

北海道大学工学部 学生員 ○湯浅 晶
北海道大学工学部 正会員 高桑 哲男
北海道大学工学部 正会員 丹保 憲仁

1. はじめに 活性炭吸着固定層を設計・運用する際に我々が最も関心を抱くのは、溶媒の破過時間・吸着帯の形状等を予測することである。本報では、前報に示した細孔内拡散律速吸着モデルを固定層に適用し、バッチ試験で求められる細孔内拡散係数と吸着等温式を用いて固定層の吸着パターンを表現することを試みる。

2. 基礎式 吸着固定層の物質収支は次のとおりである。

$$u \frac{\partial C}{\partial z} + \epsilon_b \frac{\partial C}{\partial t} + \gamma_b \frac{\partial Q}{\partial t} = \epsilon_b D_b \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad \text{---- (1)}$$

(1) 式中の C 、 Q と前報(1)式中の C 、 q (ともに C , z , r の関数である) は次式で関係づけられる。

$$Q = \frac{\int_0^a 4\pi r^2 (\epsilon_s C + \rho_s q) dr}{\int_0^a 4\pi r^2 \rho_s dr} = \frac{3}{a^3} \int_0^a (\epsilon_s C + q) r^2 dr \quad \text{---- (2)}$$

$$C = C|_{r=a} \quad \text{---- (3)}$$

初期条件は $C = 0$ ($z \geq 0, 0 \leq r \leq a, t = 0$) ---- (4)

境界条件は $C = C_0$ ($z = 0, r = a, t \geq 0$) ---- (5)

ただし t [sec]: 時間, z [cm]: 層深, C [mg/l] 及び Q [mg/kg.ac]: z, t における流体本体の濃度及び活性炭平均吸着量, u [cm/sec]: 流体の空塔速度, ϵ_b : 固定層空隙率, γ_b [g-ac/cm³-bed]: 活性炭充填密度, D_b [cm²/sec]: 流体の固定層縦方向分散係数, a [cm]: 活性炭粒子半径, ρ_s [g-ac/cm³-ac]: 活性炭みかけ密度, ϵ_s : 活性炭空隙率, C_0 : 固定層流入濃度

3. 計算方法 固定層を縦方向に L 等分 ($L = 20$)、活性炭粒子半径を P 等分 ($P = 8$) し、半陰形式・中央差分にて (1) 式及び前報(1) 式を差分する。これにより時刻 t における濃度 C は図1に示すような2次元配列 $C(l, m)$ で表示される。(層深 $z = l \cdot \Delta z$, 粒子内位置 $r = m \cdot \Delta r$ であることを示す)。ラングミュア型吸着等温式をニュートン法で (6) 式のように1次化し、(2) 式中の Q をシン普森公式で計算すると、得られた各差分式は $(L+1)(P+1) = 189$ 元の連立1次方程式になる。このような多元連立1次方程式を通常の方法で解くのは容易でない。そこで連立方程式の係数が0である項が多い事に着目し、還元解法¹⁾を用いて記憶容量・計算時間を大幅に減少させて解いた。還元解法の適用により、本報の場合は、連立1次方程式の元数 g 、 $(L+1)(P+1)$ から $(L+1)$ 元に減少した。

4. 計算例

4-1. 線型吸着等温式の場合の解析解との照合 数値解の正当性をチェックするため吸着等温式がヘンリー型の場合について求められている解析解との照合を行った。ただし

この解析解は (1) 式の左辺第2項と右辺を無視した近似として解かれ、破過曲線は次式から計算される。²⁾

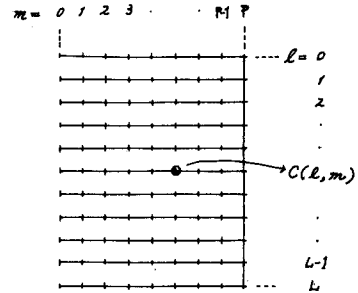


図1 固定層及び活性炭粒子の分割

$$q = \psi_A \cdot C + \psi_B \quad \text{---- (6)}$$

$$\text{ただし } \psi_A = b \cdot K / (1 + K \cdot C_N)^2$$

$$\psi_B = b \cdot K^2 \cdot C_N^2 / (1 + K \cdot C_N)^2$$

C_N : C の仮定値

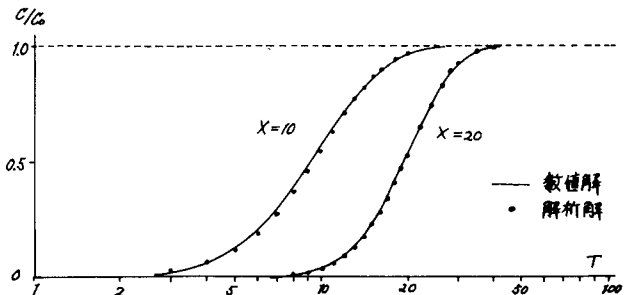


図2 数値解と解析解の照合

$$\frac{C}{C_0} = 1 - \int_0^X e^{-X-T} I_0(2\sqrt{XT}) dX \quad \text{----- (7)}$$

ただし $X = (\pi/R)^2 \varepsilon_s D_i y z / u \beta_s$, $T = (\pi/R)^2 \varepsilon_s D_i t / \beta_s$

I_0 : 虚数0次のベッセル関数, β : ヘンリー式 $g = \beta \cdot C$ の定数

図2は本報による計算結果と(7)式による計算結果を比較し、 K のものでよく一致する。計算条件は $X=10, 20$ となるように定めた。

4-2. 非線形吸着等温式の場合 非線形吸着等温式の場合には解析解が求められていない。ラングミュア式を図3のように規定し、 $D_i = 10^{-7} \sim 10^{-5} [\text{cm}^2/\text{sec}]$, $D_b = 0 \sim 50 [\text{cm}^2/\text{sec}]$ の範囲で変化させた。計算に用いた諸条件は $u = 10 [\text{cm}/\text{min}]$, $z = 80 [\text{cm}]$, $Q = 0.02 [\text{cm}]$, $\beta_s = 0.63 [g\text{-a.c.}/\text{cm}^3\text{-a.c.}]$, $\varepsilon_s = 0.66$, $y_0 = 0.39 [g\text{-a.c.}/\text{cm}^3\text{-bed}]$, $\varepsilon_b = 0.38$, 流入濃度 $C_0 = 100 [\text{mg}/\text{L}]$, 時刻ステップ $\Delta t = 1 [\text{hr}]$ である。

(i) 吸着等温線の影響 … 図4は細孔内拡散係数 $D_i = 2 \times 10^{-6} [\text{cm}^2/\text{sec}]$, 固定層縦方向分散係数 $D_b = 0$ とした場合の破過曲線である。吸着等温式の定数 K が大きい程 (凸形弯曲度が大きい程) 破過の開始が遅れ、破過曲線の立ちあがり急になる。これは吸着帯の長さが短いことを示す。

(ii) 細孔内拡散係数 D_i の影響 … 図5は $D_b = 0$ の場合の破過曲線。 D_b が大きい程破過開始が遅く破過曲線の立ちあがり急で、(i) の K が大きい場合と同様の効果を示す。

(iii) 固定層縦方向分散係数 D_b の影響 … 図6は $D_i = 2 \times 10^{-6} [\text{cm}^2/\text{sec}]$ の場合の破過曲線で、 D_b が大きい程破過が早期に開始し、破過曲線の立ちあがりゆるやかとなり (i) の K , (ii) の D_i が大きい場合と逆の効果を示す。

5. おわりに このようにしてバッチ試験で細孔内拡散係数と吸着等温式を求めておけば、固定層縦方向分散係数をも考慮して、固定層での挙動を数値実験により求め、必要な装置の諸元を理論設計する途が開ける。

なお、数値計算には北海道大学大型計算機センターのFACOM 230-60を使用し、

参考文献

1) 高桑哲男: 水道協会雑誌, 第422号, 1969年

2) 河添邦太郎: 新化学工学講座Ⅱ-3b「吸着」, 日刊工業新聞社(1958)

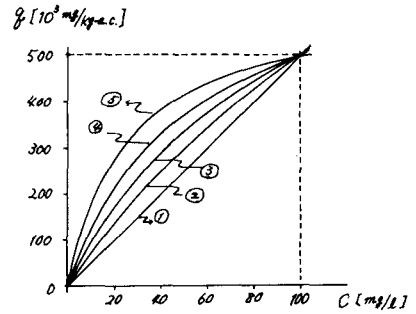


図3. 計算に使用した吸着等温線

① $g = 5000 \cdot C$ ② $g = \frac{2500 \cdot C}{1 + 0.005 \cdot C}$ ③ $g = \frac{10000 \cdot C}{1 + 0.01 \cdot C}$
④ $g = \frac{15000 \cdot C}{1 + 0.02 \cdot C}$ ⑤ $g = \frac{25000 \cdot C}{1 + 0.04 \cdot C}$, $g [\text{mg}/\text{kg-a.c.}]$

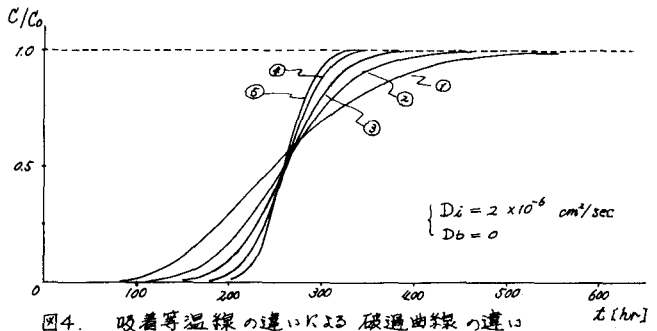


図4. 吸着等温線の違いによる破過曲線の違い

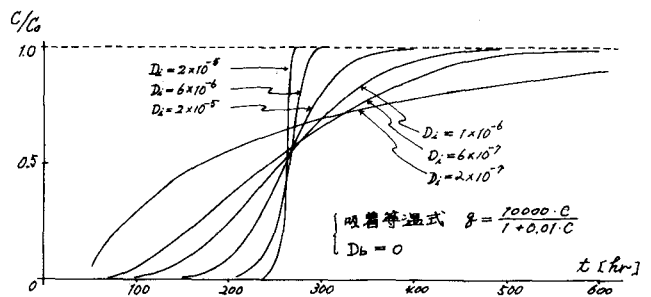


図5. 細孔内拡散係数 D_i (cm^2/sec) をパラメータとし、破過曲線の違い。

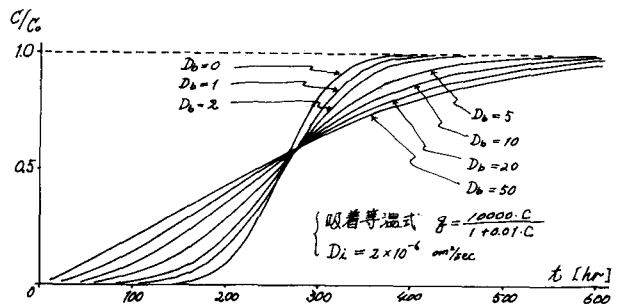


図6. 固定層縦方向分散係数 D_b (cm^2/sec) をパラメータとし、破過曲線の違い。