COMSOL Multiphysics Ver.5.2　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

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

2015 11.24

１．化学反応工学モジュールの概要

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

化学、プロセス産業内の全てのユニットオペレーションを完璧に

化学反応器、ろ過装置、ミキサや他のプロセスの最適化は、化学反応工学モジュールを使用して実現可能になります。そのモジュールには、表面上や固相内の気体、流体、多孔質媒体もしくは全てのコンビネーションなどあらゆるタイプの環境における任意の化学速度が分析可能な材料輸送や伝熱のシミュレーションツールが含まれています。皆さんの周囲の環境に密接な”プロセスユニット”や”化学反応”などが関係している全ての化学的ファセット、プロセス産業、そして環境工学にいたるまでを完璧にカバーすることができます。

化学動力の対流と拡散

化学反応工学モジュールは、低濃度や濃縮液内における材料輸送を定義した直感的ユーザインタフェースや化学種の任意数の対流、拡散、イオン移動を介した混合物を含んでいます。これらは、アレニウス方程式で容易に定義することが可能で、可逆、不可逆、平衡反応速度の定義との連成が可能です。また動力学の速度濃度や温度の影響をうける任意の速度則とも連成が可能です。化学反応を定義するインタフェースは、化学式として分かりやすく、また方程式に関しては、まるで紙の上に書いているように入力することが出来ます。COMSOL は、質量作用の法則を使用して適切な反応式を設定します。この反応式は、ご自身の動力式に変更や訂正を行うことが可能です。それらが均一なのか不均一か、発生場所がバルク内もしくは表面なのかなどには関係なく、反応式中の化学量論は自動的に物質とエネルギーバランスを定義します。

~~~~~~

化学反応工学シミュレーション用の解析オプションです。

輸送現象の完成

外部ソースの熱力学プロパティを計算するツールは、化学反応工学モジュール内に含まれており、材料輸送、化学反応器への伝熱やエンタルピーバランスの連成は補強されます。運動量輸送を定義するユーザインタフェースもまた、プロセス輸送現象の完全定義を実装
~~~~~~

することができます。ナビエ‐ストークス方程式、ダーシーの法則、ブリンクマン方程式により定義される層流、多孔質メディアフローも含まれます。ご自身のモデリングを CFD Module もしくは Heat Transfer Module と連成することにより、乱流、多相流、非等温流、放射伝熱を実装可能です。

化学反応プロセス最適化の不可欠さ

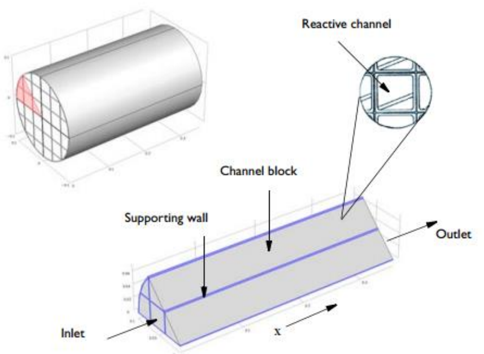
化学反応工学モジュールは、従事している工程内で材料輸送や化学反応が不可欠な化学、工程、電力、薬学、ポリマーそして食品の産業に携わるエンジニアや化学者たちに応用可能になっています。ラボで実装されるチューブのテスト解析から工場設備内の化学反応の徹底的調査に至るまでのアプリケーションを解析可能なツールが搭載されています。すでに内蔵されたパラメータ推測機能と実験データの比較を使用しながら化学動力を正確に定義するため、化学動力は基本的には管理された環境の中でシミュレートされます。化学反応工学モジュールは、個別解析のために数多くの搭載済み反応器タイプを提供します。

＊回分式反応器と半回分式反応器
＊連続攪拌槽型反応器（CSTR）
＊栓流反応器

これらは、等温、非等温、そして断熱状態と同様に恒量や一定容積の適切な定義も全て提供します。工程環境にある最適化動力との連成に最適で、このシンプルなモデリングによりシステムの理解を深めることができ、また無数のオペレーティングコンディションのシミュレーションの実現を可能にします。全ての知識を終結し上記を実現した次のステップは、ユニットデザインの最適化です。そして、完全２Ｄの線対称もしくは３Ｄモデリングを介した工程状態を微調整します。Generate Space-Dependent Model の特性は、システムの 流体や化学反応速度とともに物質とエネルギーバランスとも完全連成が可能だということです。

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.15 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化学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。別の方法として、電磁波周波数領域を選択し、追加ボタンを押す方法があります。

４．スタディをクリックします。

５．プリセット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フ¥Chemical_Reaction_Engineering_Module¥Tutorials をブラウズし、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*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_av*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_NO_in*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。

変数

名前	式	単位	説明
S	re.r_1/re.r_2		選択率
a	A0*exp(-E0/(R_co⋯	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

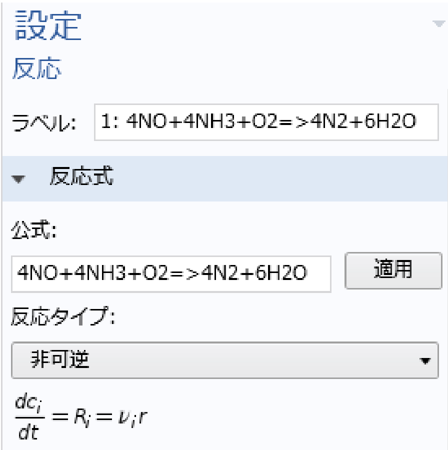
4NO+4NH3+02=＞4N2+6H20 という式を入力します。

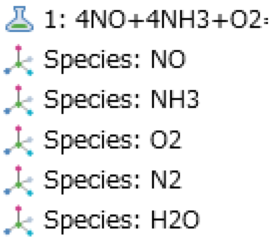
3．適応をクリックして、各科学種に対して反応と

化学種のノードを与えます。

4．モデルビルダにおいて 4NO+4NH3+02=＞4N2+6H20

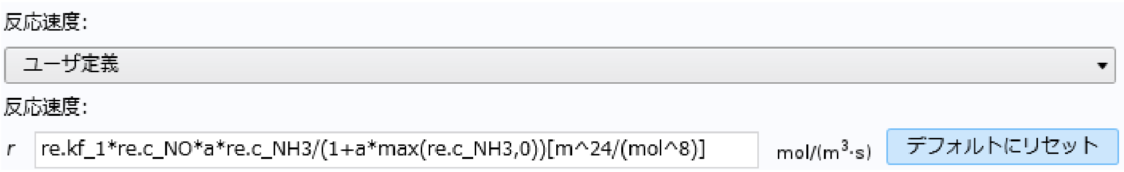
ノードをクリックします。





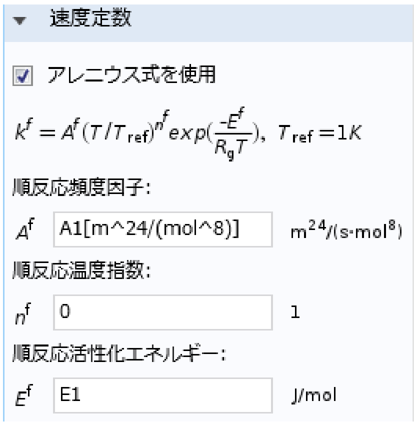
5. 反応速度の設定においてユーザ定義を選択します。そして、入力欄に

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。



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 、n^f に 0、E^f に E1 と入力します。



・反応 2

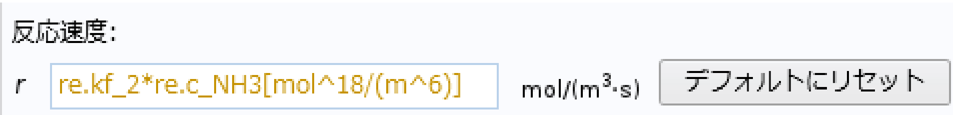
1. 反応工学ツールバーにおいて、反応をクリックし、NH3 の酸化の 2 次式を追加します。

2. 反応の設定において、反応式の入力欄に 4NO+4NH3+O2=>4N2+6H2O という式を入力します。(コピーペーストします)

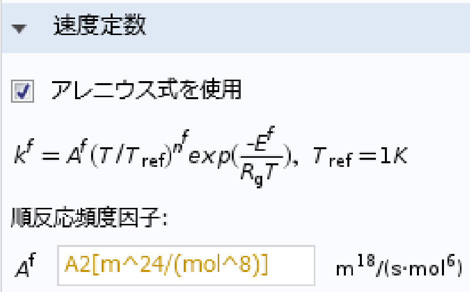
3. 適応を選択します。

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 、n^f に 0、E^f に E2 と入力します。

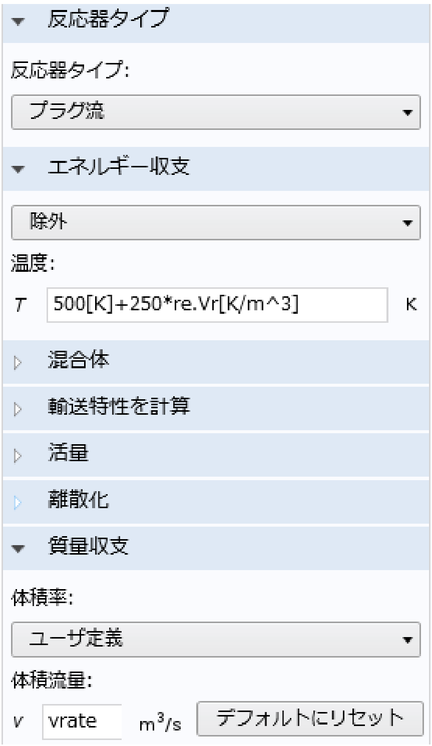
反応工学インターフェイス-反応速度の入力

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反応器の設定で、反応器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。



・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。

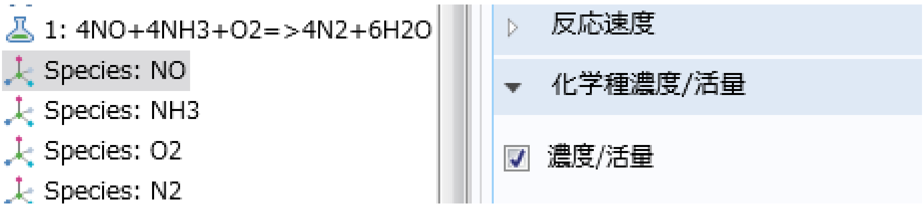
化学種	モル流量 (mol/s)
H2O	F_H2O_in
N2	F_N2_in
NH3	F_NH3_in
NO	F_NO_in
O2	F_O2_in

・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. 化学種濃度と活量のボックスにチェックします。



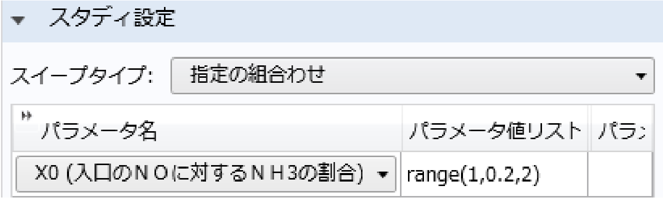
スタディ 1

・パラメトリックスイープ

１．モデルビルダでスタディ１を右クリックし、パラメータスイープを選択します。

２．スタディ設定の下で、追加ボタンをクリックします。このとき、パラメータ名欄に X0(Ratio NH3 to NO at inlet)を選びます。

3. パラメータ値の欄に range(1,0.2,2)を入力します。



・解 1

1. スタディーツールバーにおいてデフォルトソルバーをクリックします。

2. ソリューション 1 を展開し、プラグ流ソルバ 1 を選択します。

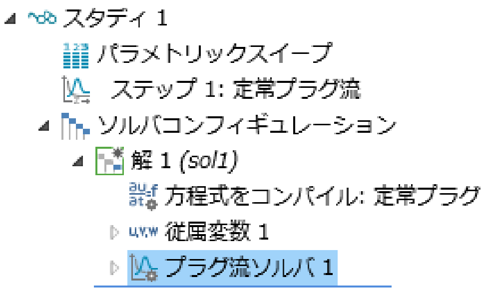
3. 設定ウィンドウにおいて、絶対トレランスの欄において 1e-6 を入力します。

・ステップ 1：定常プラグ流

1. スタディ 1 において、ステップ 1：定常プラグ流を選択します。

2. 設定ウィンドウでスタディ設定に行きます。相対トレランスを選択し、入力欄に 1e-7 と入力します。

3. スタディのツールバーで計算をクリックします。



結果　入口反応速度

・コピー

1. スタディ 1 のソルバーコンフィグレーションにおいて、パラメトリック解 1 を右クリックして、解 1 からコピー1 を選択します。

2. ラベルに動特性と入力します。

・モル流量

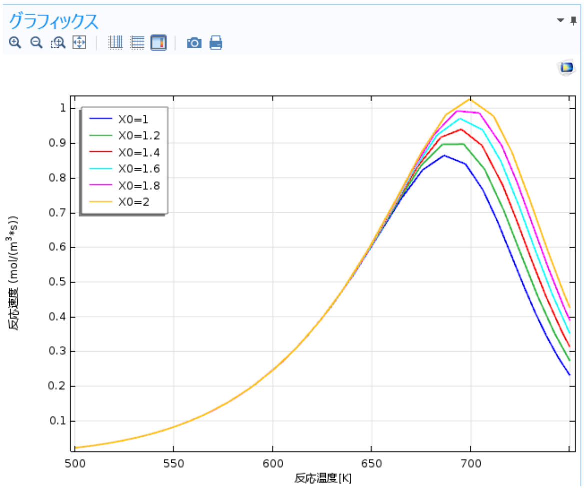
1. モル流量を右クリックして重複を選択します。そのラベルを反応速度に変更します。

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 軸ラベルを温度[K]に変更します。



6. レジェンドにいき、

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 comp1.re.r_1 に変更します。

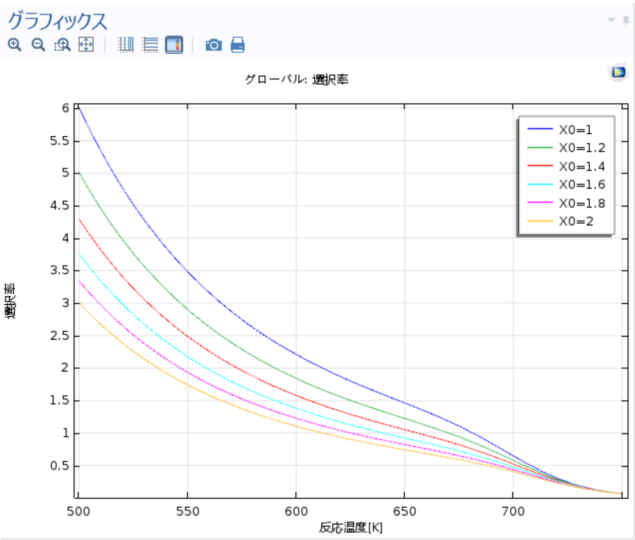
10. カラーリングおよびスタイルにいき、幅を 2 にする。

11. レジェンドにいき、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