

GA教員 研究等紹介③



九州大学
先導物質化学研究所 准教授
則永 行庸

高効率炭素資源転換プロセス開発の迅速化

炭素資源の熱化学転換や、次世代の高温材料として期待されているSiC系セラミクス複合材料製造プロセスなどを対象に、化学プロセスに含まれる物理化学現象を再現するような、経験的要素を出来る限り排除したモデルの開発や、シミュレーション技術を駆使した新しいリアクタパフォーマンス予測技術の開発に取り組んでいます。このような技術は、最適な反応条件や反応器形状を決めるための机上検討を可能とします。多くの経験的な研究開発ステップを必要とするリードタイムの長い従来のプロセス開発スキームから脱却し、理想とする化学プロセスの迅速かつ安全な実現を目指しています。

化学プロセスの性能を支配する反応器内の現象、とりわけ化学反応の動力学モデルの構築に執心し、これまでに低級炭化水素熱分解反応に関して、ラジカルを含む200以上の化学種および1,600以上の素反応からなる詳細化学反応速度モデルを構築、主要生成物だけでなく、マイナーな生成物である多環芳香族化合物の濃度をアジャスタブルフリーで高精度に予測することに成功しています。これにより低級炭化水素の熱分解において原料から多環芳香族化合物へと至る反応経路について分子、ラジカル反応レベルで理解、予測できます。構築した速度モデルは、種々の炭化水素熱分解特性予測に適用可能なユニバーサルなモデルとして、炭化水素熱分解を利用する工業プロセスである真空浸炭や炭素・炭素複合材料製造のようなプロセスの設計・開発に活用されています。

加えて、詳細化学反応モデルの超多成分複雑反応系への適用にも取り組んでいます。この様な素反応ベースの速度モデリングは燃焼反応の解析に専ら応用されてきたものですが、炭化水素や芳香族化合物の水蒸気改質反応といった、燃焼とは異なる反応系に対しても極めて高い精度で適用可能であることを示しました。このような成果を踏まえ、製鉄用コークス製造時に副生する多成分混合ガスの部分酸化改質による水素製造プロセスや、バイオマス熱化学転換、石炭ガス化等に関する産学プロジェクトに参画し、多くの化学種の反応を網羅する大規模な詳細化学反応速度モデルを構築し、転換特性の予測に活用しています。現在、速度モデルと高度流体解析技術のカップリングにも挑み(図1)、反応特性をさらに高精度に予測できる数値解析基盤を構築し、プロセス実証、工業化を支援しています(図2)。

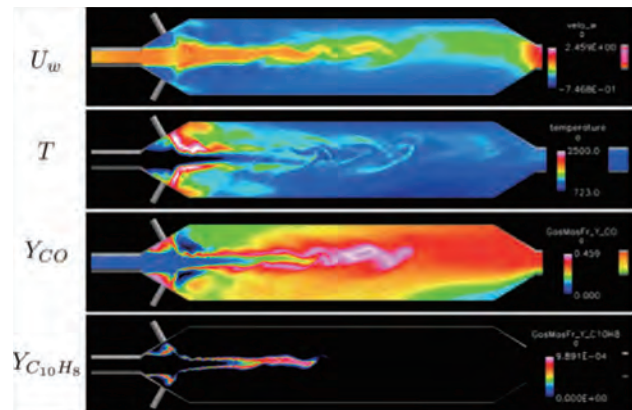


図1. LES(乱流モデル)とFlameletアプローチを組み合わせた石炭乾留ガス改質反応の熱流体シミュレーション結果。上から、速度、温度、CO濃度、ナフタレン濃度場を可視化。

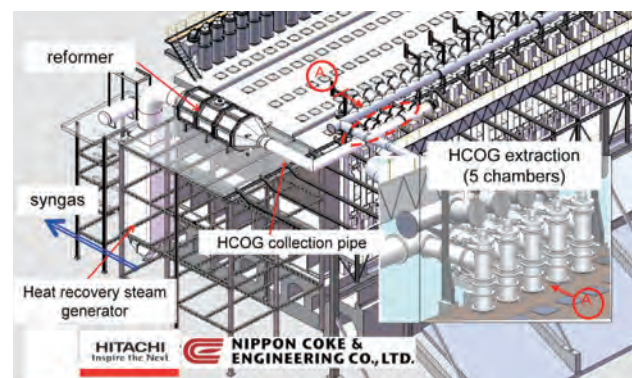


図2. 操業中の製鉄用コークス製造炉への設置を想定したコークス炉副生ガス(Hot Coke Oven Gas, HCOG)改質プロセス。