

平成 30 年 6 月 10 日現在

機関番号：17102

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2016～2017

課題番号：16H07032

研究課題名(和文)流動層内メソスコピック反応解析モデルの構築

研究課題名(英文)Mesoscopic reaction analysis model for fluidized bed

研究代表者

昆 竜矢 (Kon, Tatsuya)

九州大学・鉄鋼リサーチセンター・特任助教

研究者番号：00780199

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では二酸化炭素吸着などに用いられる流動層を対象に流動層内メソスコピック反応解析モデルの構築を行った。解析モデルの構成は、粉体の挙動については粒子ごとに離散要素法(DEM)を用いて粒子ごとの運動および反応の解析を行う。気体の運動については、Euler座標系のSMAC法を用いる。これらを組み合わせた、DEM-CFDモデルによりミクロスケールである粉体の運動および反応とマクロスケールでの気体の運動および反応を解析することができる。本モデルにより、反応プロセスの効率化が期待でき、循環型社会の構築に貢献できる。

研究成果の概要(英文)：In this study the Mesoscopic reaction analysis model for the fluidized bed was constructed. The fluidized bed is used for many processes, e.g. chemical synthesis, waste treating and carbon dioxide adsorption. This model analyzes each powders motion and chemical reactions using Discrete Element Method (DEM). For analysis of gas behaviors, SMAC method is used. The DEM-CFD model can analyze the micro-scale behavior of powders and the macro-scale gaseous behavior in fluidized bed. By this model, the efficiency of the reaction process is expected to be improved and it contributes to construction of the sustainable society.

研究分野：金属プロセス工学

キーワード：反応・分離工学 流動層 DEM-CFDモデル CO2吸着

1. 研究開始当初の背景

日本国内のエネルギー需給を取りまく環境は、2011年の東日本大震災以降大きく変化し、未だ明確な指針が定まっていない。図1に、一次エネルギー国内供給の推移を示す。震災以前電力供給の約10%を占めていた原子力発電所での発電が未だ制限された状態であり、不足した電力供給の補填は大部分が化石エネルギーを利用する火力発電によって行われており、日本国内の一次エネルギー供給の8割以上を化石エネルギーが占めている¹⁾。

火力発電では二酸化炭素をはじめとする廃棄物の発生は避けられず、これら廃棄物を無害化もしくは再利用することが循環型社会の構築には不可欠である。また、エネルギー供給だけでなくエネルギー利用の面でも、経済活動において消費されるエネルギーの効率化も循環型社会には求められる。

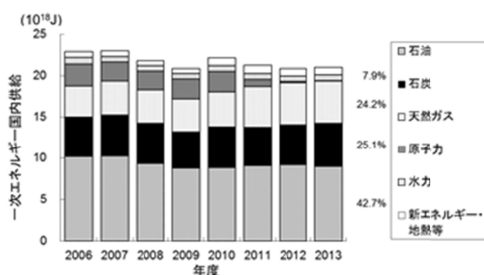


図1 一次エネルギー国内供給の推移¹⁾

2. 研究の目的

本研究では、排ガスの処理や反応プロセスに用いられる流動層を対象とした数値解析モデルの構築を行い、幅広いプロセスを対象に流動層内反応の解明を目標とする。特に、流動層を用いたCO₂吸着および分離を対象とし実験および数値解析モデルの構築を行う。流動層の模式図を図2に示す。流動層は容器内に粉体を充填し、下部より気体を吹き込むことで、粉体を攪拌し粉体と気体間で、加熱、吸着または化学反応などを行う反応装置である。本研究では、流動層の実験による基礎データの拡充と反応解析モデルの構築および精度検証に取り組む。

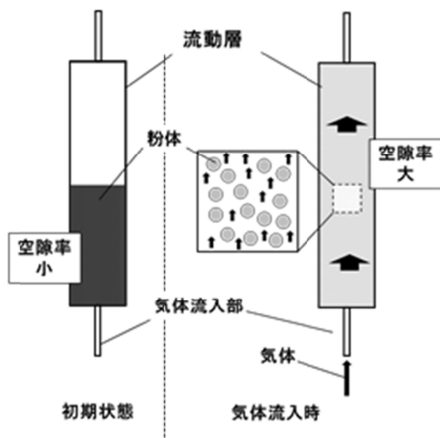


図2 流動層模式図

3. 研究の方法

本研究の内容は大きく、流動層の観察実験による基礎データの拡充と、反応解析モデルの構築および精度検証の2つに分けられる。基礎データの拡充は主に、流動層の流動の観察や吸着剤の吸着に伴う温度変化を実験により測定を行う。この結果から、シミュレーションで用いる物性値をはじめとしたデータの測定と、シミュレーションの解析結果と比較による精度検証に用いる。本研究で対象とする吸着に用いられるゼオライトなどの多孔質体の内部でのCO₂拡散速度および吸着様式について実験で観察を行う。反応解析モデルの構築および精度検証は、実験結果との比較検討と並行して行う。モデルの構成は、固体の挙動については粒子ごとに離散要素法 (Discrete Element Method, DEM) を用いて粒子ごとの運動および反応の解析を行う。気体の運動については、Euler座標系のCFDを用いて数値計算を行う。これらの計算手法を組み合わせることで、ミクロスケールである粉体の運動および反応とマクロスケールでの気体の運動および反応を解析することができる。本研究で数値解析モデルは気体固体間での運動量の交換、熱量の交換および物質移動に着目する。これらの要素の相互作用に基づき、粒子それぞれについて、吸着挙動の数値解析を行う。本モデルの計算領域はラボスケールを想定する。

4. 研究成果

4.1. モデルの構成

図3に計算のフローチャートを示す。本モデルは気相の運動についてはSMAC法を、固体側についてはDEMを用いて計算する。相互作用については、SMACで用いる計算格子内に存在する粒子に平均的に計算を行う。

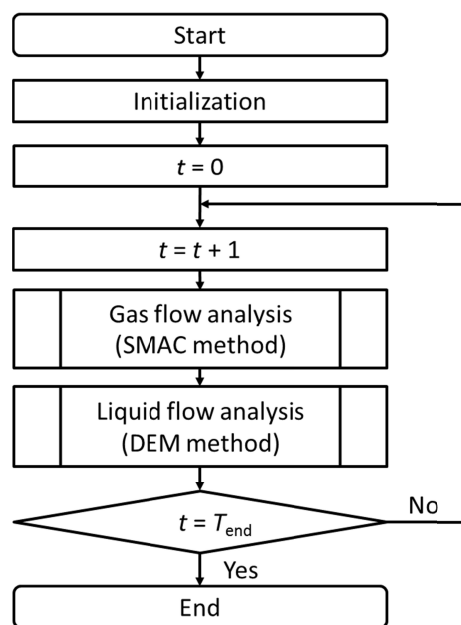


図3 フローチャート

4.2. 流動化速度の検証

流動層の固気間の運動量交換は、空間に存在する固体の割合により、その力の大きさを決定した。具体的には、空隙率が高い場合には Wen and Yu の式を、低い場合には Ergun 式を用いて、固気間の相互作用を決定した。流速を変えて計算を行った場合、固体の運動の様子を図4に示す。0.1m/sでは流動が確認できず、それ以上の流速では粉体が流動する様子が確認された。粉体が流動し始める最小流動化速度 u_{mf} を白井の式(1)

$$u_{mf} = \frac{1.64d_p^{0.929} \rho_s^{0.043}}{\rho_f^{0.357} \mu_f^{0.286}} \quad \dots\dots(1)$$

および、van Heerden の式(2)

$$u_{mf} = \frac{7.306 \times 10^{-4} (\rho_s - \rho_f) g d_p^2}{\mu_f} \quad \dots\dots(2)$$

との比較をおこなった。ここで d_p , ρ_s , ρ_f , g および μ_f は、それぞれ粒子直径[m], 粉体の密度[kg/m³], 流体の密度[kg/m³], 重力加速度[m²/s], 流体の粘度[Pa・s]である。計算結果を図5に示す。式(1)と式(2)で流速に対する傾向がやや異なるが、本計算結果は両式に近い最小流動化速度を示した。

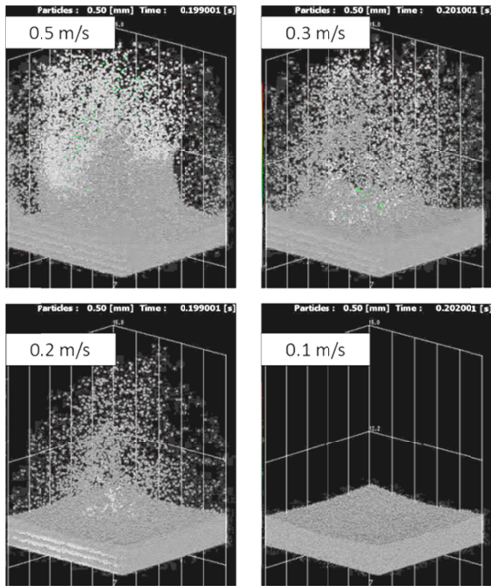


図4 流速が粉体の流動化に与える影響

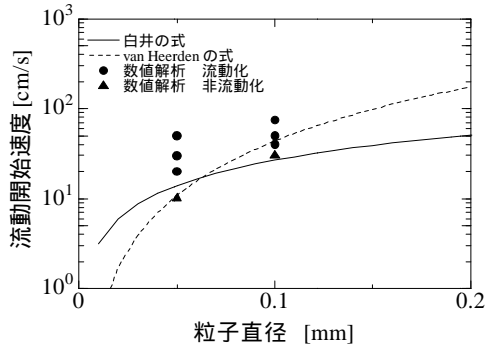


図5 流動開始速度について実験式と数値解析の比較

4.3. 吸着熱と気液間の熱交換

本モデルでは基礎的な検討のため、ゼオライト吸着については CO₂ の吸着のみを考慮した。吸着量に関しては、粒子周辺のガス組成より CO₂ の分圧を算出し、等温吸着線より吸着最大量を決定した。各タイムステップでの吸着量は以下の式(3), (4)で与えられる。

$$n_{ad,i}^* = \alpha(n_{ad,max,i} - n_{ad,i})dt \quad \dots\dots(3)$$

$$n_{ad,i}' = n_{CO_2} \frac{n_{ad,i}^*}{\sum_{n=1}^{n_{p,cell}} n_{ad,i}^*} \quad \dots\dots(4)$$

ここで、 n_{ad}^* , n_{ad}' , α , $n_{ad,max}$, n_{ad} , dt , V_{CO_2} はそれぞれ、仮の吸着量[mol]、吸着量[mol]、吸着係数[1/s]、セルのガス組成での最大吸着量[mol]、既吸着量[mol]、タイムステップ[s], セルの CO₂ 量[mol]である。

気液間の熱交換については Ranz-Marshall の式を用いた。

図6に固定層の条件での粒子温度分布と吸着量分布を示す。

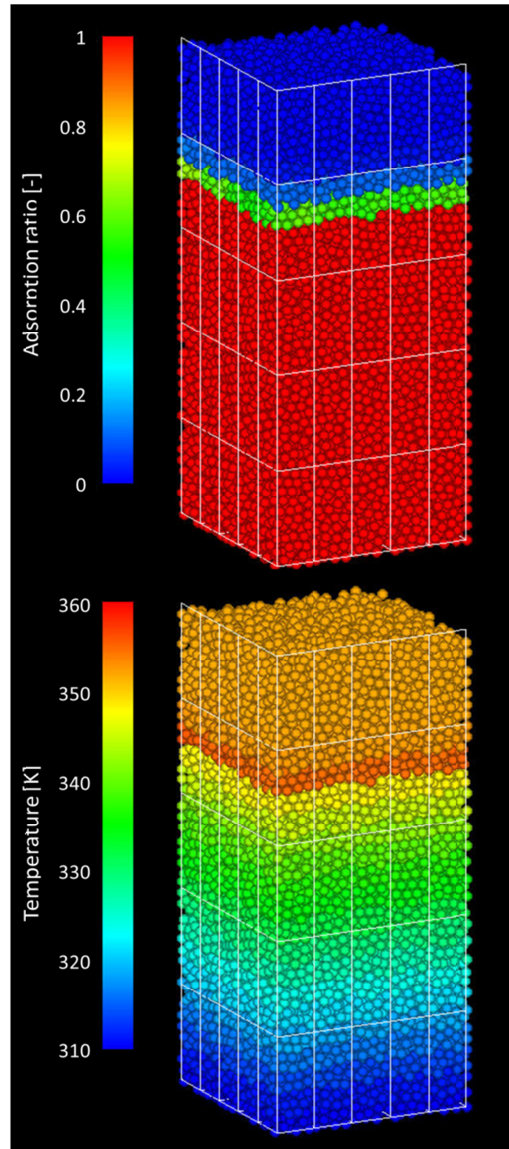


図6 吸着時の層内吸着量分布および温度分布

層下部より段階的に吸着が進行していることが確認できる。吸着が発生している部分（図 6 上 緑の位置）が最も温度が大きく、層下部では流入ガスにより粒子が冷却され温度が低く、上部では粒子により加熱されたガスにより、吸着が進行していない部位においても粒子の温度の上昇が確認できる。これは、固定層実験での層内温度変化の傾向と一意している。

引用文献

- 1) 経済産業省エネルギー庁, エネルギー白書 2015 pdf 版, 第 1 章 1 節, p. 109, 2015.
(http://www.enecho.meti.go.jp/about/whitepaper/2015pdf/whitepaper2015pdf_2_1.pdf, 閲覧日 2016.4.12.)
- 2) 白井 隆:流動 1 韓(1960)p .76 , 科学技術社。
- 3) Van Heerden, D., Nobel, A. P . P. and van Krevelen, D. W. : Che. Eng. Sci. 1(1951) p. 37 .

5 . 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 0 件)

〔学会発表〕(計 1 件)

1 . 昆竜矢、松浦諒、斉間等 ”炭酸ガス P S A システムにおける移動現象に関する基礎検討“、第 26 回日本エネルギー学会大会

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

6 . 研究組織

(1)研究代表者

昆竜矢 (Tatsuya Kon) 九州大学・鉄鋼リサーチセンター・特任助教

研究者番号 : 00780199