

講演概要

目覚ましい発展をみせるマイクロ化学技術の分野において、マイクロ化学プロセスの設計と運転に関する検討を進めるための基盤となるプロセスシミュレータをVM上で開発する取り組みについて紹介する。また、昭和電気株式会社および三菱化学エンジニアリング株式会社と共同で実施したプロピレン冷凍機吐出圧制御性解析の取り組みについて紹介する。

1. マイクロ化学プロセスシミュレーション

マイクロ化学プロセスに関する研究では、数値流体力学(CFD)が重要な役割を果たす。しかし、CFDシミュレーションの計算負荷は膨大であり、マイクロ化学プロセスの最適設計や運転に関する検討を効率的に実施するためには、簡易モデルを利用する必要がある。しかし、従来の化学プロセスシミュレータでは、円管あるいは矩形流路内の層流に対する圧損やデバイス壁内の熱移動など、マイクロ化学プロセス特有の現象がモデル化されていない。そこで、Visual Modeler を利用したマイクロ化学プロセスシミュレータの開発に取り組んでいる。

本講演では、反応や熱交換など種々の目的に利用可能なプレートフィン型マイクロデバイスのモデル化とシミュレーションについて紹介する。プレートフィン型マイクロデバイスは入口・出口マニホールドと並列化されたマイクロチャンネルから構成され、図1に示すように、配管ユニットと分配・合流ユニット、さらに壁ユニットを用いて表現できる。なお、既存の配管モデルでは矩形流路内層流に対する圧損を取り扱うことができないため、新たにマイクロデバイス用配管モデルを開発した。また、壁内熱移動を考慮するための壁ユニットの導入が、マイクロデバイスのモデル化において極めて重要であることを指摘しておく。

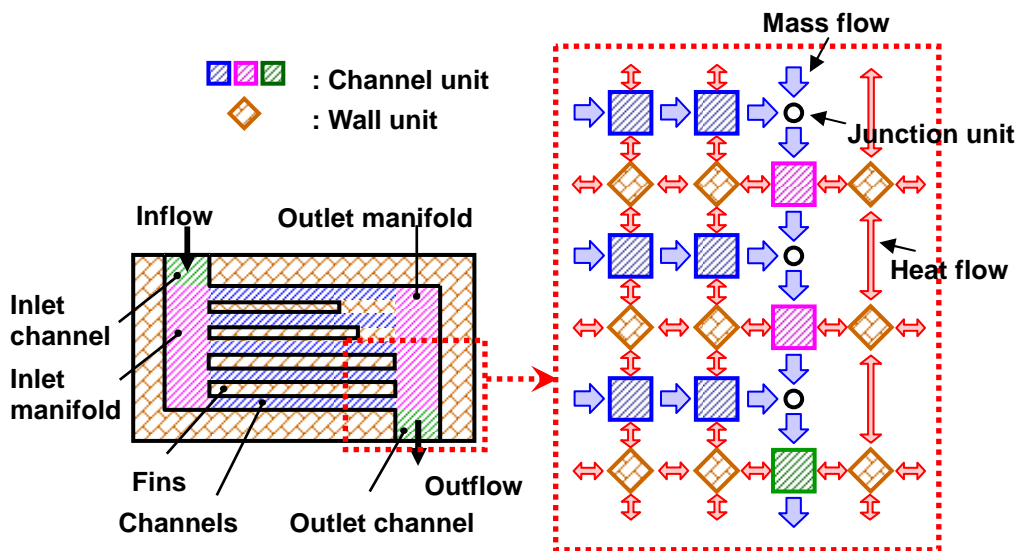


図1 プレートフィン型マイクロデバイスのモデル化

プレートフィン型マイクロデバイスを用いた反応および熱交換では、各流路での滞留時間を一定に保つことが望まれるが、流路で閉塞が発生すると、総流量を一定に制御する運転方法では滞留時間を一定に保つことができない。しかし、デバイス内差圧を一定に制御することによって、閉塞発生時の総流量は減少するが、閉塞していない流路での滞留時間をほぼ一定に保つことができる。差圧制御下における閉塞状況を想定し、並列化部分の圧損と非並列化部分の圧損の比が閉塞していない流路の流量に与える影響について調べた結果を図2に示す。開発したモデルの精度を検証するために、汎用 CFD ソフトウェア Fluent による計算結果と比較している。

並列化部分の圧損が相対的に大きいほど各チャンネルの流量は非閉塞時の流量に近くなる。また、マイクロ化学プロセスシミュレータと CFD の計算結果はほぼ一致しており、開発したマイクロ化学プロセスシミュレータの妥当性が確認できる。

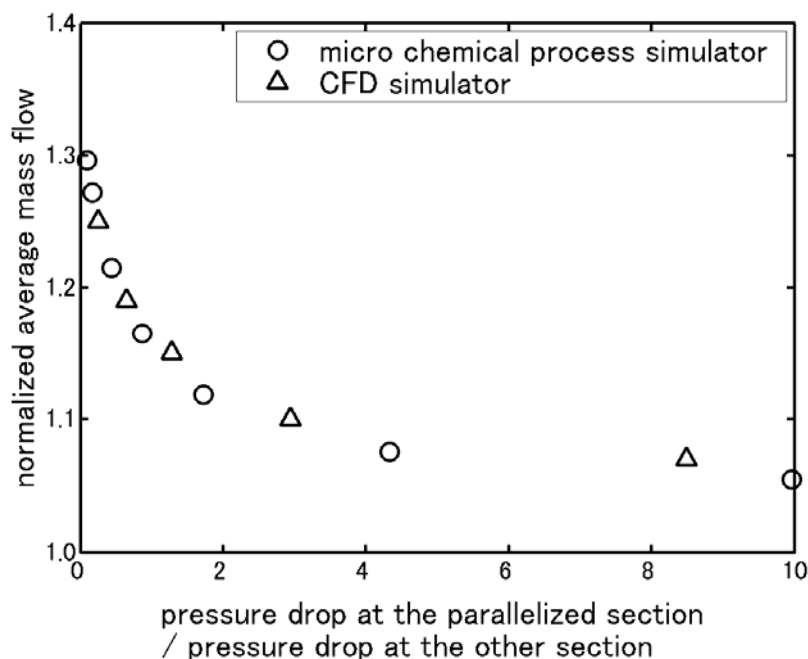


図2 閉塞発生時の圧損比と平均流量の関係  
(マイクロ化学プロセスシミュレータと CFD シミュレータの比較)

## 2. プロピレン冷凍機吐出圧制御性解析

昭和電工株式会社および三菱化学エンジニアリング株式会社と共同で実施したプロジェクトの契機は、古典的と思える連続蒸留塔の制御問題に関する検討だった。解析対象とした蒸留塔の概略を図3に示す。この蒸留塔では、蒸気は凝縮器へ向かう流れとバイパスラインを經由して還流槽へ向かう流れとに分岐している。凝縮器から還流槽への配管は還流槽の底部に接続されており、凝縮液はバイパスバルブ前後の差圧によって還流槽に供給される。海水を冷媒とする凝縮器は地上に設置されており、還流槽よりも低い位置にある。還流槽液面は留出バルブによって、塔頂圧力はバイパスバルブを操作して伝熱面積を変化させることによって制御されている。このプロセスでは、液面制御と圧力制御の干渉が非常に強いため、制御性改善が課題となっていた。

この課題について検討するため、Visual Modeler を利用して蒸留塔全体のモデルを構築した。この際、凝縮器と還流槽の位置関係とそれらの機器間で生じる逆流を正しく表現するために、オリジナルのユニット（現在では標準ユニットになっている）を作成した。

まず、凝縮器と還流槽の位置関係が制御性に及ぼす影響について検討した結果、還流槽の位置が低いほど制御性が良くなることが確認できた。しかし、その効果は小さく、外乱混入時に圧力および液面が整定するのに非常に長い時間を要するという結果が得られた。この原因を究明するために RGA 解析を実施した結果、還流槽の位置を低くするに伴い、プロセス動特性が変化し、例えば凝縮器と還流槽が同程度の高さに位置するような場合には、制御のペアリングを変える必要があることが明らかとなった。つまり、還流槽液面をバイパスバルブによって、塔頂圧力を留出バルブによって制御すべきとの結論が得られた。

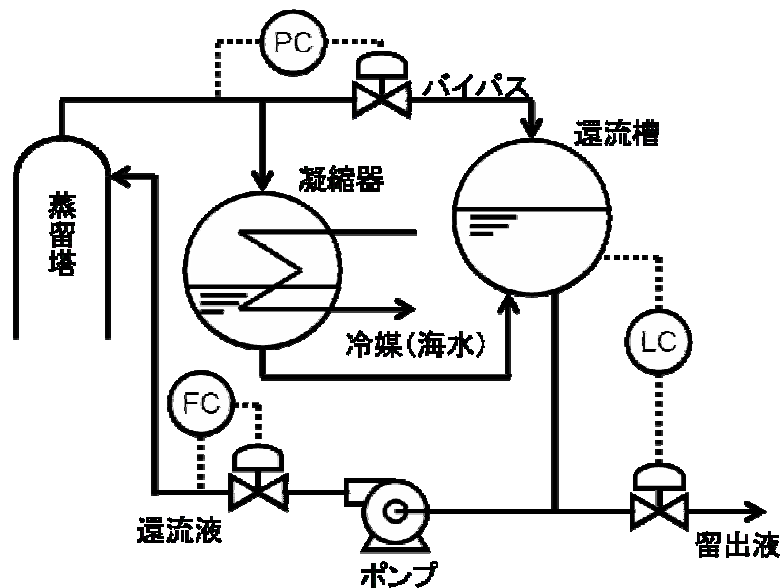


図3 解析対象の蒸留塔（塔頂部のみ）

このような解析結果を踏まえて、設備改善の方策について検討する中で、抜本的な解決のためには、解析対象となった蒸留塔の特性のみならず、同様な問題点を有するプロピレン冷凍機吐出圧の制御性について解析する必要があることが明らかとなった。そこで、京都大学で構築した蒸留塔モデルと三菱化学エンジニアリング株式会社で開発されたプロピレン冷凍機モデルを統合し、他のユニットモデルも加えて、大規模なプラントモデルを構築した。このモデルを用いた解析の内容と結果については、講演当日に紹介する。

#### 謝辞

マイクロ化学プロセスシミュレータは、主として藤岡徳君（京都大学修士2回生）によって開発されました。本講演の資料作成に際しても色々とお助けいただきました。ここに記して謝意を表します。

プロピレン冷凍機吐出圧制御性解析は、昭和電工株式会社、三菱化学エンジニアリング株式会社、および京都大学が共同で実施しました。共同で作業に携わった方々全員に感謝いたします。