

Multiphysics Modeling & Simulation Software Case Study 2010

広告

COMSOL Multiphysicsが切り拓く 反応器設計およびシミュレーション

水や空気をきれいにするフィルターや反応器を設計する際には、2つの学問分野を横断する必要がある。それは「材料科学」と「機械工学」である。反応器を構成する材料の物性およびその機械的な制御と構造力学が組み合わせられてはじめて信頼性のある「システム」が完成する。国内外で個別の学問領域を超えた融合的な研究がなされている。その中核をなす技術がマルチフィジクスシミュレーションであり、様々な分野で利用されている。



COMSOL Multiphysics® Ver 4.0

ここでは自動車の排ガス触媒の研究例について紹介しよう。自動車触媒開発の課題は多岐にわたり、CO₂排出量削減、硫黄酸化物(SO_x)、窒素酸化物(NO_x)低減など、山積している。1970年代に実用化された排ガス触媒は、今日もその利用は続いており、その後の排ガス規制基準強化に伴い触媒の使用量は増加し、コスト・性能面からも、さらなる技術の向上のための新技術の開発・アプローチが望まれている。

その自動車は排ガス触媒における化学反応の詳細を議論するには、反応物の吸着・脱離や化学結合の生成・解離といった、原子・分子レベルのふるまいの解析が必要であり、そこから活性化エネルギーと頻度因子から反応速度を算出することができる。COMSOL Multiphysicsではこれらのパラメータはデータベース化されており化学工学の問題をシームレスに解くことができる。

しかしながら、化学反応式を解くだけでは触媒反応器設計に必要な項目である流体・伝熱・構造の問題が反映されず、反応器の耐久性や浄化性能を正確に議論することができない。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環境を提供されており、このインタフェースと化学反応工学モジュール内の専用アプリケーションによりCOMSOL Multiphysicsが、反応器の理論的研究、最適化、設計のための理想的のツールであるといえる。

◆適用例 1 モノリシック反応装置設計

モノリシック反応装置設計への応用例を紹介しよう。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、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る。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る。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を持つ。化学反応工学モジュール

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、多孔質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る。

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る。この場合、化学反応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る。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る。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も用意されている。化学反応工学モジュールにより、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もできる。



図1
排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濃度

◆適用例 2： ナノスケール科学とのマッチング マルチフィジクス・マルチ スケールシミュレーションへ

いまや実スケールのシステムを対象する機械工学といえども、ナノスケールの科学は無視のできない領域となっている。ナノレベルの科学で制御されたさまざまな機能性材料を実スケールのシステムに組み込み活用されることはもはや珍しいことではなくなった。先の例で示す問題は1メッシュサイズがせいぜいミリメートルオーダーの科学であり、ナノレベルで起こる問題を取り入れることは難しい。そこには学問の壁があり反応器設計開発の問題の難しさはここにあると考える。ここでは、ナノレベルで制御された触媒の反応性をシュレディンガー

方程式を解くことで予測し、その結果を実スケールの問題につないだ研究例を紹介する。ナノレベル計算の詳細はここでは省略するが、触媒金属粒子径が(A)10nm、(B)1.0nm、(C)0.5nmと異なるプラチナ触媒を用いた場合の反応パラメータを分子シミュレーションから算出すると、CO浄化性能はA<B<Cの順に良くなることがわかった。このナノレベルの科学から予測される性能向上は実際の系で反映されることは少ない。低温ではこの性能差は実スケールでも観測されるべき現象であるが、実際のエンジン動作温度レベルではあまり性能差がでないこともわかった。その理由は実スケール触媒構造にある。それは先に述べた流体・伝熱・構造の問題を検証していないことによる。

これらの検証はCOMSOL Multiphysicsが提供している簡単なサンプルを用いることで行うことができる。化学反応に関わるパラメータは前段で述べた触媒A、B、Cの値を用い、図2に示すようなストレートチャンネルの壁面に触媒塗布したモデルでの反応シミュレーションを試みた。ここでは200℃におけるCO酸化反応について紹介する。図2ではチャンネル内でのCO濃度を濃淡で示しており、A、B、Cの触媒でも出口ではほぼ浄化していることがわかる。この結果は、この温度での見かけの触媒性能はA、B、Cとも同じであることを意味している。しかしながら反応速度の大きいCの触媒では触媒入口付近で反応が終了していることがわかり、使用する触媒量の低減、低コスト化への指針を得ることができた。

図3に排ガス触媒のマルチスケールモデルを示した。触媒反応器の設計はまさに科学の結集であり、個別の学問領域を超えがこの図からわかる。物理・化学・機械・材料とそれぞれの領域のさらなる深化を目指すことも重要であるが、真に必要なのはそれらの融合であり、COMSOL Multiphysicsと専門分野別モジュールを用いることでその可能性を大きく向上させることは言うまでもないだろう。

A3

COMSOL

www.comsol.com

COMSOL Multiphysicsは、COMSOL社の登録商標です。

*その他の登録の製品、サービスは各社の商標または、登録商標です。

©2010 COMSOL AB. 日本支社: 〒101-0047 東京都千代田区日野1-5-1日野内町日野 TEL: 03-5322-1040 FAX: 03-5322-0828

KESCO KISOKU ENGINEERING SYSTEM

COMSOL Multiphysics 4.0 © 2010 販売: <http://www.kesoco.co.jp/>