

材料設計を含めた Reverse water gas shift chemical looping プロセスの設計

(明大院理工¹⁾) ○岩間 稜¹・○金子 弘昌¹

Design of reverse water gas shift chemical looping process with consideration of material design (¹Graduate School of Science and Technology, Meiji University) ○Iwama Ryo,¹ Kaneko Hiromasa,¹

In recent years, an approach to collect and recycle carbon dioxide which is one of the causes of the global warming, have been attracting attention. In this work, we focused on the reverse water gas shift chemical looping (RWGS-CL) reaction. The RWGS-CL reaction proceeds of two steps ($2\text{CO}_2 + \text{MO}_{x-1} \rightarrow 2\text{CO} + \text{MO}_x$, $2\text{H}_2 + \text{MO}_x \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{MO}_{x-1}$) via a metal oxides (MeOx) as an oxygen carrier. However, RWGS-CL process is difficult to be controlled because the RWGS-CL reaction repeats thermochemical redox cycling.

In conventional process design, process conditions of the target plant are optimized after the synthesis conditions of the target material are optimized. Therefore, process design is not considered in material design.

In this study, we will develop a RWGS-CL process which takes material design into account by using machine learning.

Keywords : Bayesian optimization; Machine learning; Material design; Process design; Reverse water gas shift chemical looping

近年、地球温暖化の原因の一つである二酸化炭素を回収し資源化する取り組みが注目されている。本研究ではその中で reverse water gas shift chemical looping (RWGS-CL) 反応¹⁾に着目した。RWGS-CL 反応は、金属酸化物 (MeO_x) を酸素キャリアとして、酸化 ($2\text{CO}_2 + \text{MO}_{x-1} \rightarrow 2\text{CO} + \text{MO}_x$) と還元 ($2\text{H}_2 + \text{MO}_x \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{MO}_{x-1}$) を繰り返すことにより進行する。酸化還元反応を時間的に分離することで、CO と H₂O の逆反応が生じず、高い反応効率を達成することができる。しかし、酸化還元を繰り返すため、反応プロセスのコントロールが難しくなる。

また、これまでのプロセス設計では、材料設計で目標とする材料の合成条件を見つけた後に、目標とするプラントのプロセス条件を探索している。そのため、プロセス設計において材料設計は考慮されていない。そこで本研究では、RWGS-CL プロセスを対象に、機械学習とプロセスシミュレーションにより材料設計を考慮したプロセス設計を行った。設計方法および結果の詳細については当日報告する。

- 1) Recent Advances in Supported Metal Catalysts and Oxide Catalysts for the Reverse Water-Gas Shift Reaction. X. D. Chen, Y. Chen, C. Y. Song, P. Y. Ji, N. N. Wang, W. L. Wang, L. F. Cui, Front. Chem. 2020, 8, 709.