

Title	Shape Design and Operation of Microreactors( Abstract_要旨 )
Author(s)	Tonomura, Osamu
Citation	Kyoto University (京都大学)
Issue Date	2015-07-23
URL	<a href="http://dx.doi.org/10.14989/doctor.r12950">http://dx.doi.org/10.14989/doctor.r12950</a>
Right	許諾条件により本文は2016-07-22に公開
Type	Thesis or Dissertation
Textversion	ETD

京都大学	博士（工学）	氏名	殿村 修
論文題目	Shape Design and Operation of Microreactors (マイクロリアクタの形状設計と操作)		
<p>(論文内容の要旨)</p> <p>本論文は、マイクロリアクタの形状設計手法と閉塞診断を考慮した装置構造設計と操作法について検討した結果をまとめたものであり、序論、結論と 7 章からなる。以下にその概略を記す。</p> <p>緒言では、既往の研究例をまとめ、課題を整理し、本研究の目的を述べている。</p> <p>第 1 章では、数値流体力学 (CFD) モデルの逐次利用による形状設計について検討した結果をまとめている。形状最適化のために、CFD シミュレーションルーチンの外部に、最適化のための形状の再設定と、その形状に対するメッシュ再生成を行う機能を付けることを提案し、プレートフィン型マイクロデバイスを対象として、マニホールド容積を最小化する自動設計アルゴリズムを提示している。</p> <p>第 2 章では、随伴変数法の利用による形状設計について検討した結果をまとめている。第 1 章で示したように、形状設定と数値流体力学シミュレーションを繰り返し行えば、望ましい形状を導出することができる。しかし、設計変数が増えるにつれて、形状をどう変化させるべきかの判断は容易ではない。そこで、全ての設計変数に対する評価値の感度を、流れの基礎方程式を満たす状態変数を求める計算を 2 度行うのと同程度の計算負荷で求めることができる随伴変数法を、マイクロ流路の圧力損失最小化問題に適用し、流路形状最適化問題を定式化している。そして、最適化の結果、U 字流路の湾曲部体積を一定値とした場合の最適形状における圧力損失が、通常の半円型構造と比べ、約 3 割低減できることを示している。</p> <p>第 3 章では、コンパートメントモデルを利用した形状設計について検討した結果をまとめている。対象を集中定数系で表現できる幾つかの要素 (コンパートメント) に分割することによって、要素間の物質・熱移動をこれまでの化学工学に関する収支式の考えに基づいてモデル化することができる点に着目し、コンパートメントのサイズを最適化することにより、形状最適化を行うアルゴリズムを開発している。そして、ケーススタディとして、発熱反応を伴うマイクロ流路の形状最適化問題を解き、流路形状最適化によりホットスポットの出現を抑制できることを示している。</p> <p>第 4 章では、差圧制御を用いた滞留時間制御について検討した結果をまとめている。並列化されたマイクロリアクタにおいて、閉塞時においても各リアクタの平均滞留時間を一定に制御する 1 つの方法として、差圧制御による並列部を操作する方法を提案している。そして、4 並列の模擬プラントを構築して差圧制御の有用性を実証すると共に、異常装置の取り外しから新しい装置の取り付けまでの間、他の系列については操作しなくても、あらかじめ定められた流量を維持可能であることを、実験により示している。</p> <p>第 5 章では、温度情報を用いた積層マイクロリアクタの閉塞診断について検討した結果をまとめている。マイクロリアクタで閉塞が発生した際、閉塞箇所に近い温度センサほど、温度測定値の変化は大きい。そのため、閉塞は最も大きな温度変化を示した 2 つのセンサの間に必ず存在する。この知見を用い、これら 2 つの温度センサの測定値の変化の比を用いて、それらの間にある段の閉塞を診断するシステムを提案している。そして、積層型マイクロリアクタへ適用した結果、積層数より少数のセンサで、</p>			

京都大学	博士（工学）	氏名	殿村 修
<p>各段の様々な度合の閉塞を診断できることをシミュレーションにより確認している。</p> <p>第 6 章では、総流量一定の条件下で、並列マイクロリアクタの閉塞診断手法について検討した結果をまとめている。ここでは、まず閉塞診断に適した分配部構造として、流体の分流部と、流体の合流部を備える分合式流体分配構造を提案している。そして、分合式流体分配装置を最適に設計することにより、2つの流量センサの流量変化ベクトルの方向により閉塞した流路を特定できることを明らかにしている。そして、4並列マイクロリアクタを対象に、本手法の有効性を実験的に確認している。</p> <p>第 7 章では、異常系列の設備更新も考慮した連続運転について検討した結果をまとめている。第 4 章において総圧力損失が一定の場合、正常なデバイスへの流量は変化しないようにできることを示した。本章では、この考え方と第 6 章で考案した閉塞診断手法を組み合わせることにより、閉塞装置の検出、特定、取り外しから新しい装置の取り付けまでの間、他の系列については操作しなくても予め定められた流量を維持可能であることを、シミュレーションと実験の両面から明らかにしている。そして、正常時等流量分配などを制約条件とし、閉塞診断性能を最大化する最適設計問題を定式化している。ここで、最適化変数は流体分配装置の流路抵抗と 2 流量センサの設置位置である。モデルとしては、物質・圧力バランス式からなる圧力損失コンパートメント連結モデルを用いている。</p> <p>結言では、本論文を総括するとともに、今後ソフトウェアとハードウェアの両面から研究開発を継続していく必要があることを示している。</p>			

## (論文審査の結果の要旨)

本論文は、マイクロリアクタの特徴を考慮した設計と操作の方法論に関する研究をまとめたものであり、得られた主な成果は以下の通りである。

- (1) 数値流体力学モデルの逐次利用による形状設計法の提案：数値流体力学シミュレーションと、最適化のための形状の再設定、およびその形状に対するメッシュ再生成を行う機能を組み合わせた自動設計アルゴリズムを構築した。
- (2) 随伴変数法を用いた形状設計法の提案：全ての設計変数に対する評価値の感度を、小さな計算負荷で求められる随伴変数法をマイクロ流路の形状最適化問題に適用し、最適化によりU字流路の圧力損失を約3割低減できることを示した。
- (3) コンパートメントモデルを用いた形状設計法の提案：コンパートメントのサイズの最適化により、形状最適化を行うアルゴリズムを開発した。そして、提案手法を発熱反応を伴うマイクロ流路形状最適化問題に適用し、ホットスポットを抑制する形状を提示した。
- (4) 差圧制御を用いた滞留時間制御法の提案：並列マイクロプロセスにおいて、流路抵抗バランスが崩れたとしても、正常リアクタの平均滞留時間を一定に制御できる差圧制御の利用を提案し、4並列の模擬プラントにてその有効性を検証した。
- (5) 温度情報を用いた積層マイクロリアクタの閉塞診断法の開発：2つの温度センサの測定値の変化の比を用いて、それらの間にある段の閉塞を診断するシステムを構築した。
- (6) 流量情報を用いた並列マイクロリアクタの閉塞診断法の開発：流体の均等分配法として分合式流体分配構造を提案した。そして、総流量一定、あるいは総圧力損失一定の条件下で運転されるケースに対して、提案した分流器流路サイズを最適に設計することにより、2つの流量センサのみで4から8流路の閉塞を診断する手法を開発した。
- (7) 設備更新を考慮した連続運転法の提案：差圧制御と流量情報を用いた閉塞診断法を組み合わせることで、閉塞装置の検出、特定、取り外しから新しい装置の取り付けまでの間、他の系列に影響を与えず実施可能な運転法を提案した。

このように本論文は、マイクロリアクタの特徴を考慮した設計と操作の方法論に関する研究結果をまとめたものであり、新規で有用な知見を多く含み、学術上、実際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成27年5月20日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。