

E105

粒子フィルタを用いたマイクロリアクタ状態推定システム

(京大工) (学) 加納 潤一・○(正)殿村 修*・(正)加納 学・(正)長谷部 伸治

1 緒言

副生成物の少ない化学合成や粒径の揃った微粒子の調製を可能にするマイクロリアクタの実用化に際して、モニタリングシステムの開発は必要不可欠である。センサを通じて得られた情報に基づき、マイクロリアクタの正常運転時からの逸脱を迅速に検知し、何が起きているのかを精度良く把握し、打つべき手を打つことが求められる。本発表では、管型マイクロリアクタ (TMR) を対象として、物理モデルに基づく状態推定システムの開発に取り組み、システム入出力の観測データから対象の状態を粒子フィルタ (PF) およびアンサンブルカルマンフィルタ (EnKF) により推定した結果について報告する。

2 管型マイクロリアクタ

Fig. 1 は TMR の概略図である。外管に冷媒、内管に反応流体が並流で流れ、(1)~(3) に示す逐次・並列の触媒反応が起こるものとする。各反応は 1 次発熱反応、反応速度定数 k_i はアレニウス型の式で表されるものとする。鍵成分として A および P を選択し、物質・熱収支式を立て、真のモデルと見なす。Table 1 は主な設定条件である。

3 流路閉塞による流速変化の推定

TMR の差圧一定の下、閉塞が起こると反応流体の流速 v が小さくなり、反応時間が変化してしまう。流れ場にて

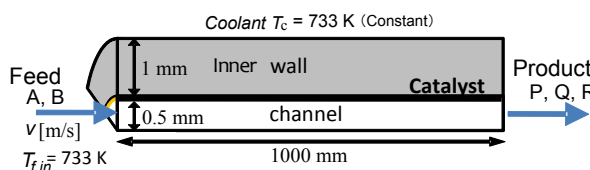
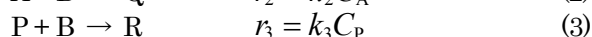
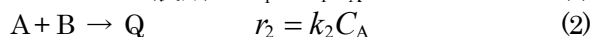
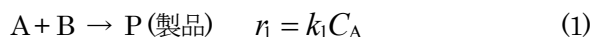


Fig. 1 Schematic diagram of tubular microreactor (TMR).

Table 1 主な設定条件

	反応流体	冷媒	壁
成分 A 入口濃度 [mol/m ³]	4.0	-	-
成分 P 入口濃度 [mol/m ³]	0.0	-	-
平均流速 v [m/s]	1.0	-	-
拡散係数 [m ² /s]	1.0×10^{-5}	-	-
粘度 [Pa s]	2.9×10^{-5}	-	-
比熱容量 [J/(kg K)]	1.1×10^3	1.1×10^3	5.0×10^3
熱伝導率 [J/(m s K)]	4.1×10^{-2}	6.0×10^{-1}	1.6×10^1
密度 [kg/m ³]	1.0	1.0	8.0×10^3
伝熱係数 [J/(m ² s K)]	40	40	40
	頻度因子 [1/s]	活性化エネルギー [J/mol]	反応熱 [kJ/mol]
反応(1)	8.676×10^4	7.171×10^4	-2.980×10^3
反応(2)	3.726×10^4	7.171×10^4	-4.622×10^3
反応(3)	1.494×10^2	3.603×10^4	-1.664×10^3

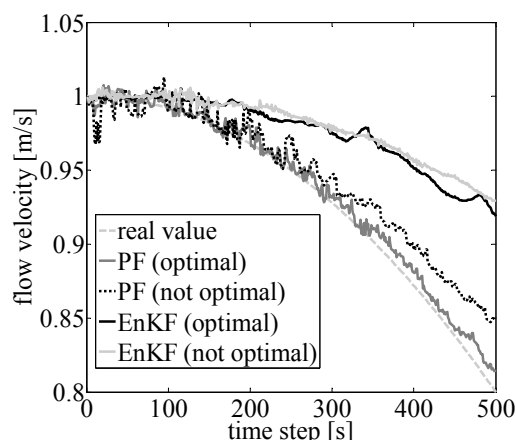


Fig. 2 Estimation results based on PF and EnKF.

余計な滞留部の発生を避け、非侵襲的な測定方法として、本研究では管壁温度を 1 箇所測定し、時刻 $t = 0$ s から 500 s にかけて、 $v = 1$ m/s から 0.8 m/s に変化する流速を推定する。

状態推定を行うために、TMR の物理モデルを直交選点法により離散点近似した状態空間モデルを導出した。このとき、状態量ベクトルは各選点位置における流速・濃度・温度、入力ベクトルはフィードの濃度・温度、観測量は壁温度である。尚、選点位置は Chebyshev 多項式の根を用いて決定し、軸方向選点数は 10、半径方向選点数は 5 とした。更に、高い推定性能を達成するために可観測共分散行列に基づいて壁温度センサ位置を最適化した。

PF^[1]や EnKF^[2]は非線形システムの推定問題に用いられている。PF のアイデアのポイントは、多数の粒子を用いて状態量分布を近似する点であり、本ケーススタディではモンテカルロフィルタを PF として用いた。また、粒子およびアンサンブルメンバの数は 100 とした。

PF および EnKF による流速推定結果を Fig. 2 に示す。optimal は TMR 入口から軸方向に 0.41m, not optimal は TMR 入口から軸方向に 0.030m にセンサを配置したことを表す。PF は EnKF より優れた推定性能を示し、また、PF では、最適センサ位置 (optimal) の方が最適でないセンサ位置 (not optimal) より迅速かつ精度良く流速を推定できていることがわかる。

4 結言

TMR の反応流体流速の推定問題に取り組み、PF を用いて迅速かつ精度良く推定できることを示した。触媒有効係数の推定結果、開発したシステムの実験的検証結果については発表時に報告する。

参考文献

- [1] J.B. Rawlings & B.R. Bakshi, *Comp. Chem. Eng.*, **30**, 1529 (2006)
 [2] G. Evensen, *Ocean Dynamics*, **53**, 343 (2003)

*e-mail: tonomura@cheme.kyoto-u.ac.jp