

COMSOL Multiphysics® Ver.5.3a 専門モジュールイントロダクション

化学反応工学モジュール

物質とエネルギーバランスと化学反応

製品説明

<https://www.comsol.jp/chemical-reaction-engineering-module>

計測エンジニアリングシステム株式会社

東京都千代田区内神田 1-9-5 井門内神田ビル 5F

2018 1.12

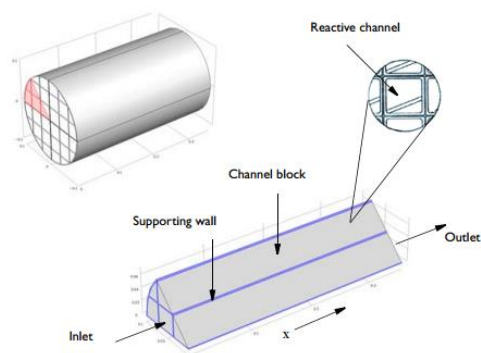
1. 専門モジュールイントロダクションの目的

COMSOL Multiphysics®の各専門モジュールにおける基本的な問題を取り上げ、検討したい分野で操作手順をすぐに試すことができるようにすることが目的です。

COMSOL Multiphysics®トライアル版を受領後、本書の内容をトレースすることでトライアル期間を有効につかうことができるでしょう。

2. チュートリアル

車の排気システムにおける NO 還元反応の解析



出典：INTRODUCTION TO Chemical-Reaction-Engineering p.18 以降

はじめに

車の排気システムの NO 還元反応を解析します。その中で、温度と組成がどのように反応選択性に影響を及ぼすかについて検討します。モデルは、化学反応工学インターフェースで定常プラグ流を使って組み立てられます。

手順

モデルウィザード

1. デスクトップの COMSOL アイコンをダブルクリックします。ソフトウェアが起動すると画面にモデルウィザードを使う（COMSOL モデルを新規作成）かブランクモデルを使う（手動で COMSOL モデルを新規作成）かを選択する画面が表示されます。ここではモデルウィザードを選択します。COMSOL がすでに起動している場合にはファイルメニューで新規を選択後にモデルウィザードを選択します。



2. 空間次元を選択ウィンドウで 0D をクリックします。

3. フィジックスを選択しツリーで化学種輸送を展開し反応工学をダブルクリックします。すると、追加フィジックス選択リストに表示されます。

4. スタディをクリックします。

5. 標準スタディの下のスタディツリーで定常プラグ流を選択します。

6. 完了をクリックします。

定義-パラメータと変数

・パラメータ

1. ホームツールバーのパラメータボタンをクリック（モデルビルダー上であればグローバル定義を右クリックし、パラメータを選択）します。

Linux および Mac：デスクトップのトップに近いところにあるコントロールを使います。

2. パラメータの設定ウィンドウに行き、パラメータの下でファイルからロードをクリックします。

3. アプリケーションライブラリ

¥ Chemical_Reaction_Engineering_Module¥Tutorials をブラウズし、monolith_kinetics_parameters.txt をダブルクリックします。パラメータが読み込まれます。

設定
パラメータ

▼ パラメータ

| 名前 | 式 | 値 | 説明 |
|----------|------------------------------|-----------------------------|-----------------|
| T_in | 523[K] | 523 K | 入口温度 |
| T_amb | 350[K] | 350 K | 周囲温度 |
| rad | 2[mm] | 0.002 m | 流路半径 |
| A | $\pi \cdot \text{rad}^2$ | 1.2566E-5 m ² | 流路断面積 |
| v_av | 0.3[m/s] | 0.3 m/s | 平均ガス流速 |
| vrate | $v_{\text{av}} \cdot A$ | 3.7699E-6 m ³ /s | 体積基準の流量 |
| UA | 200[W/(K*m...] | 200 W/(m ³ ·K) | 体積基準の伝熱係数 |
| F_NO_in | 1.55e-7[mol/s] | 1.55E-7 mol/s | NOの入口モル流量 |
| F_NH3_in | $F_{\text{NO_in}} \cdot X0$ | 2.0925E-7 mol/s | NH3の入口モル流量 |
| X0 | 1.35 | 1.35 | 入口のNOに対するNH3の割合 |
| F_O2_in | 2.71e-6[mol/s] | 2.71E-6 mol/s | O2の入口モル流量 |
| F_N2_in | 6.86e-5[mol/s] | 6.86E-5 mol/s | N2の入口モル流量 |
| F_H2O_in | 7.34e-6[mol/s] | 7.34E-6 mol/s | H2Oの入口モル流量 |
| A0 | 2.68e-17[1/s] | 2.68E-17 1/s | 反応頻度因子 |
| A1 | 1e6[1/s] | 1E6 1/s | 反応頻度因子1 |
| A2 | 6.8e7[1/s] | 6.8E7 1/s | 反応頻度因子2 |
| E0 | -243e3[J/mol] | -2.43E5 J/mol | 反応活性化エネルギー |
| E1 | 60e3[J/mol] | 60000 J/mol | 反応活性化エネルギー1 |
| E2 | 85e3[J/mol] | 85000 J/mol | 反応活性化エネルギー2 |

・変数の設定

1. ホームツールバーにおいて、変数をクリックして、ローカル変数（または、コンポーネントの下のモデルビルダにおいて、定義を右クリックして、）変数を選択します。
2. 変数の設定ウィンドウにおいて、変数にいきます。
3. 変数の入力欄において、以下に示すように式を設定します。

| 名前 | 式 | 単位 | 説明 |
|----|----------------------------|-----|-------------|
| S | comp1.re.r_1/comp1.re.r_2 | | 選択率 |
| a | A0*exp(-E0/(R_const*re.T)) | 1/s | アレニウス反応速度係数 |

・反応 1

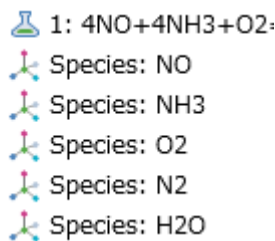
1. 反応工学ツールバーにおいて、反応を選択します。（モデルビルダでは反応工学(re)を右クリックして反応を選択します）
2. 反応の設定において、反応式欄で空欄に
 $4\text{NO}+4\text{NH}_3+\text{O}_2\Rightarrow 4\text{N}_2+6\text{H}_2\text{O}$ という式を入力します。
 この際、反応タイプは不可逆にする。
3. 適応をクリックして、各化学種に対して反応と化学種のノードを与えます。
4. モデルビルダにおいて $4\text{NO}+4\text{NH}_3+\text{O}_2\Rightarrow 4\text{N}_2+6\text{H}_2\text{O}$ ノードをクリックします。

設定
反応

ラベル: 1: $4\text{NO}+4\text{NH}_3+\text{O}_2\Rightarrow 4\text{N}_2+6\text{H}_2\text{O}$

▼ 反応式

公式:



5. 反応速度の設定においてユーザ定義を選択します。そして、入力欄に

$re.kf_1*re.c_NO*a*re.c_NH3/(1+a*max(re.c_NH3,0)) [m^{24}/mol^8]$ と入力します。

反応速度:

ユーザ定義

反応速度:

r mol/(m³.s)

6. 速度定数の設定において、アレニウス式を使用にチェックをつけます。そして、入力欄でアレニウスパラメータの設定において、

A^f に $A1 [m^{24}/mol^8]$ 、 n^f に 0、 E^f に $E1$ と入力します。

▼ 速度定数

アレニウス式を使用

$$k^f = A^f (T/T_{ref})^{n^f} \exp\left(\frac{-E^f}{R_g T}\right), T_{ref} = 1K$$

順反応頻度因子:

A^f m²⁴/(s.mol⁸)

順反応温度指数:

n^f 1

順反応活性化エネルギー:

E^f J/mol

・反応 2

1. 反応工学ツールバーにおいて、反応をクリックし、NH₃ の酸化の 2 次式を追加します。
2. 反応の設定において、反応式の入力欄に $4NO+4NH_3+O_2=>4N_2+6H_2O$ という式を入力します。(コピーペーストします)
3. 適応を選択します。
4. 反応速度の設定において、反応速度リストからユーザ定義を選択し、

$re.kf_2*re.c_NH3 [mol^6/m^{18}]$ を反応速度の入力欄に入力します。

5. 速度定数の設定において、アレニウス式を使用にチェックをつけます。そして、入力欄で A^f に $A2[m^{18}/mol^6]$ 、 n^f に 0、 E^f に E2 と入力します。

▼ 速度定数

アレニウス式使用

$$k^f = A^f (T/T_{ref})^{n^f} \exp\left(\frac{-E^f}{R_g T}\right), T_{ref} = 1K$$

順反応頻度因子:

A^f $m^{18}/(s \cdot mol^6)$

順反応温度指数:

n^f 1

順反応活性化エネルギー:

E^f J/mol

反応工学インターフェイス-反応速度の入力

1. モデルビルダにおいて、反応工学(re) を選択します。
2. 設定ウィンドウにおいてリアクターの設定で、リアクタータイプをプラグ流れとします。
3. エネルギー収支の設定で、温度の設定欄に $500[K] + 250 * re.Vr [K/m^3]$ を入力します。
4. 物質収支の設定で、体積基準速度をユーザ定義として $vrate$ と入力します。

▼ 反応器タイプ

反応器タイプ:

▼ エネルギー収支

除外

温度:

T K

▶ 混合体

▶ 輸送特性を計算

▶ 活量

▶ 離散化

▼ 質量収支

体積率:

体積流量:

v m^3/s

・初期値 1

流入値を設定します。

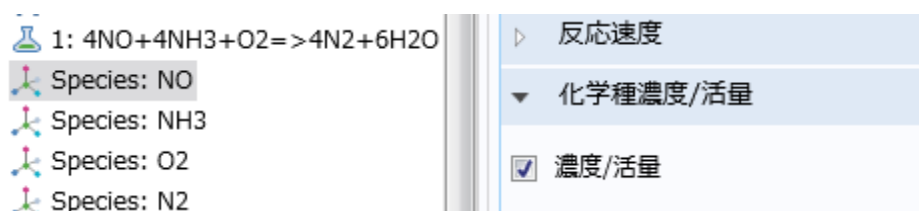
1. モデルビルダの反応工学の下で、初期値 1 を選択します。
2. 初期値の設定において、体積基準の各種の初期値の欄をいきます。
3. 以下のように初期値を入力します。

| 化学種 | モル流量 (mol/s) |
|-----|--------------|
| H2O | F_H2O_in |
| N2 | F_N2_in |
| NH3 | F_NH3_in |
| NO | F_NO_in |
| O2 | F_O2_in |

・化学種 : NO と NH3

温度が初期反応速度に与える影響を調べるために NO や NH3 の濃度をロックします。

1. モデルビルダにおいて、化学種 : NO と化学種 : NH3 をクリックして、それぞれの化学種において化学種濃度/活量にいきます。
2. NO と NH3 それぞれで、化学種濃度/活量のボックスにチェックします。



スタディ 1

1. スタディ 1 を右クリック：パラメトリックスイープを選択します。
2. パラメトリックスイープを以下のように設定します。

| スタディ設定 | |
|-------------------------------|----------------|
| スイープタイプ: | 指定の組み合わせ |
| パラメーター名 | パラメーター値リスト |
| X0 (Ratio NH3 to NO at inlet) | range(1,0.2,2) |

3. ステップ 1：定常プラグ流において

相対トレランスを選択し、入力欄に $1e-7$ と入力します。

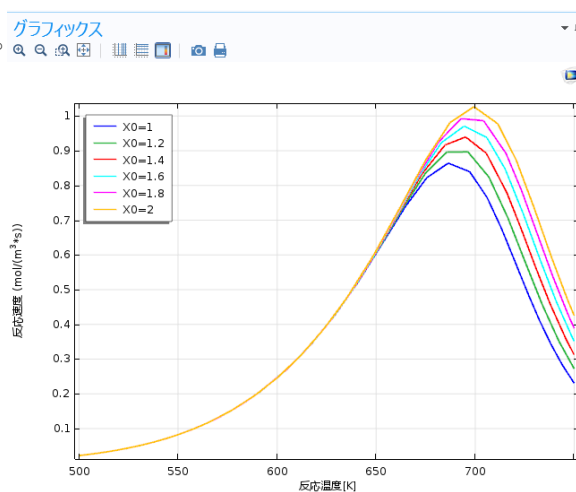
スタディのツールバーで計算をクリックします。

| 設定 | |
|----------|--|
| 定常プラグ流 | |
| = 計算 解更新 | |
| ラベル: | 定常プラグ流 |
| ▼ スタディ設定 | |
| ボリューム単位: | m ³ |
| ボリューム: | 0.036*A m ³ |
| 相対トレランス: | <input checked="" type="checkbox"/> 1e-7 |

結果 入口反応速度

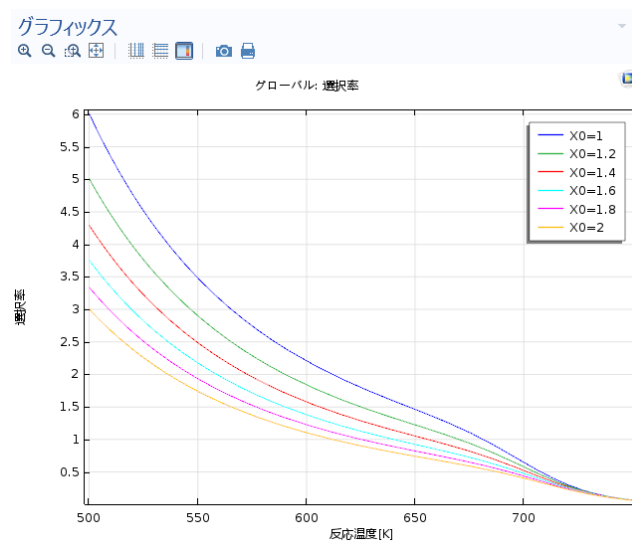
・モル流量

1. モル流量を右クリックして重複を選択します。そのラベルを反応速度に変更します。
2. データセットをスタディ 1/動特性を選択します。
3. タイトルタイプをなしにします。
4. プロット設定にいき、x 軸ラベルを選択します。
5. X 軸ラベルを反応温度 [K]に変更します。
6. レジエントにいき、位置を左上とします。
7. 反応速度においてグローバル 1 を選択します。
8. 設定ウィンドウにおいて、y 軸データにいきます。
9. 入力欄を compl. re. r_1 に変更します。
10. カラーリングおよびスタイルにいき、幅を 2 にする。
11. レジエントにいき、式のチェックボックスを外します。
12. プロットボタンを押すと以上の結果が表示される。



・ 選択率

1. モル流量を右クリックして重複を選択します。
2. そのラベルを選択率に変更します
3. グローバル 1 を選択します。
4. 設定ウィンドウにおいて表式を置換を選択し、comp1.S-選択率を選択します。
5. プロットボタンを押すと、以下のグラフが表示されます。



以上