

## (34) 非等温固定層による非触媒反応操作のシミュレーション

東北大学選鉱製錬研究所 工博○八木順一郎 高橋礼二郎

工博大森康男

**I 緒言**: 非等温固定層の研究には従来反応速度が単純化された形で使用されており、層内温度分布の推算は十分であるとはいえない。<sup>1), 2)</sup> ここでは、固定層による酸化鉄ペレットの水素還元反応の解析において、反応速度の表現の精度を高め、反応熱の温度依存性、炉壁からの熱損失を考慮した数式モデルを立て、非等温固定層のシミュレーションを行なった。

**II 基礎式**: 固定層内で空間率は一定で、ガスはピストン流れであると仮定し、半径方向にはガス、粒子ともに温度、組成が均一であるとして、熱および物質収支を行なう。

$$\frac{\partial \chi}{\partial \tau} + \frac{\partial \chi}{\partial \eta} = -R(f, \theta_s) \chi \quad (1) \quad \frac{\partial f}{\partial \tau} = \psi R(f, \theta_s) \chi \quad (2)$$

$$\frac{\partial \theta_g}{\partial \tau} + \frac{\partial \theta_g}{\partial \eta} = [\lambda_g \{T_i \theta_s / T_0 - \theta_g\} + W(\theta_f - \theta_g) - \nu_g C \theta_g \chi R(f, \theta_s)] / P(C + \theta_g \partial C / \partial \theta_g) \quad (3)$$

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} = [-\lambda_s \{\theta_s - T_0 \theta_g / T_i\} + (H - \nu_s \Delta \rho_s C_s \theta_s) \chi R(f, \theta_s)] / P_s (C_s + \theta_s \partial C_s / \partial \theta_s) \quad (4)$$

$$R(f, \theta_s) = 1 / [1/a + \xi^* \{(1-f) - 1/3 - 1\} / \beta \xi \theta_s^{1.78} + (1-f)^{-2/3} \exp \{-E(1/\theta_s - 1) / RT_i\} \\ / \delta [1 + \exp \{c_5(1/\theta_s - 1) / RT_i\}] / K^\circ] \quad (5)$$

初期条件:  $\tau \leq 0$  で  $\chi = 0$ ,  $f = 0$ ,  $\theta_s = 1$ ; 境界条件:  $\eta = 0$  で  $\chi = 1$ ,  $\theta_g = 1$

ここで,  $\eta = z/L$ ,  $\tau = ut/L$ ,  $\chi = (c - C^*) / (c_0 - c_0^*)$ ,  $\theta_g = T_g / T_0$ ,  $\theta_s = T_s / T_i$ ,  $\theta_f = T_f / T_0$ ,  $a = 3(1-\epsilon)Lk_f/u_0r_0$

$\beta = 3(1-\epsilon)L D_s^* / r_0^2 u_0$ ,  $\delta = 3(1-\epsilon)Lk^* / r_0 u_0$ ,  $\psi = 3(c - c^*)a M_A / (1-\epsilon)\rho_s A$ ,  $\lambda_g = 6(1-\epsilon)Lh_p/d_p u_0 c_g^* \rho^*$

$\lambda_s = 6L\epsilon h_p / d_p u_0 \rho_s A C_s^*$ ,  $\nu_g = (M_D - M_B) (c - c_0^*) / \rho^*$ ,  $\nu_s = a\epsilon M_A (c_0 - c^*) / \rho_s A (1-\epsilon)$ ,  $H = \epsilon(-\Delta H_f)$

$(c_0 - c_0^*) / (1-\epsilon) T_i \rho_s A C_s^*$ ,  $W = 4LD / u_0 c_g^* \rho^* D_T$ ,  $C = c_g / c_g^*$ ,  $C_s = c_s / c_s^*$ ,  $P = \rho / \rho^*$ ,  $P_s = \rho_s / \rho_s^*$ ,  $\Delta \rho = (\rho_{sc} - \rho_{sA}) / \rho_{sA}$

このモデル中、酸化鉄ペレットの水素還元反応速度は未反応核モデルで表わし、速度パラメータ<sup>3)</sup>は前報の値を使用した。

**III 結果**: 上記モデルを特性曲線法を使って数値積分し、固定層内の反応率、ガス濃度、ガスと粒子の温度の経時変化を求めた。図1には還元率の経時変化を示した。層高が15cm程度でも等温での計算結果と比較してやや相異が現われており、特に層頂では傾向がかなり異っている。図2には層高7.58cmの場合の層内各レベルでの温度の変化を示した。反応初期に温度が低下し、最低点を通過すると急速に回復する傾向がある。層頂では回復速度はおそい。

記号:  $c$ : ガス濃度,  $c_g, c_s$ : 比熱,  $f$ : 還元率,  $k$ : 反応速度定数,  $L$ : 層高,  $M$ : 分子量,  $t$ : 時間,  $h_p$ : 粒子・流体間伝熱係数,  $r_0$ : 粒子半径,  $u$ : 流速,  $T$ : 温度,  $U$ : 管壁の総括伝熱係数,  $z$ : 距離(下ツキ),  $g$ : ガス,  $s$ : 粒子, 上ツキ, ○: 層入口)

文献: 1) 杉山, 馬場: 化工, 29 (1964), 140

2) C.D.Scott: I&ECPDD, 5 (1966), 223

3) 高橋, 八木, 大森: 鉄と鋼, 57 (1971), 1597

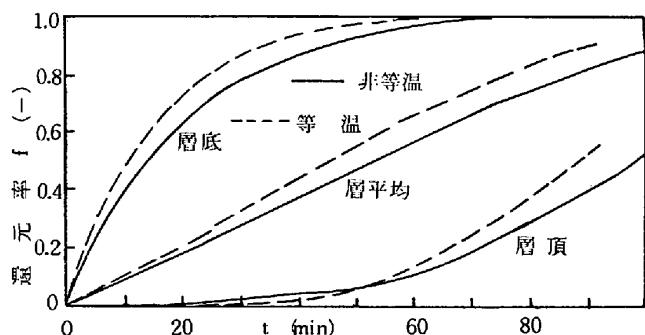


図1 層内各位置における還元率の経時変化

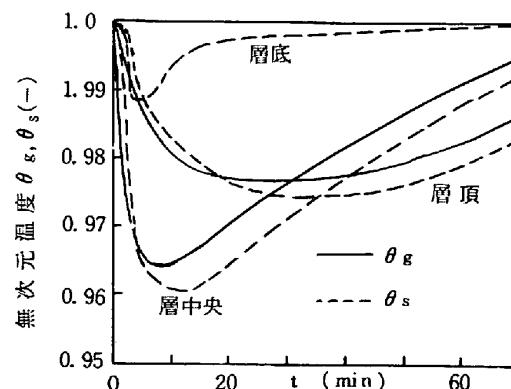


図2 層内各位置での温度の経時変化