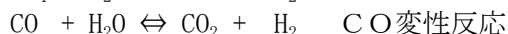


### 1. はじめに

水素は、基幹化学物質の合成原料や石油精製、石油化学等における反応剤としての利用など、広範な産業分野において大量に使用されている。さらに、次世代クリーンエネルギー源として水素利用エネルギーシステムに関心が集まり、水素を燃料とする燃料電池システムの実用化に対する期待が高まってきた。この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の開発が急がれている。

本研究は下記に示す天然ガス(主成分:メタン)の水蒸気による改質反応に対応したものである。



この水素製造プロセスの技術課題は、水素の生成工程と分離・精製工程の独立に起因する熱効率問題や、全体システムの複雑さによる装置の大型化であるが、水素生成工程と水素分離工程を一体化することにより、反応温度の低減(500℃)や圧縮動力の低減が可能となり、プロセスの簡素化による小型化や、水素製造時のエネルギー効率が大幅に高まることが期待できる。

本研究では、多孔質無機膜を対象とした500℃以上での化学反応プロセスを利用して水素生成と水素分離を一体的に行うことを特徴とする高効率高温水素分離膜のモジュール化技術開発に際して、分離効率の向上を目的とする膜モジュール構造最適化システムの開発を進めている。

### 2. システムの概要

ガス分離膜モジュール構造設計支援システムは、①分離膜の集合体であるモジュール構造データを創出する部分、②モジュール構造と分離条件の最適化を行う部分、③計算流体力学(CFD)シミュレーションを実行する部分から構成される。

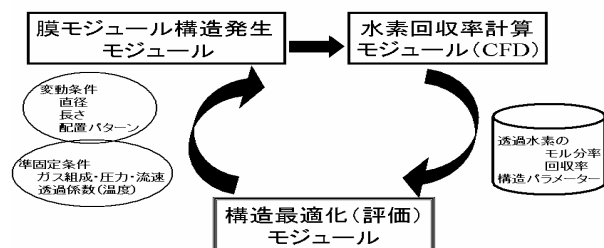


図1 水素分離モジュール設計における最適化支援システムの概念図

### 2.1 膜モジュール構造データの創出

GUIにより目的とするモジュール構造の座標データを発生し、水素回収率計算用入力ファイルを作成する。モジュール外形は円筒タイプと四角柱タイプに対応、分離膜エレメントの配置は三角格子・四角格子に対応、一般の多管集工作物(分離・抽出・熱交換器等)のエレメント配置座標が出力可能であり、CADやCFDエンジンの入力ファイルを出力する。

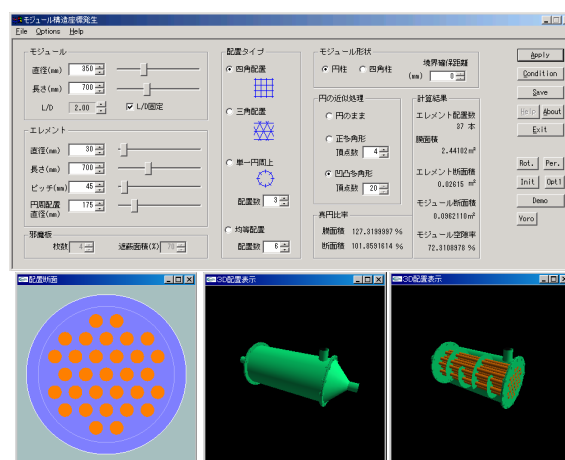


図2 モジュール構造データ生成メイン画面

### 2.2 水素回収率計算

汎用計算流体力学(CFD)パッケージを応用し、モジュール構造創出部分から入力データファイルを受け取り、収束計算結果をファイル出力する。実際のモジュール構造を想定して、モジュール側壁(煙突状フランジ)からのガス流入・流出や、モジュール内部の邪魔板によるガス拡散向上と滞留等の影響も反映させた。

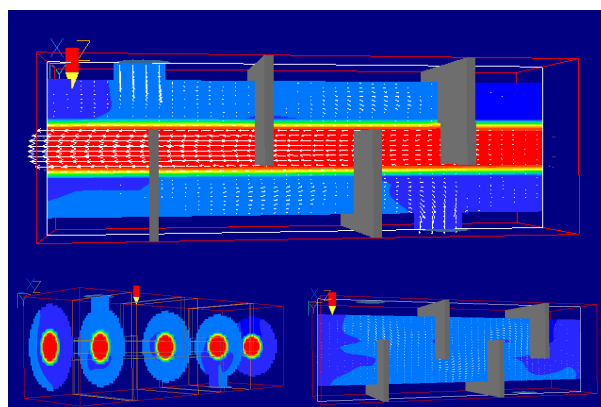


図3 CFD計算結果のグラフィック表示

\*funatsu@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

## 2.3 分離膜モジュール構造の最適化

遺伝的アルゴリズムにより提案された構造パラメーターセット（水素回収率計算の入力データ）と出力結果をデータベースに蓄え、次世代の水素回収率計算のための構造パラメーターセットを提案する。これを繰り返して分離膜モジュールの構造パラメータを最適化する。

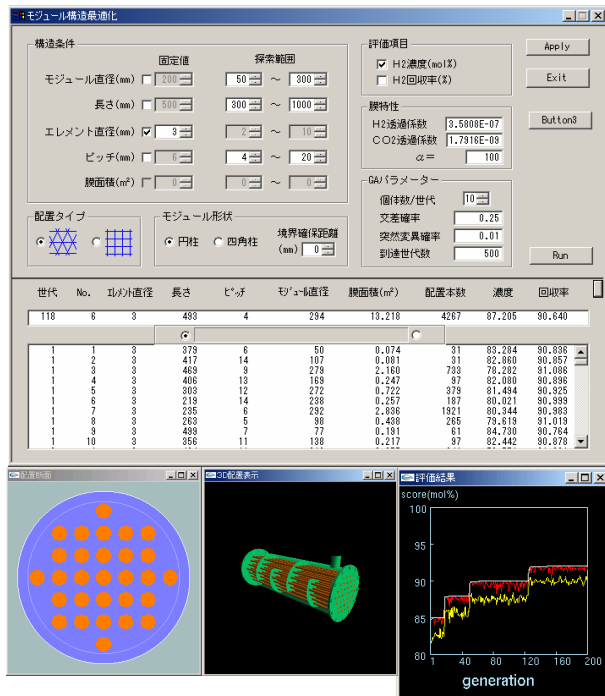


図4 分離膜モジュール構造の最適化実行画面

## 3. 結果と考察

今回開発した構造最適化エンジン（遺伝的アルゴリズムの応用）の性能確認のため、CFDによる水素回収率の代わりに分離膜の表面積を適応値として利用し、各条件において表1の探索範囲で500世代（20個体/世代）まで実行させ、最適化のための運用検討を行った。

### 3.1 エリート戦略の効果

遺伝的アルゴリズムの処理の中で、次世代のパラメーターセットを決定する際に、前世代の最高適応値を示したパラメーターセットを必ず引き継がせるというエリート戦略を用いた場合の効果を確認した。（表2）エリート戦略をとらずに交叉

表1 膜モジュール構造最適化の探索範囲

パラメーター	範囲(mm)	Step
モジュール直径	50~300	250
モジュール長さ	300~1000	700
エレメント直径	3(固定)	1
エレメントピッチ	4~20	16

交叉確率:0.25(一点交叉) 突然変異確率:0.01  
 グレーコード表現採用、 ルーレット採用

と突然変異のみに頼った場合は最適化効率が悪く、500世代まで実行しても理論最大適応値に至らない場合があることから、当問題解決にはエリート戦略の採用が必須と判断した。

表2 エリート戦略の効果

Run	最大適応値の獲得世代(カッコ内は個体番号)	
	エリート戦略なし	エリート戦略あり
1	369( 9)	74(12)
2	283(16)	262(13)
3	464(11)	166(13)
4	427( 7)	45( 9)
5	497(10)	106( 8)
av.	408	131

### 3.2 初期(第一世代)データセットの重要性

表2において、実行毎に到達速度が異なるのは、第一世代の構造パラメーターセットの与え方（乱数により発生）に基づくことが判明した。よって、作為的操作を排除した上で妥当な初期データセットを提案するアルゴリズムを構築した。

### 3.3 計算量負荷の軽減効果

表1の範囲で構造パラメータの全空間探索を実行すると280万回のCFD計算が必要で、320年の連続計算量に相当する（1時間/1回とする）。遺伝的アルゴリズムの有効利用により、50世代の計算で最適化が達成できるとすると計算負荷は約1/3000（40日間の計算量）となり、大幅な効率化が達成できた。

## 4. まとめ

遺伝的アルゴリズムによる分離膜モジュール構造最適化のためのエンジンが、モジュール形状やエレメントのサイズや配置に関して効率よく最適化できることを確認した。今後、水素分離膜モジュールの運転効率最適化における関連パラメーターの包括的な最適化を進めるとともに、遺伝的アルゴリズムにおけるの運用の柔軟性を活用して、更なる効率化を追求する。

## 5. 謝辞

本研究は、「(革新的温暖化対策技術プログラム) 高効率高温水素分離膜の開発プロジェクト」の一環として、NEDOから委託を受けて実施した。

### 参考文献

- [1] H. Takaba, T. Nishimura, K. Funatsu, S. Nakao *International Union of mterials Reserch Societies-ICAM2003(8th)Yokohama*
- [2] 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