

流動層オゾン分解

本資料は、オゾンガスの酸素への転換に関する紹介である。転換のための分解反応は流動層で起こり、そこでは各種の粒子が触媒として作用する。この複雑な過程を FLUENT の反応流とオイラー・グラニュラー混相流モデルを用いて転換率を予測し、その結果、実測値と良い一致を得た。

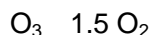
触媒反応を伴う流動層が化学工業の分野で使用されている。流動層での転換とは、流動層を通過する物質が他の物質に転換する過程を示す。転換設備の最適化設計には、流体力学と化学反応に関する両方の知識が必要とされている。本解析では、オゾンが円筒状の流動層を通過する際の流れの予測にオイラー・グラニュラーモデル (EGM) を用い、オゾン分解の予測には特別な反応モデルを用いた。

本解析では、2次元軸対称触媒反応を有する流動層をモデル化した。流動層形状は、直径0.23m、高さ0.25m、静止状態での層高さ0.12mで、直径117 μm の触媒用粒子を含んでいる。メッシュ数は約8000セルである。本モデルでは、オゾンと酸素の2種類の気体を使用する。まず、オゾンガスは流動層底部の注入口から注入する。流動層内では、注入したオゾンガスは流動層を盛り上げ、粒子を分離し、ガスと粒子表面間の接触を促す。オゾンと酸素の混合物は、カラムの上

部表面から排出される。

オゾンの分解は、触媒として酸化鉄を浸潤させた砂粒子を利用する。酸化鉄により、オゾン分子(O_3)は酸素原子を放出し、酸素分子(O_2)に転換する。

分解反応式は、



で示され、分解速度Kは、

$$K=1.57a [\text{O}_3]$$

で示される。

ここで、aは触媒の体積分率であり、 $[\text{O}_3]$ はオゾン濃度を示す。次に、ユーザー定義サブルーチンを使用して、分解反応(流動層内の領域に限定)を計算した。注入ガスは4~14cm/秒の流速範囲で計算した。装置の概略図を図1に示す。

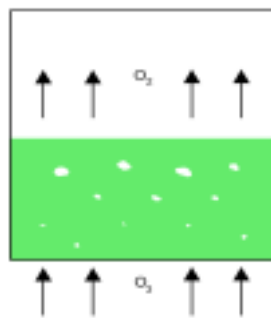


図1 オゾン分解系の概念図

オゾン(O_3)は底部から一定の流速で流動層に流入し、流動層を通過する際、触媒反応を起こし酸素(O_2)に転換される。

図2は、注入開始0.5秒後の流動層における気体の体積分率を示す。流れ場は気相の反応の有無にかかわらず同じであった。気泡は流動層底部付近で形成されたのち、上方向に移動する。気泡の形や大きさはメッシュに依存する。メッシュが粗い場合、気泡数は少なく丸い形状をしめす。一方、細かいメッシュの場合、気泡は高密度で、一層不規則になる。気泡数は転換に大きな影響を与える。気泡数増加すると転換率は上がる。

図3は、注入開始1.0秒後における気体の体積分率を示す。気泡の接近によって流動層上部表面がどのように盛り上がるかが示されている。一方、大きな気泡が浮き出すと、流動層自体は(青と緑の影として示したように)程度の差はあるが、小さな気泡で満たされるようになる。このように気泡で満たされた流動層

は、流れ観点から転換が起きる最適な状態にある。

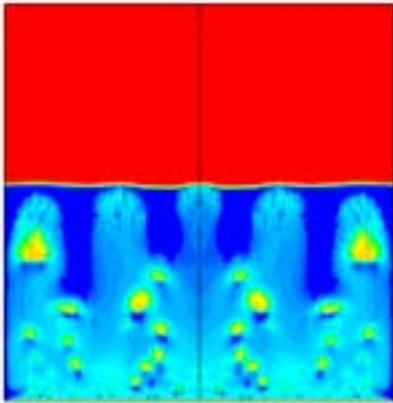


図2 ガス吹込み 0.5 秒後の流動層

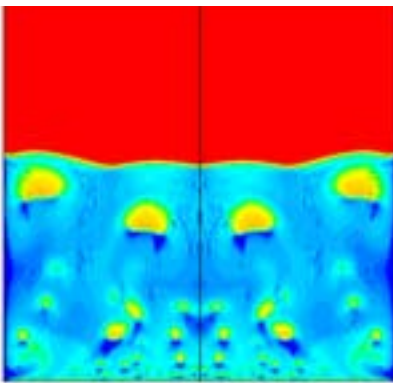


図3 ガス吹込み 1.0 秒後の流動層

図4は、気体速度の関数としての転換曲線(ピンク)とガスホールドアップを示す。ガスホールドアップは流動層の全容積に対する気体量の比として定義される。その曲線は、ある飽和点まではガス流速の増加に伴いガスホールドアップも高くなる。これは、低い界面の部分では、ガス速度により流動層を盛り上げようとする力がかかるからである。ガスが飽和点に達すると、流動層はもはや盛り上がることも、さらにガスを保持することもできなくなる。

転換曲線は、オゾンの注入濃度

C_{in} に対する排出濃度 C_{out} の比、 C_{out}/C_{in} 、の値として示される。その結果は、Fryer ら(1976)の実験値とよく一致している。ガス濃度が低い場合、粒子とオゾンの接触時間が増加すると滞留時間は長くなる。転換率が高くなると、 C_{out}/C_{in} の濃度比は小さくなる。ガス流速が大きい場合は滞留時間が減少し転換率も一定値まで減少する。

本事例では、FLUENT の反応と混相流の連成機能を用いて、流動層の触媒オゾン分解のシミュレーションを行った。流動層領域で起こる気相中の反応を非定常計算で求めた結果、転換率は実験値とよく一致した。

本技術は、最適な注入オゾン流量の決定やアスペクト比変更・バッフル/内挿物の追加といった設計改善にも活用することができる。実験モデルの規模でのシミュレーションの検証結果は、実機スケールアップでのベースとなる。

参考文献

Fryer, C., and Potter, O.E., AIChE J., 22, 38-47 (1976).

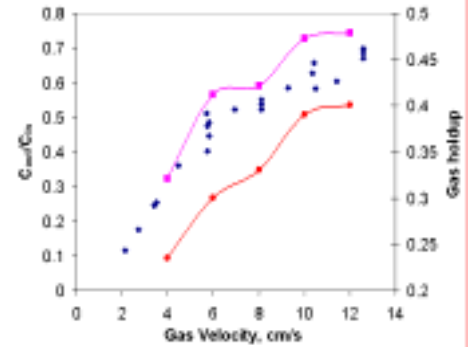


図4 気体流速と C_{out}/C_{in} (ピンク) およびガスホールドアップ(赤)