



## モノリシック反応装置の設計

### はじめに

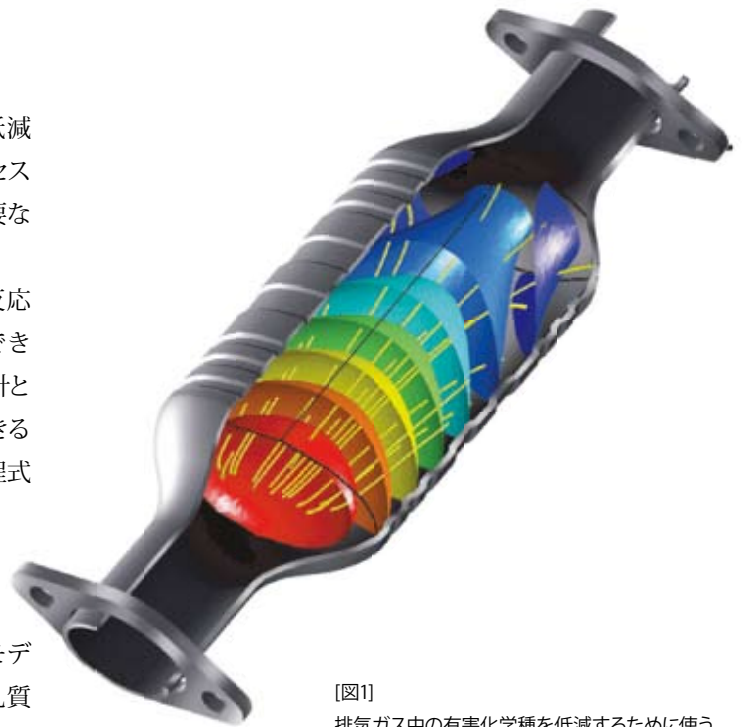
モノリシック反応装置はNO<sub>x</sub>やSO<sub>x</sub>等の汚染物質の低減や触媒燃焼プロセスに広く使われています。これらのプロセスの最適化と設計にはモデリングとシミュレーションが重要なツールとなります。

COMSOL Multiphysicsと化学工学モジュールでは化学反応工学特有のアプリケーションが対話的GUI環境で利用できます。化学工学モジュールには、モノリシック反応装置の設計と解析に必要な反応速度論用の任意式に連成することができる運動量/エネルギー/質量バランスのための定義済みの方程式が含まれています。

### 均質モデル

モノリシック反応装置は一般的な反応装置に比べてモデリング上の難しさが伴います。反応装置内の流体は多孔質ウォッシュコートとモノリスのチャンネルに含まれます。流れはチャンネル内で比較的速く、このためチャンネルと固体構造の間で温度と濃度の差異が生じます。チャンネルには方向に優先度があるためモノリス全体の擬似均質モデルは異方性輸送特性も持ちます。

化学工学モジュールでは熱伝導率や拡散率等の異方性材料の特性や輸送特性を直接入力することができます。多孔質



【図1】  
排気ガス中の有害化学種を低減するために使う  
モノリシック反応装置内の温度分布と流線

媒体流れ用のアプリケーションを使って多孔質モノリス構造の異方性透過率を定義することもできます。

### モノリシック反応装置内の温度分布

図1はモノリシック反応装置の均質モデル内の温度分布を示しています。この場合、化学工学モジュールでは気体と固体構造に対する熱バランスが個別に定義されています。2相間の伝熱はそれぞれの相に対する熱バランス内ではソースまたはシンクとして直接入力され、流速と局所温度の任意の関数として定義できます。モノリス内のチャンネルに方向性があるため、必要な異方性特性を定義するためのGUIも用意されています。

図2はモノリス内固相の熱バランスと異方性伝導率のための入力ダイアログボックスを示しています。異なる方向の伝導率に対応する編集フィールドに値を入力します。

### 主な特長

- 温度/組成依存性を考慮するために任意に変更可能な係数を持つ定義済みの輸送方程式
- 完全に自由な反応速度論の定義
- 変数とその導関数のあらゆる関数プロットを可能とする対話的後処理機能
- 使いやすいGUI
- ドキュメント付属の広範なモデルライブラリ
- MATLAB・Simulinkと互換

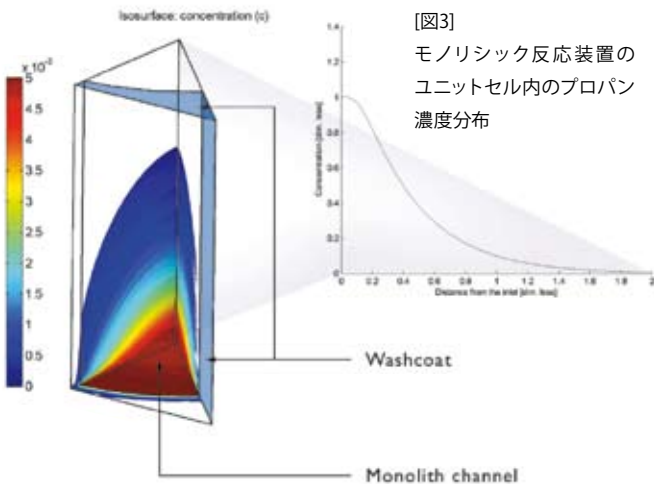


[図2]  
異方性特性はダイアログボックスの対応するフィールドに入力します。温度の任意関数が入力することができます。

## 不均質モデル

化学工学モジュールにより、前ページに示した擬似均質モデルに比べてより詳細なモデルでウォッシュコート構造と触媒装填を研究することができます。

下図はフォード自動車のGoralskiとChankoによる研究を再現したものです。彼らはCOMSOL Multiphysicsを使ってモノリシック反応装置内のプロパンの酸化を検証し、ここではユニットセルの形状に合った最適なウォッシュコート装填があります。この最適装填は触媒温度の関数です。



[図3]  
モノリシック反応装置のユニットセル内のプロパン濃度分布

## モデル方程式

COMSOL Multiphysicsは、非等温流れ用の運動量バランス方程式と連続方程式は定義済みです。化学工学モジュールには、多孔質媒体流れに対するダルシーの法則とダルシーの法則のブルクマン拡張が含まれています。これらのアプリケーションでは、粘度と濃度は反応装置内の温度、成分、せん断速度の任意関数とすることもできます。

反応種の質量バランスは対流-拡散方程式で与えられ、拡散係数の式は成分関数とする事ができます。濃溶液に対しては、ステファン・マクスウェルの方程式がそのまま使えます。反応速度論は関連変数の任意関数で記述することが可能です。

熱バランスは以下の方程式で与えられ、装置内の成分と温度の関数として温度/熱容量/エンタルピー依存を含みます。バランス式は1D、2D、2Dの軸対称、3Dの定常、時間依存のシミュレーションで利用可能です。目的に合った要素と定式化を使うことで、これらの式はCOMSOL Multiphysicsの数値ソルバで要求する精度で解くことができます。

運動量バランス

$$\nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) + \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \nabla p = \mathbf{F}; \quad \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0$$

質量バランス

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla c_i + c_i \mathbf{v}) = R_i$$

熱バランス

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (-k \nabla T + \rho C_p T \mathbf{v}) = Q$$

## COMSOL Multiphysicsと化学工学モジュール

COMSOL Multiphysics は形状記述、メッシュ化、問題定義、後処理に完全自由度を持つ統合GUI環境を提供します。このインタフェースと化学工学モジュール内の専用アプリケーションがCOMSOL Multiphysicsをモノリシック反応装置の理論的研究、最適化、設計のための理想的ツールとしています。