

化学産業カーボンニュートラル対策としての産業電化技術 のCAE利用迅速・低コスト研究開発

Instant and Low-cost R & D of Electrification Technologies of Chemical Industries toward Carbon
Neutrality

和田雄二¹⁾

Yuji Wada

1) (一社) ZeroC代表理事, 東京工業大学名誉教授 (E-mail: ywada@gmail.com),

(株) L-TRiSE(E-mail: yuji.wada@l-trise.co.jp)代表取締役

We can save much time and cost required in R & D for selecting a proper heating technique of chemical processes by applying multi-physics simulation. One example is exhibited here in which the catalytic dehydrogenation on Fe_3O_4 catalyst bed is driven under microwave heating in comparison with conventional electric furnace heating. COMSOL Multiphysics enabled to simulate and visualize the distribution of electric field and its loss into heat in the catalyst bed, finally giving the temperature distribution in the catalyst bed using those simulation results. The reaction yields and reaction rate constant were derived using the Arrhenius parameters obtained by the reaction experiments using an electric furnace by combining with the temperature distribution obtained by the simulation. The obtained values of the reaction yields and rate constants were in good coincidence with the experimental data obtained in the real experiments performed using microwaves. This excellent example shows that a R & D strategy using multi-physics simulation can replace the practical experiments in the R & D when it is designed in a proper mode. The author proposes “Labless Research Package” using the multi-physics simulation in order to enhance “Carbon Neutrality” in chemical industries and material industries.

Key Words : *Multiphysics Simulation, Chemical Industries, Material Production Processes, Electrification of Industries, Carbon Neutrality*

1. はじめに

世界的規模で異常気象, 気象変化問題が深刻化している。その原因として, 地球温暖化する科学的根拠が集められ, その信憑性が高い。加えて, 地球温暖化の主原因は, 最近, 421ppmに達した大気中の二酸化炭素の温室効果であることも, 地球規模のシミュレーションにより, 高い信憑性を帯びている[1]。長らく科学分野だけでなく, 国際政治でも議論が継続されてきた地球温暖化問題について, 日本は, 2020年に菅元総理大臣が世界に向けて, カーボンニュートラル対策を掲げ, 2050年には二酸化炭素排出ゼロとすることを宣言した[2]。内閣府をとりまとめた中心として各省庁を通して, カーボンニュートラル対策の具体策を提案・提示し, 企業, 地方自治体, 個人まで, 二酸化炭素排出削減に取り組むこととなって, 4年間が過ぎ去った。現実的には, 国主導のカーボンニュートラル対策は, 抽象的方向性は示されているものの, 具体的な対策については, 個々の業界, 企業, 自治体に一任されている状況であり, それぞれが具体策策定に取り組まなければならない。

日本の製造工業は, 日本全体の二酸化炭素全排出量(11億トン/年)のうち25%で, 化学産業はこの製造業の中で20%, すなわち, 全排出量の5%に責任がある[3]。化学産業では, 石油化学という川上の製造プロセスから, 日常品

の製造まで, 広い製造プロセスの広がりがあり, 化学産業内のそれぞれの業種ごとに製造プロセスの見直しが必要となっている。

化学製造業でエネルギー消費が最も大きいのは, 加熱プロセスであり, 従来は, 石油, 石炭という埋蔵燃料を燃焼することで得られる熱を利用しているため, 大量の二酸化炭素排出の原因となっている。従って, 化学製造業のカーボンニュートラル対策は, この加熱プロセスを, 燃焼熱でなく, 再生可能発電による電力に切り替えることが, 最終的な解決策であることは, 科学技術者の総意として理解できる。

本稿では, この従来の化石燃料燃焼熱利用の加熱技術を電気加熱に置き換えのため必須の研究開発において, CAEを, 特に, 物理化学シミュレーションを利用することを提案する。その最大の利点は, 開発速度の迅速化とコストの大幅低減であることを, 論じる。

2. 化学プロセス加熱技術の電化

現在, 化学産業で用いられている加熱技術は, 化石燃料燃焼熱を利用した直接加熱あるいはボイラー加熱であり, この加熱技術を再生可能発電による電力を用いた加熱技術で置き換えるためには, 極めて多種の化学プロセスに対応する加熱技術に, それぞれ対応する必要がある。電力

を用いる加熱技術としては、抵抗加熱、誘電加熱、誘導加熱、赤外線加熱、レーザー加熱が主で、他にもアーク加熱、プラズマ加熱、ヒートポンプなどが、すでに利用できる技術として取り揃えられている(図-1) [4]。しかし、これらの電力加熱技術を個々のプロセスに利用するためには、それぞれの特長に応じた使い分けが必要で、しかも、加熱装置自体の新設計・試作による検討が必要となる。この場合は、今までの研究開発手法として、最初に着手するのは、ラボにおける加熱実験検討である。

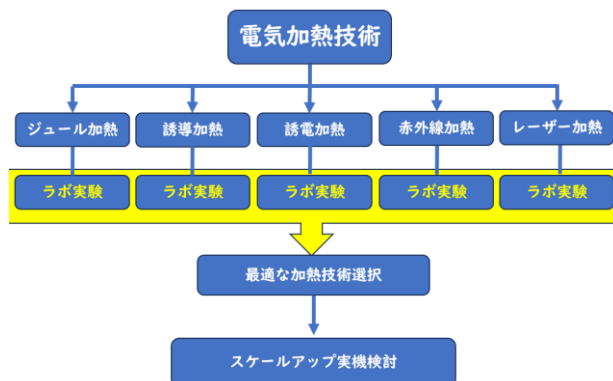


図-1 従来の電化技術開発における電化技術選択の流れ

例えば、ある化学反応プロセスの加熱技術を電化する技術開発作業において、上記の5つの電力加熱技術から最適な技術を選択する場合、それぞれの加熱技術をラボで試作し、実験データを検討するとすれば、どれだけのマンパワーと時間が必要であろうか？これは、年単位の業務となると予想でき、化学企業のカーボンニュートラル対策検討の障壁となり、その遅れにつながっていることは想像に難くない。

ラボ実験の代わりに物理化学シミュレーションを利用することにより、ラボ実験を極力減らせれば、マンパワーもコストも現実的な実現可能な範囲として設定でき、カーボンニュートラル対策がより促進されるという主張が、

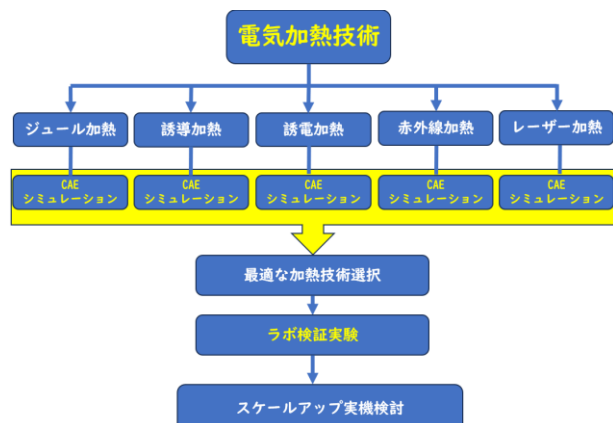


図-2 CAEを活用する電化技術開発における電化技術選択の流れ

本論文の骨子である(図-2)。本稿では、和田が旧東京工業大学における研究活動において、経験した研究開発において、シミュレーションを利用することによって得た貴重な知見を例として、その手法を提案し、論じたい[5,6,7,8]。

3. 固体触媒反応のシミュレーション解析—ジュール加熱と誘電加熱の比較検討

(1) ラボ反応装置

対象とする化学反応系は、マグネタイト(Fe_3O_4)の粉体を触媒とするエチルベンゼンの脱水素反応である。この反応では、図-3にあるようにマグネタイトを円筒状に充填した触媒層の上部からエチルベンゼン(気体)を窒素気流に混合して流す形の反応系である。固体触媒層内でエチルベンゼンは、脱水素され、スチレンと水素分子とな

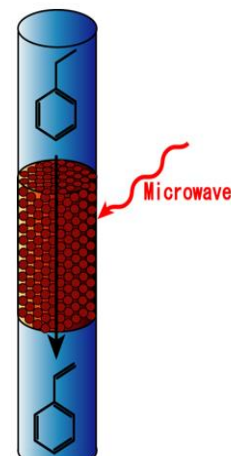


図-3 固体触媒層を用いたエチルベンゼンの脱水素反応系

って、充填層下部から回収し、分析を行う。図-4には、マイクロ波加熱の装置を示した。触媒層は、石英管内に設置し、マイクロ波照射用の楕円チャンパー内に挿入する。楕円チャンパー内の2つの焦点の位置に、マイクロ波発振アンテナと触媒層

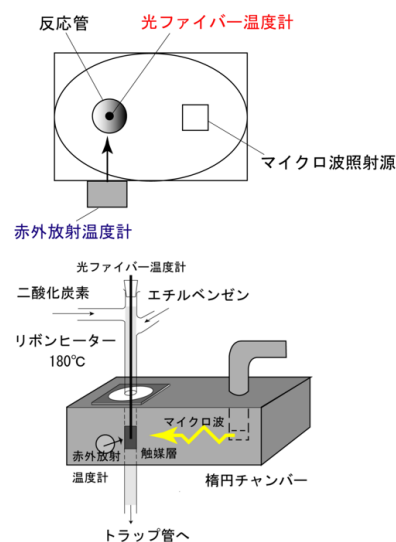


図-4 触媒反応管を挿入するマイクロ波楕円チャンパー

とで、アンテナから発振されたマイクロ波が触媒層に集中する設計となっている。

(2) シミュレーションの対象とする化学反応系

この化学プロセスの加熱は、大型装置の実機では化石燃料燃焼熱を用いるが、通常のラボ実験では、充填層を電気炉の内部に挿入して電気加熱により行う。この研究では、マイクロ波をエネルギー源とする誘電加熱による効果を観察することが目的だったので、電気炉加熱とマイ

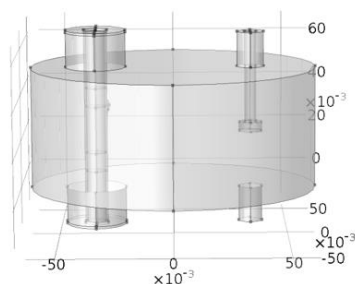


図-5 楕円チャンバーのジオメトリ

RFモジュールと伝熱モジュールを利用した。図-5には、シミュレーションに用いたジオメトリを示している。

4. シミュレーション

(1) 電磁波分布と熱への損失エネルギー解析

石英管入りの触媒層を挿入した楕円チャンバー内のマイクロ波照射下における電磁波分布のシミュレーションにより、電場強度、磁場強度の分布、振動電場と振動磁場の誘電体との相互作用による熱への変換による損失エネルギーの分布を算出し、視覚化した(図6)。図4上は、電場分布が触媒層上下に集中していることを示してい

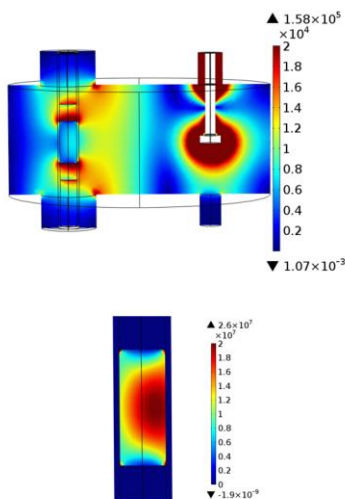


図-6 楕円チャンバー内の電場分布(上)と触媒層内のエネルギー損失分布(下)

る。触媒層内部に電場は入り込むが、内部では振動電場が熱に変換するため強い電場は存在しない。図-6下は、振動電場が熱に変換したエネルギー損失の分布であり、この図は、触媒層の中心部分で多くのエネルギー損失が起こっていることを示している。すなわち、マイクロ波の触媒層内部へ浸透と内部での熱への変化という挙動の特長が明らかになった。ここでシミュレーションにより得られた電磁波分布の正しさの確認は、図-7に示すS11パラメータの測定値に、シミュレーションから得られる曲線の特にピーク

が一致していることから確認できている。

(2) 熱流束シミュレーション

電磁波分布シミュレーションの結果をそのまま熱流束シミュレーションに連成することにより、

マイクロ波照射下で発生する触媒層内の温度分布をシミュレーションした(図-8)。触媒層内の温度は、その中心部分で最も高く、上下左右の触媒層外表面に向かって温度勾配が発生する。中心が600℃としたときでも、側面は490℃、上面は350℃、下面は490℃まで温度が低下することがわかった。この温度分布は、マイクロ波が触媒層内に浸透し、中心付近で熱に変換損失すること、さらに触

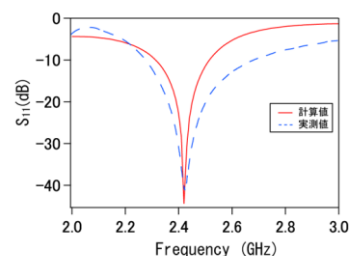


図-7 S11 パラメータの実測値と計算値の一致確認によるシミュレーション検証

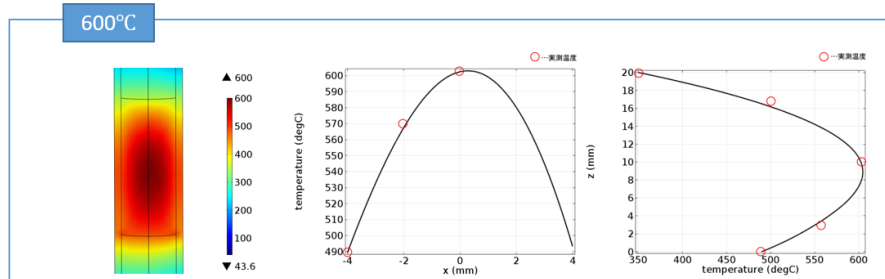


図-8 マイクロ波照射下における固体触媒充填層内の温度分布

媒層外表面からは、周辺環境温度に近い空気によって熱が奪われること、の2点を考えると理解できる。以上、電磁波分布シミュレーションと熱流束シミュレーションの連成解析から、触媒層の温度分布が実験無しで予測でき

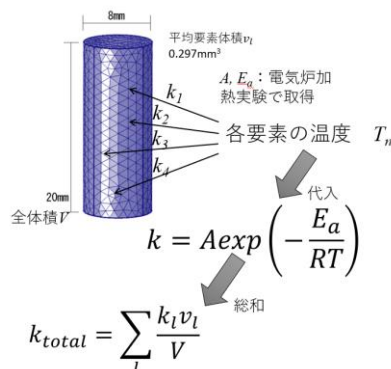


図-9 温度分布を反映した反応速度計算の方法

たことになる。この温度分布は、触媒層内の数点の座標に温度プローブを設置した実験によって、その正確さは確認できた。

(3) マイクロ波照射下における化学反応速度のシミュレーション

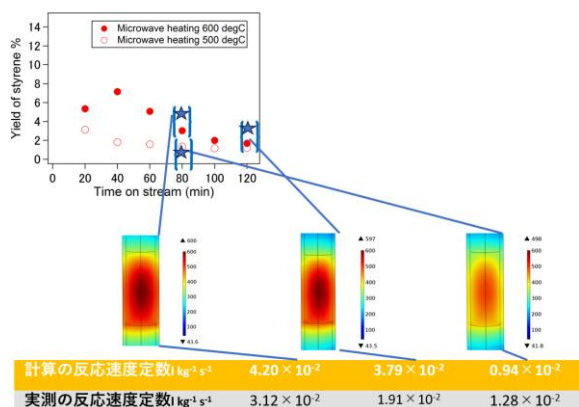


図-10 シミュレーションで得られたマイクロ波照射下における反応速度定数と実験値の比較

エチルベンゼンの脱水素反応の反応速度は、固体触媒層内の各座標における温度で決定され、各座標で異なる。触媒層内の温度分布がシミュレーションで再現できたので、各座標毎に反応速度をアレニウス式を用いて計算し、それぞれの座標における反応速度を触媒層内全体に渡って積分すれば、この実験系における反応速度が算出できる。これは、全触媒層内の温度が一定の電気炉加熱でも、大きな温度分布が発生するマイクロ波加熱下でも同様である。逆に言えば、全触媒層内の温度が一定の電気炉加熱実験を用いて、アレニウスパラメータ、すなわち、活性化エネルギーと頻度因子を求めておけば、大きな温度分布のあるマイクロ波照射下の反応速度が実験をしなくとも、算出可能ということである。その概念を図-9に示した。

図-10には、マイクロ波加熱による実験により得られた反応転化率の流通時間に対する変化を示した。反応転化率は、反応物質であるエチルベンゼンの流通時間とともに、低下する。反応転化率変化のグラフ上にプロットした★印がシミュレーションのみから推定した転化率であり、実験値をよく再現していることがここで明確である。ここで、再度、強調しておきたいことは、このシミュレーションは、通常の電気炉加熱実験のデータが入手できれば、マイクロ波関連の実験はまったく不要な状況でも、シミュレーションで再現できるという事実である。

レーションで再現できるという事実である。

5. 最後に - ラボレスリサーチパッケージ

以上に述べたように、固体触媒反応の電化に対する研究開発は、そのラボ実験におけるデータ蓄積の多くの部分を物理化学シミュレーションで置き換えることができる。完全にラボ不要、すなわちラボレスということがない場合、ジオエメトリ、物性値などの中には、ラボ実験のデータに合わせ込みが必要な場合もあるが、それでもラボ実験の大部分は物理化学シミュレーションで置き換えることができる。その手法の利点は、研究開発期間の短縮、マンパワーの節減、コストの節減だけではない。物理化学シミュレーションを適切に利用するためには、検討対象とする化学反応系の物理化学的原理と現実の系が包含する原理からのズレの起因となる誤差要素を、できるだけ把握理解する必要がある、これは研究開発における基本的姿勢の適正化に繋がる。

和田は、ここに述べた手法をカーボンニュートラル対策に利用することで、化学産業、材料産業などにおける対策事業が大きく促進できると考え、シミュレーション利用ノウハウ情報の共有、交換の場として、一般社団法人ZeroC内にマルチフィジックス研究会を設置し、活動開始するとともに[9]、事業者向けにL-TRiSE(株)において「ラボレスリサーチパッケージ」(図-11)を提供する業務受託展開しているので、ぜひ一度、HPをご覧ください[10]。

参考文献

- [1] 環境省HP:https://www.env.go.jp/press/press_04307.html
- [2] 首相官邸ホームページ:
https://www.kantei.go.jp/jp/99_suga/statement/2020/1026shoshinhyomei.html
- [3] 環境省2022年度の温室効果ガス排出・吸収量(概要) <https://www.env.go.jp/content/000216325.pdf>
- [4] 日本エレクトロヒートセンター：トップページ：
<https://www.jeh-center.org/>
- [5] Haneishi, N; Tsubaki, S; Maitani M. M.; Suzuki, E.; Fujii, S.; Wada, Y., *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **2017**, 56, 27, 7685-7692.
- [6] N. Haneishi, H.; Tsubaki, S.; Abe, E.; Maitani, M. M.; Suzuki, E.; Fujii, S.; Fukushima, J.; Takizawa, H.; Wada, Y., *Scientific Reports*, **2019**, 9:222.
- [7] Wada, Y.; Fujii, S.; Suzuki, E.; Maitani, M.; Tsubaki, S.; Chonan, S.; Fukui, M.; Inazu, N., *Scientific Reports*, **2017**, 7:46512.
- [8] 藤井知, 和田雄二, シミュレーションで見るマイクロ波化学, マルチフィジックス有限要素解析シリーズ4, 近代科学社, ISBN978-4-7649-6072-5C3043,2023.
- [9] <https://cn-as-citizen.org/>
- [10] <https://www.l-trise.co.jp/>

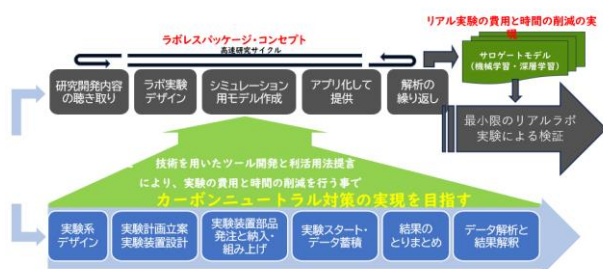


図-11 ラボ実験を物理化学シミュレーションで置き換えるラボレスリサーチパッケージ