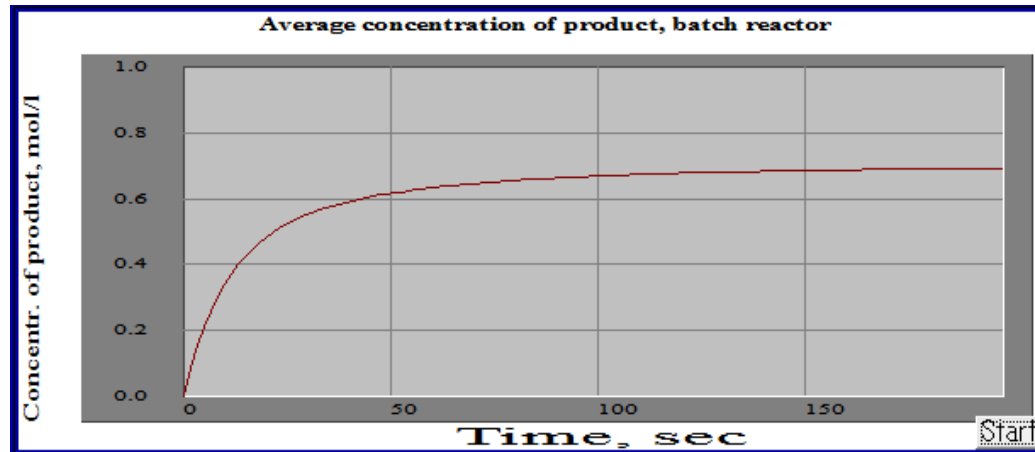


Start を押すとアニメが  
開始します。

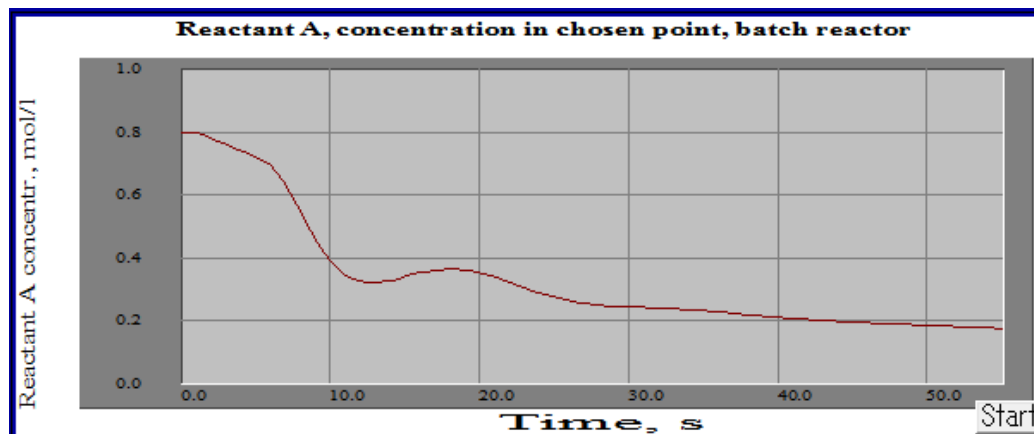




- Average concentration of product (主生成物の平均濃度の時間変化)



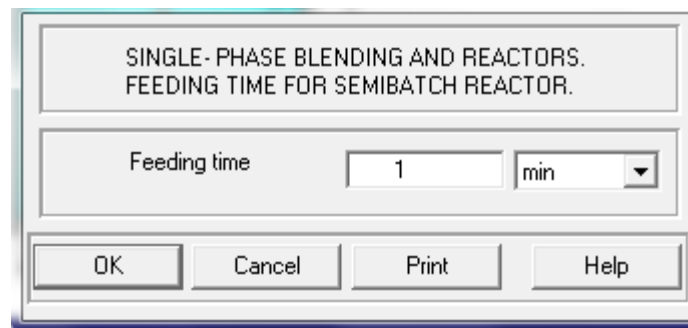
- Reactant A concentration in chosen point (センサー位置での反応物 A の濃度の時間変化)



## 9-3. セミバッチ反応器の計算

メニュー Calculate > Semibatch reaction のいずれかの項目を選択すると、供給時間を指定するダイアログが表示されます。

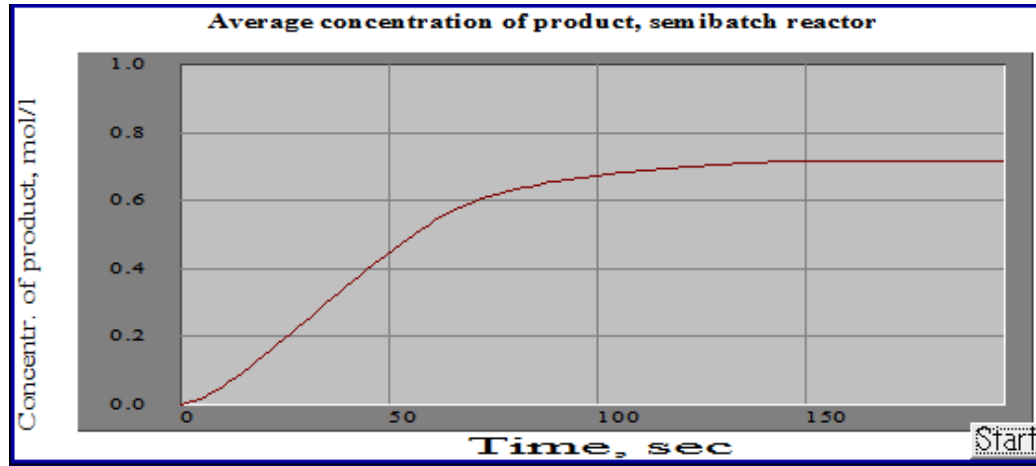
反応物 Bは指定した時間をかけて、任意の量(反応物初期濃度の項目で指定した量)供給されます。この時、攪拌器内の溶液量に対して供給される反応物 Bの体積は非常に小さいものとされます。



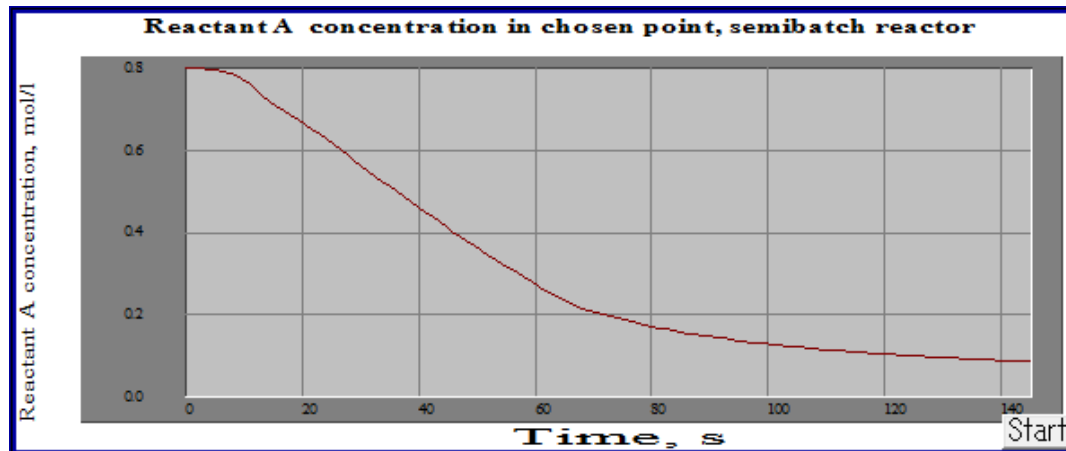
Feeding time (供給時間) = 1 [min]

General patternでバッチ反応器と同じように、反応物の濃度変化をアニメーション表示できます。

- Average concentration of product (主生成物の平均濃度の時間変化)



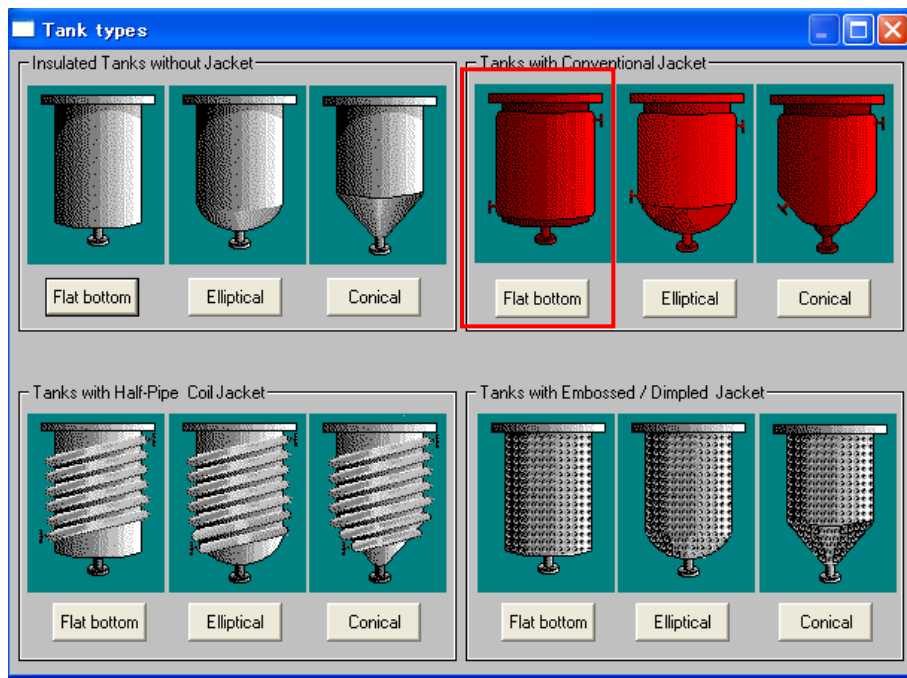
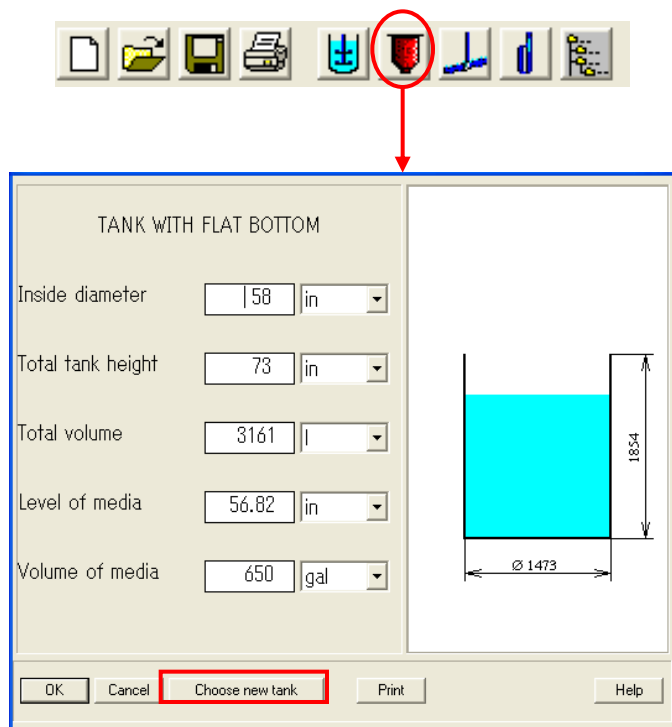
- Reactant A concentration in chosen point (センサー位置での反応物 A の濃度の時間変化)



# 10. 伝熱計算 (バッチ, セミバッチ)

## 10-1. ジャケットの指定

伝熱計算を行う場合、タンクにはジャケット有りの形状を指定します。



タンクの寸法を指定するダイアログで「Choose new tank」を押すと、形状を変更できますので、ジャケット有りのタンクを選択してください。

タンクの寸法を入力すると、新たにジャケットの入力のダイアログが表示されます。

TANK HEAT TRANSFER GENERAL DATA Help

Jacket covers bottom: YES

Number of jacket sections: 1

Lower section

Distance from bottom: [ ] mm

Height, Hlow: 65 in

Heat transfer area for lower section: 8 sq.m

If unknown, enter 0 \*

Upper section

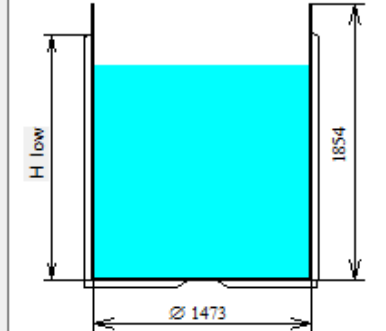
Distance between two sections: [ ] mm

Height, Hup: [ ] mm

Heat transfer area for upper section: [ ] sq.m

If unknown, enter 0 \*  
Connection of jackets: [ ]

\* In this case heat transfer area will be evaluated by VisiMix



OK Cancel Print

Jacket covers bottom = Yes  
(ジャケットが槽底まで覆うのか)

Number of jacket sections = 1  
(ジャケットのセクション数)

Height(ジャケット高さ) = 65 [in]

Heat transfer area(伝熱面積) = 8 [m<sup>2</sup>]

Tips: 伝熱面積に 0 を指定すると、プログラムが入力された形状情報から自動で計算し伝熱面積を与えます。

しかしながら、単純化された構造で面積を計算するため、実際の値を入力の方が精度はよくなります。

## 10-2. 伝熱計算の指定(バッチ操作)

メニュー Calculate > Heat transfer. Batch (BH) > Liquid agent (LA) > の項目のいずれかを選択すると、バッチ式攪拌槽の伝熱計算に必要な指定のダイアログが順次表示されます。

まずは、化学反応および反応熱の指定を行うダイアログが表示されます。

HEAT TRANSFER. CHEMICAL REACTION DATA AND TEMPERATURE LIMITS

<p>Will you enter reaction kinetics? <input type="text" value="YES"/> [v]</p> <p>Arrhenius constant <input type="text" value="0.12"/> [l/(mol*sec)] [v]</p> <p>Energy of activation <input type="text" value="0"/> [J/mol] [v]</p> <p>Lower limit of temperature <input type="text" value="10"/> [°C] [v]</p> <p>Upper limit of temperature <input type="text" value="90"/> [°C] [v]</p> <p>Heat effect of reaction <input type="text" value="5e+04"/> [J/mol] [v]</p>	<p>Reaction velocity constant K is described by Arrhenius equation :</p> $K = A \exp(-E / RT),$ <p>where</p> <p>A is Arrhenius constant ,  E is energy of activation ,  <math>R = 8.314 \text{ J / (mol}^{\circ}\text{K)} = 1.986 \text{ Btu / (lb}^{\circ}\text{mol) / }^{\circ}\text{F}</math>  is universal gas constant ,  T is absolute temperature .</p>
--	--

Will you enter reaction kinetics? = Yes

Arrhenius constant (アレニウス式の頻度因子) = 0.12 [l/(mol·s)]

Energy of Activation (活性化エネルギー)\* = 0 [J/mol]

Lower limit of temperature(温度の下限値) = 20 [°C], Upper limit of temperature(温度の上限値) = 80 [°C]

Heat effect of reaction (反応熱) = 50 [kJ/mol] = 50000 [J/mol]

Tips: 活性化エネルギーがゼロということは、与えられた反応速度式に温度依存性がないことを表します。

次に、槽壁部材を指定します。

TANK SHELL CHARACTERISTICS

Material	<input type="text" value="Stainless steel (generalized)"/>	
Wall thickness	<input type="text" value="6"/>	<input type="text" value="mm"/>
Thermal resistance of fouling	<input type="text" value="0.0002"/>	<input type="text" value="(m&lt;sup&gt;2&lt;/sup&gt;·K)/W"/>
Tank mass (without drive) If unknown, enter 0 *	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="kg"/>

\* In this case tank mass will be evaluated by VisiMix

Material(壁材) = Stainless steel (generalized)

Wall thickness(壁厚み) = 6 [mm]

Thermal resistance of fouling = 0.0002 [(m<sup>2</sup>·K)/W]  
(槽壁内側の汚れ係数)

\* 汚れ層の厚み = 0.5 [mm]として計算されます。

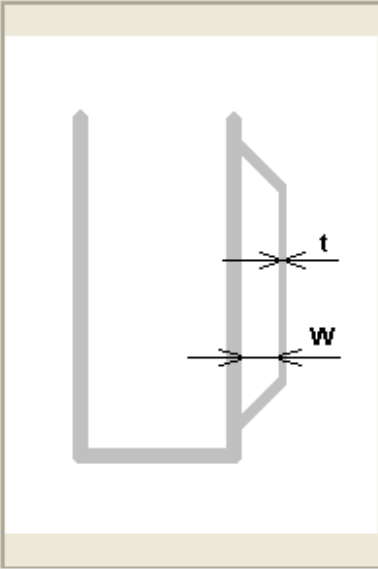
Tank mass(タンク重量) = 0

Tips: タンク重量に 0 を指定すると、プログラムが入力された情報から自動で与えます。しかしながら、単純化された構造で計算されるため、実際の値を入力した方が精度はよくなります。

次に、ジャケット内の仕様を指定します。

CONVENTIONAL JACKET. SPECIFIC CHARACTERISTICS.

Heat-transfer enhancing device	<input type="text" value="absent"/>	Lower section	
Diameter of nozzle	<input type="text"/> mm	Width, W	<input type="text" value="50"/> mm
Spiral channel height	<input type="text"/> mm	Wall thickness, t	<input type="text" value="6"/> mm
Leakage, %	<input type="text"/>	Number of inlets	<input type="text"/>
		Number of nozzles	<input type="text"/>
		Upper section	
		Width, W	<input type="text"/> mm
		Wall thickness, t	<input type="text"/> mm
		Number of inlets	<input type="text"/>
		Number of nozzles	<input type="text"/>



Heat transfer enhancing device = absent

Width(ジャケット流路幅) = 50 [mm], Wall thickness(ジャケット壁厚み) = 6 [mm]



次に、熱媒/冷媒の仕様を指定します。

HEATING / COOLING LIQUID AGENT IN JACKET.

Heating/cooling agent: Water

Inlet temperature: 20 -C

Flow rate of heat transfer agent in lower jacket: 2.5 cub.m/h

Flow rate of heat transfer agent in upper jacket: cub.m/s

OK Cancel Print Help

Operating temperature range: 5 - 204-C [41 - 400-F]  
 Properties of the agent  
 density...1000 kg/m<sup>3</sup> [62.4 lbm/ft<sup>3</sup>]  
 specific heat...4190 J/(kg\*K) [1.01 Btu/(lbm\*F)]  
 thermal conductivity...0.603 W/m\*K [0.348 (Btu\*ft)/(h\*ft<sup>2</sup>\*F)]  
 dynamic viscosity at 100-C(212-F)...0.000284 Pa\*sec [0.284 cP]

Heating/Cooling agent(熱媒/冷媒の種類) = Water

Inlet temperature(流入温度) = 20 [°C]

Flow rate of heat transfer agent(流量) = 2.5 [m<sup>3</sup>/h]

Tips: プロセスの温度が指定された伝熱媒体の一般的な適用範囲から外れた場合、プログラムは警告を表示します。

処理流体の熱物性を指定します。

HEAT TRANSFER PROPERTIES OF THE MEDIA

Media:

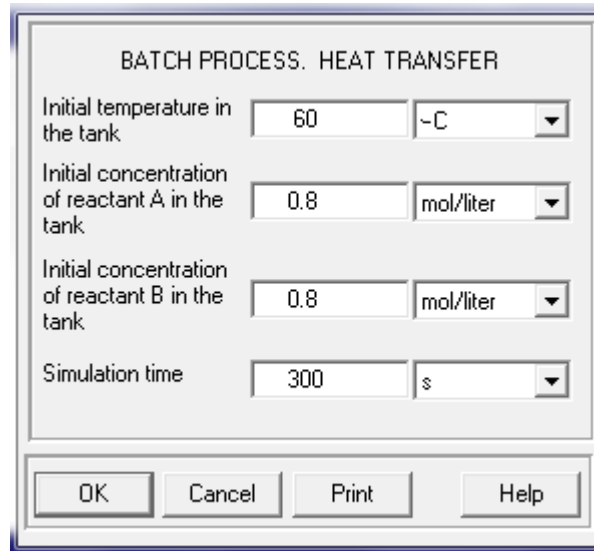
PARAMETER	TEMPERATURE
Average density	20 °C
Dynamic viscosity	20 °C
Specific heat	20 °C
Heat conductivity	20 °C

Buttons: OK, Cancel, Print, Help

Media(溶液の分類) = Water solution  
 Average density(平均密度) = 1050 [kg/m<sup>3</sup>]  
 Dynamic viscosity(粘度) = 2 [cP]  
 Specific heat(比熱) = 4000 [J/(kg·K)]  
 Heat conductivity(熱伝導度) = 0.6 [W/(m·K)]  
 各 Parameterの Temperature = 20 [°C]

Tips: プログラム内部の相関式によって物性の温度変化が考慮されます。  
 使用される相関式は Mediaにより異なります。

最後にバッチ反応器の条件を指定します。



BATCH PROCESS. HEAT TRANSFER

Initial temperature in the tank: 60 °C

Initial concentration of reactant A in the tank: 0.8 mol/liter

Initial concentration of reactant B in the tank: 0.8 mol/liter

Simulation time: 300 s

Buttons: OK, Cancel, Print, Help

Initial temperature in the tank (槽内初期温度) = 60 [°C]

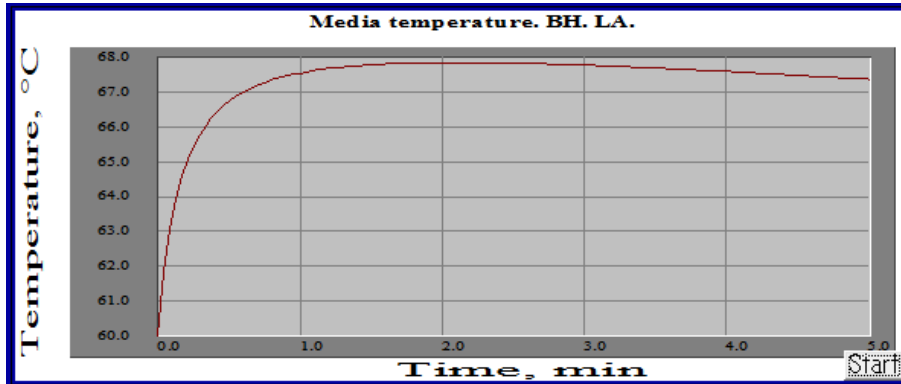
Initial concentration of reactant A in the tank (槽内の反応物Aの初期濃度) = 0.8 [mol/l]

Initial concentration of reactant B in the tank (槽内の反応物Bの初期濃度) = 0.8 [mol/l]

Simulation time (シミュレーション時間) = 300 [s]

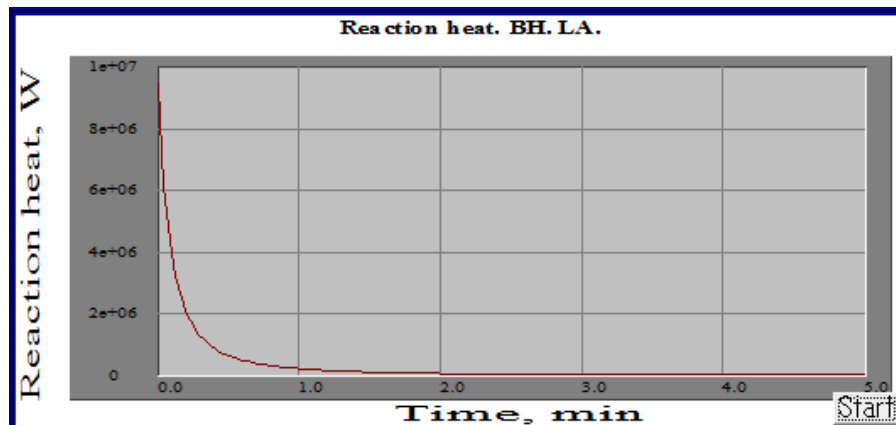
## 10-3. 伝熱計算の結果 (バッチ反応器)

- Media Temperature (処理流体の温度の時間変化)

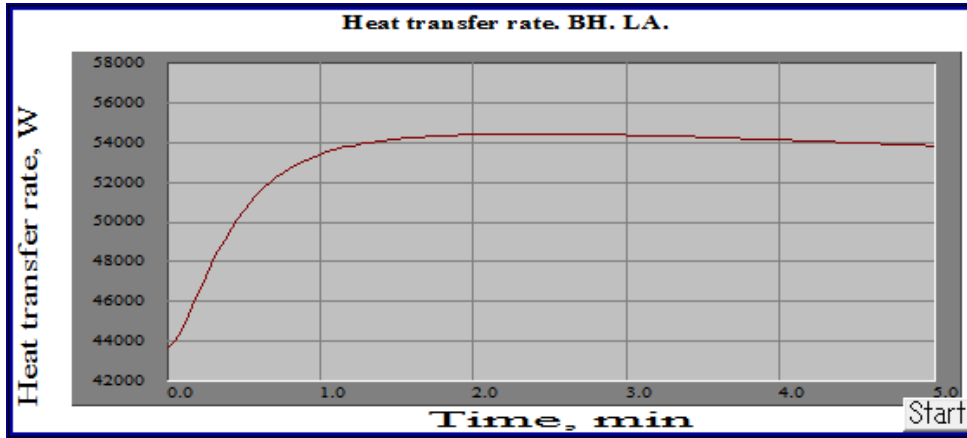


\* 計算された温度が指定の温度範囲を超える場合警告が表示されます。

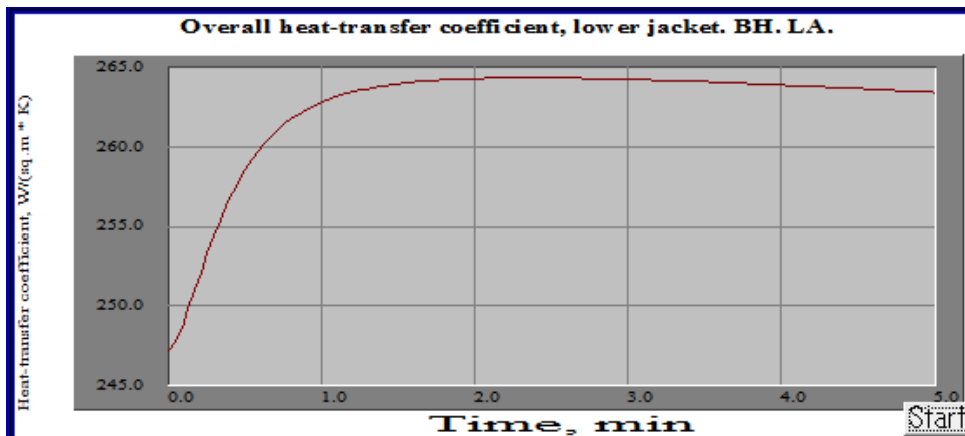
- Reaction heat (反応熱)



- Heat transfer rate (熱移動量の時間変化)



- Overall heat transfer coefficient (総括伝熱係数の時間変化)



## 10-4. セミバッチ反応器の伝熱計算

メニュー Calculate > Heat transfer. Semibatch (SB) > Liquid agent (LA) > の項目のいずれかを選択すると、セミバッチ式攪拌槽の伝熱計算に必要な指定のダイアログが表示されます。

SEMIBATCH PROCESS. HEAT TRANSFER SPECIFIC DATA.					
Initial temperature in the tank	60	°C	Final volume of media	2461	l
Temperature of inlet flow	40	°C	Duration of reactants inlet	1	min
Initial concentration of reactant A in the tank	0.8	mol/liter	Density of inlet flow	1050	kg/cub.m
Initial concentration of reactant B in the tank	0	mol/liter	Specific heat of inlet flow	4000	J/(kg°K)
Concentration of reactant A in the inlet flow	0	mol/liter	Heat release (consumption) for a batch		J
Concentration of reactant B in the inlet flow	1968	mol/liter	Simulation time	300	s

Initial temperature in the tank = 60 [°C]  
(槽内初期温度)

Temperature of inlet flow (流入温度) = 40 [°C]

Initial concentration of reactant A in the tank  
(槽内の反応物Aの初期濃度) = 0.8 [mol/l]

Initial concentration of reactant B in the tank  
(槽内の反応物Bの初期濃度) = 0 [mol/l]

Concentration of reactant A in the inlet flow  
(流入中の反応物Aの濃度) = 0 [mol/l]

Concentration of reactant B in the inlet flow  
(流入中の反応物Bの濃度) = 1968 [mol/l]

Final volume of media (最終的な処理流体体積) = 2461 [l]

Duration of reactants inlet (反応物の供給時間) = 1 [min]

Density of inlet flow (流入物の密度) = 1050 [kg/m<sup>3</sup>]

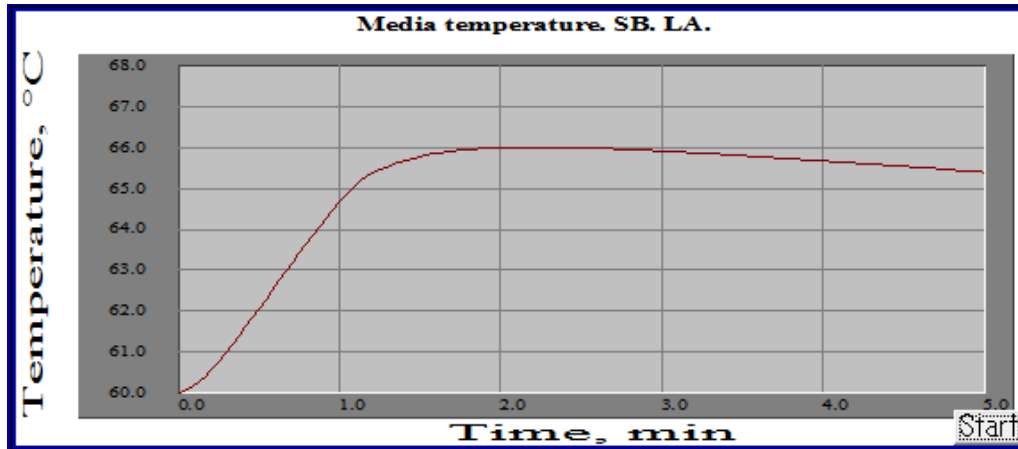
Specific heat of inlet flow (流入物の比熱) = 4000 [J/(kg·K)]

Simulation time (シミュレーション時間) = 300 [s]

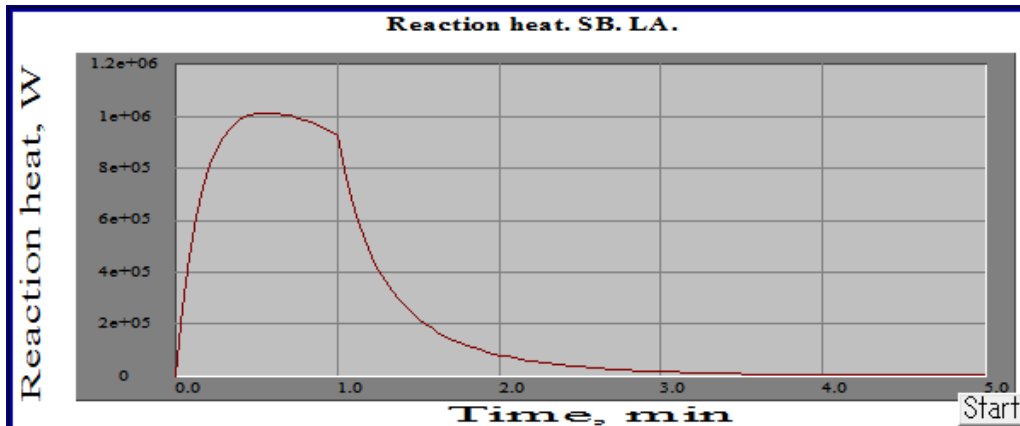
Tips:

流入流量 = (最終的な液体積 - 液体積) / 供給時間 [m<sup>3</sup>/s]

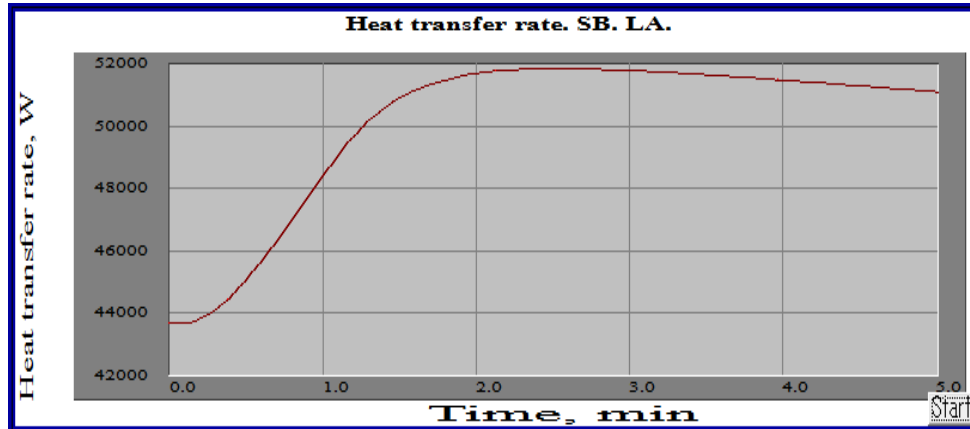
- Media Temperature (処理流体の温度の時間変化)



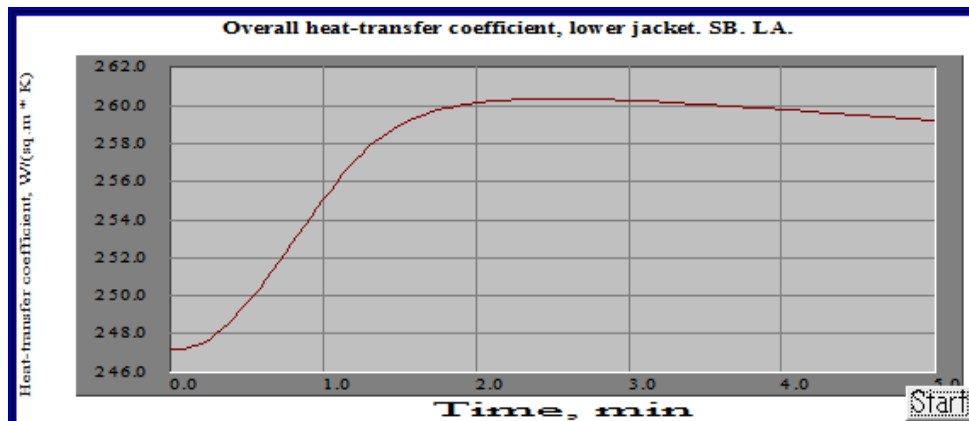
- Reaction heat (反応熱)



- Heat transfer rate (熱移動量の時間変化)



- Overall heat transfer coefficient (総括伝熱係数の時間変化)





一般的に、以下のような無次元数が指標として、スケールアップ時に用いられます。これらの無次元数は検討において有効となりますが、回転数や物性といった全般的な値によって定められており、局所的な要素が考慮から省かれることに注意してください。

- **幾何学的相似条件**

フローパターンを決定します。

- **Pv 値 (  $Pv = P / V$  ) = 一定**

装置に求められる諸特性(分散, 物質移動, 熱移動など)は Pv 値によって特徴づけられます。

- **Fr 数 (  $n^2d / g$  ) = 一定**

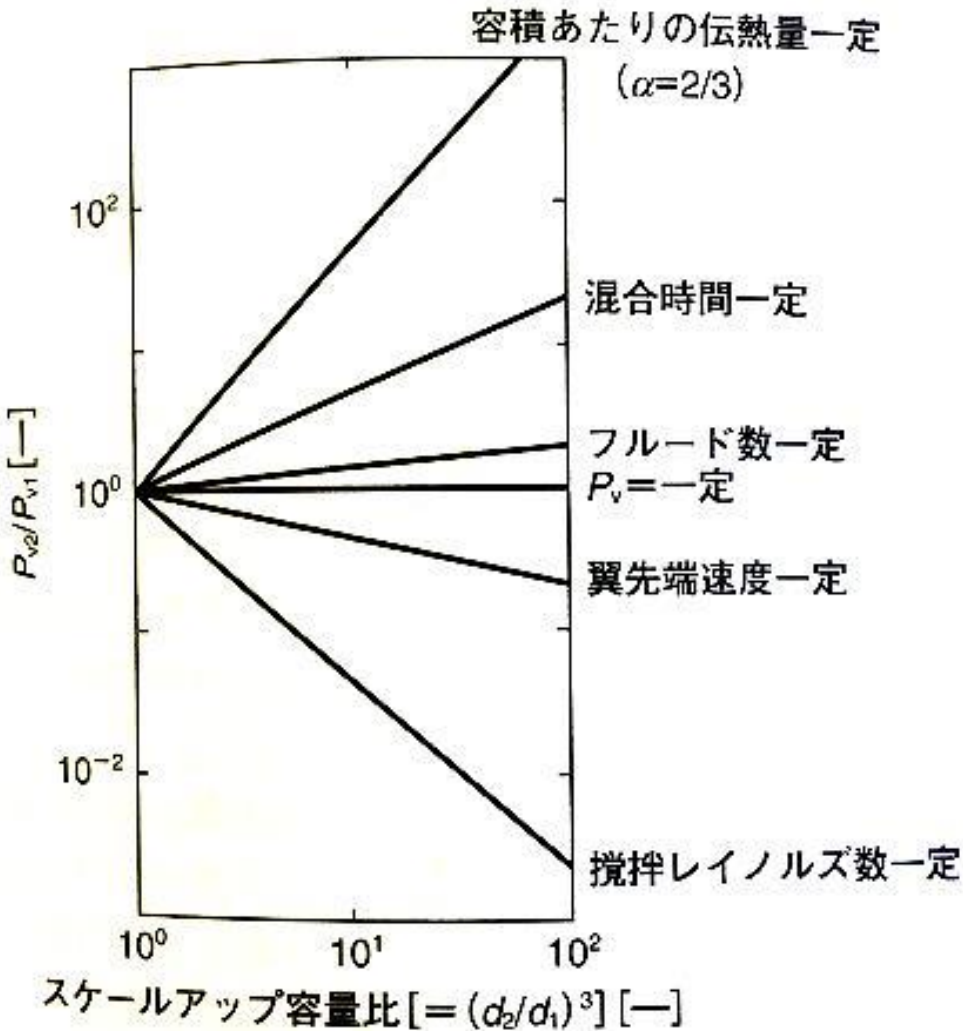
ボルテクス形状、固体粒子、分散媒の巻き込みを特徴づけます。

- **We 数 (  $n^2d^3\rho / \sigma$  ) = 一定**

気泡, 液滴, 分散液滴の形状を特徴づけます。

- **Qv 値(平均循環回数) = 一定**

混合時間が一定でのスケールアップです。 \* 回転数一定のスケールアップとなり、動力的に現実的ではない



左図は、幾何学的相似の攪拌槽における  $P_v$  値とスケールアップ容量比の関係です。

## 例：VisiMix による固液混合操作に対するスケールアップ評価

Characteristic/Reactor	RC-1	R4504-1	R4504-3
Maximum useful volume, L	2	15	15
Operational volume, L	0.6	10	10
Stirrer speed, rpm	500	285	285
Reynolds	13700	70300	56400
Energy distribution average, W/kg	1.18	1.83	2.5
Energy distribution in bulk volume, W/kg	0.623	0.72	0.90
Micro mixing time, s	1.53	2.71	2.27
Complete Suspension Expected	YES	YES	YES
Maximum degree of non-uniformity Axial, %	1.74	2.77	1.52
Maximum degree of non-uniformity Radial, %	0.77	12.9	0.63
Maximum energy of collisions, J	4.4E-9	7.7E-9	1.17E-8
Characteristic time between two strong collisions, J	5.05	4.5	5

装置の目的により、着目すべきパラメータは異なります。

例えば、左の結果はある晶析プロセスの検討例ですが、R4504-1 では望む品質（粒径）が達成できていませんでした。

これは粒子の衝突エネルギーが試験機（RC-1）よりもずっと小さく、二次核成長が促されたためでした。

シミュレーションを基に改善した R4504-3 では必要な品質を達成することができました。

VisiMix では前ページで示した条件はもちろんのこと、プロセスの詳細な特性を確認できますので、装置の目的に合わせたスケールアップの評価が可能です。