

(61) 高圧移動層による酸化鉄ペレットの混合ガス還元  
 数学的モデルによるシミュレーション

東北大学選鉱製鉄研究所 ○ 高橋礼二郎 高橋愛知\*

1 目的: 移動層による酸化鉄ペレットの混合ガス還元反応と副次反応に対して熱と物質の収支を考慮した一次元数式モデルを作成し, シミュレーション計算を行う. 得られた結果を移動層の実験結果と比較し, 数式モデルならびに解析方法の検証を行う.

2. 数式モデルの導出方法: 移動層の数式モデルは微小区間  $\Delta z$  の回りに熱と物質の収支をとる.  $H_2$  と  $CO$  ガス還元は各々独立に起こり, 加成性が成立すると仮定すれば, ガス濃度についての基礎式は (1) 式となる.

$$dY/dz = dY^{(H_2)}/dz + dY^{(CO)}/dz \quad (1)$$

ペレットについても同様で, また, ガスとペレットについても熱収支式を立てる. 酸化鉄ペレット単一球の還元反応は多界面反応モデルによる速度式で, さらに, 水性ガスシフト反応およびメタン生成反応はそれぞれ (2) および (3) 式で表す. いずれの場合も反応熱を考慮する.

$$r_{CO_2} = V_p k_w P^2 (Y_{CO} Y_{H_2O} - Y_{CO_2} Y_{H_2} / K_w) \quad (2), \quad r_{CH_4} = V_p k_M P^4 (Y_{CO} Y_{H_2}^3 - Y_{CH_4} Y_{H_2O} / K_M) \quad (3)$$

炭素析出反応は考慮しない.

3. 計算方法: 計算は層頂から下方に向かって Lunge-Kutta 法により進め, 層頂の境界条件としては層高 175 cm における実測値<sup>(1)</sup>を採用した. 還元反応の速度パラメータはデータフィッティング法で求めた値を使用するが,  $T < 973$  K での  $Fe_3O_4 \rightarrow FeO$  還元段階では段階毎還元法による値を, また, 還元率 ( $R_T$ ) 75% 以上では  $FeO \rightarrow Fe$  還元段階の有効効散係数の値を 1/10 に修正して使用した. (2) および (3) 式の反応速度定数  $k_w, k_M$  および逆反応の  $k_w', k_M'$  は前報<sup>(2)</sup>の値を次のように使用した. すなわち,  $k_w, k_w'$  は  $R_T < 0.5$  では  $FeO$  を,  $R_T > 0.5$  では  $Fe$  を触媒層として求めた値を使用した. 一方,  $k_M, k_M'$  は  $R_T > 0.5$  の場合のみ  $Fe$  を触媒層として求めた値を使用した.

4. 計算結果

Run 12 および Run 16<sup>(3)</sup> における移動層内プロセス変数の分布に関するシミュレーション計算結果を Fig. 1 と 2 に示す. 計算結果と実測値はかなり良く合っている.

文献

1) 高橋(礼)ら: 本講演大会概要集. 2) 石垣ら: 東北大学選研彙報, 38 (1982) 35 3) 実験条件は, 石垣ら: 本講演大会概要集

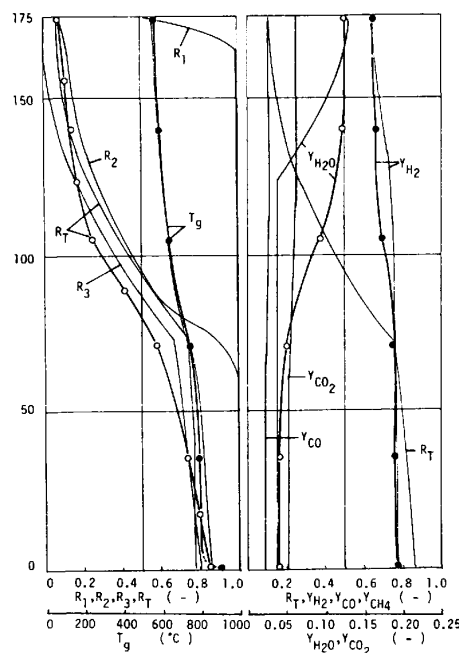


Fig.1 Comparison between observed data and calculated curves for Run 12

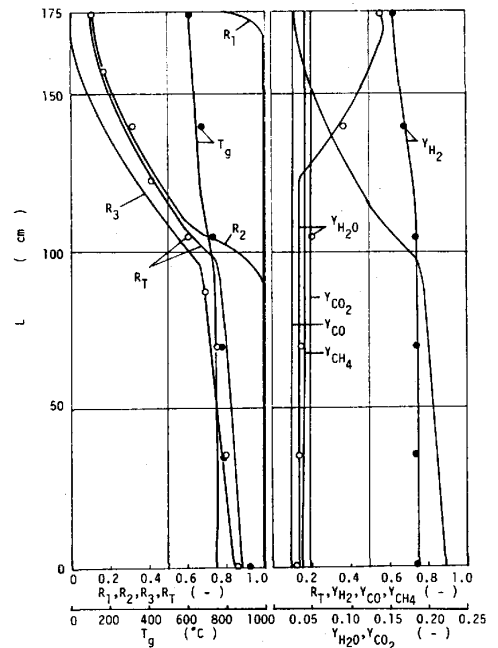


Fig.2 Comparison between observed data and calculated curves for Run 16

\* 現在(株)鉄原