

三元触媒の反応モデルの最適化

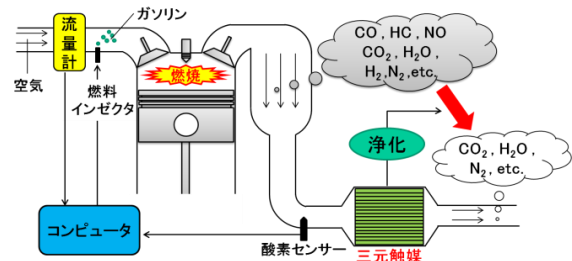
Optimization of Reaction Models in a Three-Way Catalyst

研究背景・目的

<背景>

ガソリンエンジン用排ガス浄化システムには三元触媒コンバータが使用されている。

近年の三元触媒は酸素貯蔵効果を持つセリアを含んでおり、複雑な反応構造をしている。

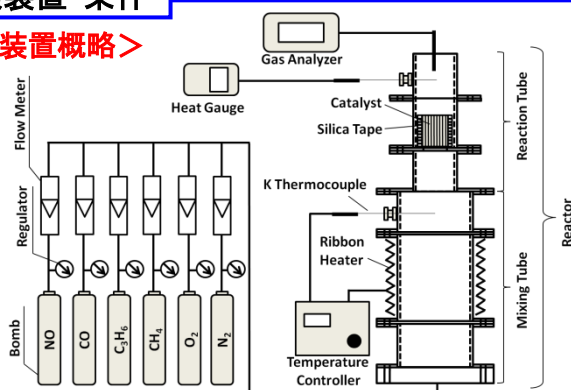


<目的>

1. 三元触媒の反応モデルの構築
2. 反応モデルに含まれるパラメータの最適化

実験装置・条件

<実験装置概略>



<流入ガスの成分条件> (理論空燃比14.8)

| Gas Type | O2 | CO | CH4 | C3H6 | NO | N2 |
|---------------------|-------|------|-------|------|------|--------|
| Flow[L/min] | 0.259 | 0.2 | 0.004 | 0.04 | 0.06 | 19.637 |
| Concentration [ppm] | 12822 | 9901 | 198 | 1980 | 2970 | 972129 |

初期条件を基準に、O₂流量を±0.14L/min(空燃比:±0.4)変化させて、各成分の浄化率を測定する。

計算モデル・最適化結果

<反応式>

1. $CO + 0.5O_2 \rightarrow CO_2$
2. $C_3H_6 + 4.5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 3H_2O$
3. $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$
4. $CO + NO \rightarrow CO_2 + 0.5N_2$
5. $C_3H_6 + 9NO \rightarrow 3CO_2 + 3H_2O + 4.5N_2$

<反応速度式>

$$R_1 = \frac{k_1 C_{CO} C_{O_2} \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right)}{G}$$

$$R_2 = \frac{k_2 C_{C_3H_6} C_{O_2} \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right)}{G}$$

$$R_3 = \frac{k_3 C_{CH_4} C_{O_2} \exp\left(-\frac{E_3}{RT}\right)}{G}$$

$$R_4 = \frac{k_4 C_{CO} C_{NO} \exp\left(-\frac{E_4}{RT}\right)}{G}$$

$$R_5 = \frac{k_5 C_{C_3H_6} C_{NO} \exp\left(-\frac{E_5}{RT}\right)}{G}$$

$$G = (1 + K_1 C_{CO} + K_2 C_{C_3H_6})^2 (1 +$$

$$K_3 C_{CO}^2 C_{C_3H_6}^2) (1 + K_4 C_{NO})$$

$$K_i = k_{iG} \exp\left(-\frac{E_{iG}}{T}\right) \quad i = 1 \dots 4$$

<最適化方法>

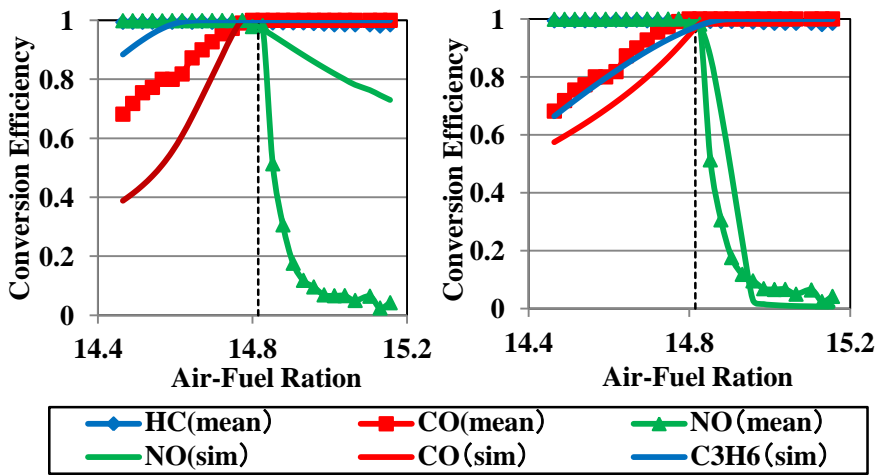
Genetic Algorithm (遺伝的アルゴリズム)

遺伝子の自然淘汰を模擬したアルゴリズムで、選択・交叉・突然変異を繰り返すことでその環境に最適なデータを導き出すもの。(多峰性多変数関数に有効とされている。)

<反応パラメータの最適化結果>

参考文献のパラメータを使用*

最適化後のパラメータを使用



*K. Ramanathan, C. Sharma, "Kinetic Parameters Estimation for Three Way Catalyst Modeling"

まとめ

1. 今回用いた反応速度式によって三元触媒の反応モデルを構築できる見込みがたった。
2. Genetic Algorithmを用いることで反応モデル内のパラメータを最適化することができた。