

I124

多管式メンブレンリアクターによるシクロヘキサン脱水素の CFD 解析

(宇都宮大工) ○ (正) 伊藤 直次*・吉田 直樹・(正) 味村 健一・(正) 佐藤 剛史

1. 緒言

本研究では、シクロヘキサンのようなナフテン系有機ヒドライドを用いた水素の貯蔵・輸送システムの確立を目指している。この場合、水素取り出し反応が問題になるが、演者らは脱平衡型のメンブレンリアクターの適用を提案してきている。

パラジウム膜を用いたメンブレンリアクターを用いれば、反応場からの水素の引き抜きによる脱平衡化によって効率的に水素が回収可能となる。注意すべきことは、吸熱反応である脱水素は触媒層の温度に非常に敏感となるために、伝熱が反応進行を左右する可能性が高いということである。

今回は、多管式メンブレンリアクターに対する CFD (computational fluid dynamics) モデルを開発し、異なる伝熱モデルを作成して、実験結果の解析を行った結果について報告する。

2. 反応器モデル

実際の反応器とそれを解析のためにモデル化したものを図-1 に示す。反応器の中心に外径 25.4 mm の熱供給のための内筒が挿入され、外筒と内筒の間の環状部には、0.5 wt% Pt/Al₂O₃ 柱状触媒(3.3mm^φ、3.6mm)が充填され、触媒層には 6 本のパラジウム膜管(外径 3mm、膜厚 5 μm、膜長 100mm)が配置されている。反応器は空気恒温槽に置かれ、循環高温空気によって加熱される。この時の触媒層への伝熱について、**モデルA**: 内筒断熱+外筒部熱抵抗あり、**モデルB**: 内筒・外筒部熱抵抗あり、**モデルC**: 内筒・外筒部熱抵抗を無視の 3 つのモデルを想定して解析を行い比較、検討した。なお、熱抵抗を与えた場合の伝熱係数は 10 [W/m² K] とした。

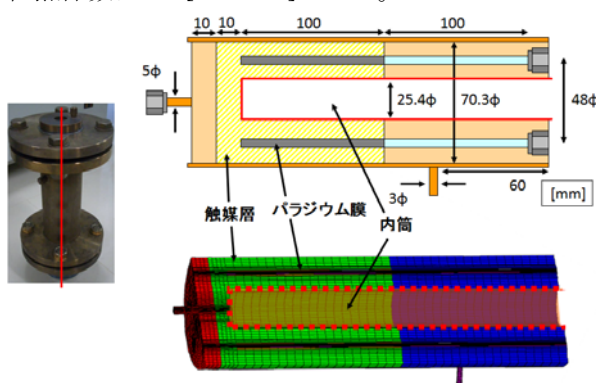


図-1 反応器モデル

3. 数値モデル

数値モデルは、汎用 CFD コード (Star-CD) を用いて開発した。支配方程式として、質量、運動量、エネルギー、化学種保存式を反応側と透過側に考慮した。ユーザーサブルーチンを用いて、下記の反応式と熱および物質移動モデルを組み込んだ。

1) シクロヘキサンの脱水素反応速度モデル

- 2) 膜を通した熱・物質移動
- 3) 反応による熱・物質の生成・消滅
- 4) 触媒層での熱・物質移動モデル

4. 解析結果

本研究で開発したモデルにより多管式メンブレンリアクターの解析を行った結果を実験データと合わせて図-2、図-3 に示す。図-2 より実際の伝熱機構に近いモデル B が実験値とほぼ一致している事が分かる。また、図-3 は解析により可視化された反応器内温度分布であり、内筒から積極的に加熱することにより触媒層の温度低下が抑えられ、それに伴い転化率の低下も抑えられているのが分かる。

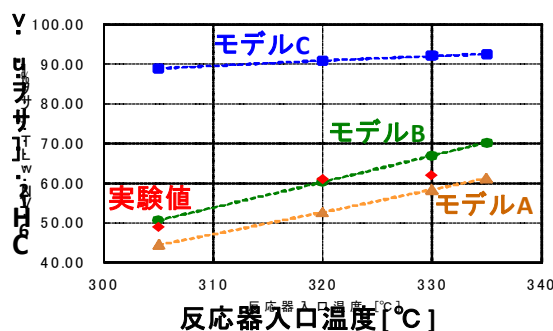


図-2 実験結果とモデル計算の比較

(供給速度:0.014 mol/min, 反応圧:3 bar, 透過側圧力:0.1 bar)

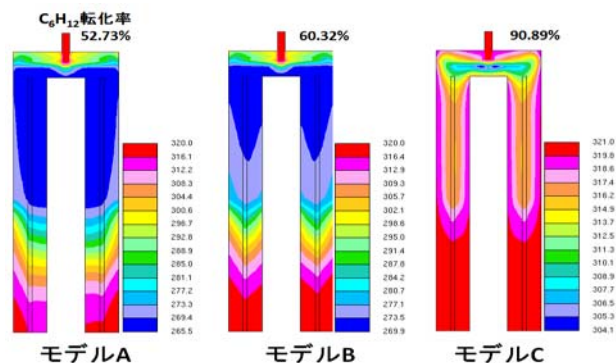


図-3 反応器内温度分布 (320 °C)

5. 結論

多管式パラジウムメンブレンリアクターによるシクロヘキサンの脱水素の解析に CFD モデル適用し、実験データによりモデルの妥当性を検証した。今回使用した熱伝導モデルにより脱水素反応では熱伝導が非常に重要であり、積極的な加熱により反応器の性能向上に繋がることが分かった。また、CFD によるモデル化は、反応器内の温度の分布など内部で起こる現象を可視化することができ、反応解析する上で有力な手段となった。