

## 膜モジュール設計シミュレーションシステムの開発 ( 2 )

西村 拓朗、船津 公人

東京大学大学院工学系研究科 (〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1)

【緒言】次世代クリーンエネルギー源としての水素利用社会を実現するという社会ニーズに対して、エネルギー原単位に優れた高効率な水素製造プロセスを実現する必要がある。我々は、メタンの水蒸気改質による水素製造に際して、高純度の水素を効率よく取り出すための分離モジュールの設計に関するシミュレーションシステムを開発した。それは、水素分離膜モジュールの設計における構造パラメータ（寸法、膜配置等）を入力データとして計算流体力学（CFD）により分離膜モジュールの水素分離性能をシミュレートし、その評価結果を指標として遺伝的アルゴリズム（GA）を応用して膜モジュールの構造パラメータを最適化するシステムである。

【方法】膜モジュール設計用の CFD プログラムは、商用 CFD パッケージである CHAM 社の PHOENICS プログラムに、膜分離における透過現象をトレースするモジュールを組み込むことで実現<sup>[2]</sup>した。システムの実行時間肥大化に対して、以下の対策により、大幅な実行時間の短縮に寄与させた。

- (1) エレメント断面近似形状の簡素化
- (2) モジュール鏡面構造の活用
- (3) 複数ノード活用による GA 運用の並列化
- (4) CFD 結果のデータベース活用による GA の効率化

【結果】図 1 の円筒形分離モジュール構造例の場合、モジュール断面に対して直径 3 mm のエレメントが採りえる配置を図 2 に示す。このようにエレメントを配置させた場合の分離膜モジュールの性能（水素回収率）をシミュレーションした結果が図 3 である。水素回収率は、21 本配置でピッチ 5mm のものが最大値を示すが、膜面積換算で 15% 少ない 19 本配置でピッチ 6mm のものもほぼ同等の性能を示す。また、13 本配置の四角格子の配置と、三角格子の配置を比べると、四角格子の配置をとった場合が有利な結果となっている。9 本配置では最適ピッチが認められ、モジュールの壁面に近接しすぎるエレメントは、水素回収に寄与しにくくなることが確かめられた。また、ピッチ間隔が狭すぎると、中央部に配置されたエレメントの水素回収に対する寄与が低くなることも明確となった。まとめると、エレメントの配置間隔がモジュールの性能に与える影響がかなり大きく、適切な配置間隔を取ることが重要である。

### 参考文献

- [1] 西村拓朗, 船津公人, 膜モジュール設計シミュレーションシステムの開発, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **4**, 44(2005)
- [2] H. Takaba, T. Nishimura, K. Funatsu, S. Nakao, *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.*, **29**, 3279-3282(2004)
- [3] 高羽洋充, 中尾真一, ガス分離膜モジュール設計用 CFD 計算モジュールの開発, 化学工学会年会研究発表講演要旨集, 640(2003)

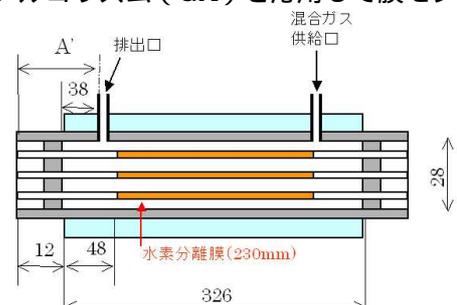


図 1 . 分離膜モジュール構造例

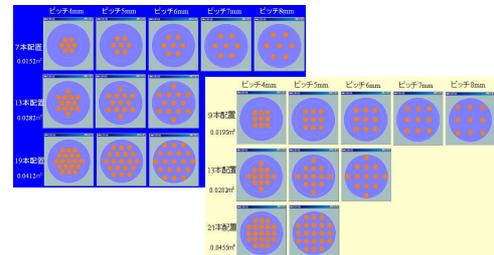


図 2 . 分離エレメントの配置例

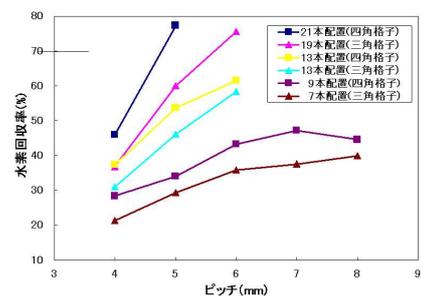


図 3 . エレメント配置間隔と水素回収率の関係