



マイクロリアクターの 状態推定と閉塞診断

集積化学システム研究部門
(化学工学専攻)

長谷部 伸治



集積化学システム研究部門

研究

(1) 集積分子システムグループ

今堀 博 浜地 格
小山宗孝

(2) 集積触媒システムグループ

辻 康之 杉野目道紀
大江浩一 永木愛一郎

(3) 集積合成システムグループ

松原誠二郎 澤本光男
村上正浩 吉田潤一

(4) 集積化学プロセスグループ

前 一廣 田門 肇
長谷部伸治 大嶋正裕

教育

融合工学コース

物質機能・変換科学分野

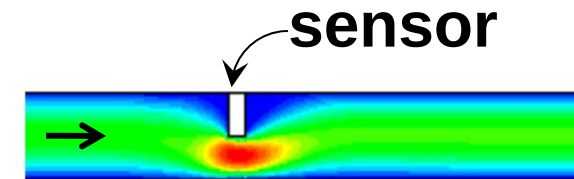
- ・集積合成化学
- ・集積化学プロセス
- ・集積化学システム(実験)

マイクロ化学プラント

マイクロリアクタの実生産への適用と長期安定運転の実現のためには、モニタリングや制御システムの開発が不可欠

流量計や濃度計のマイクロ流路への直接挿入は流れ場を乱す

» 間接的なセンシングに基づいてプロセスの状態を推定する技術が求められる



実用規模の生産には、並列化(ナンバリングアップ)が不可欠

並列化した全ての流路の流量を計測することは不経済

» 少数流路の計測情報に基づいて全ての流路の流量変動を推定する技術が求められる

管型マイクロリアクタの状態監視

間接的な計測情報を用いて, 計測不可能な運転状態を推定する

- 状態空間モデルによる状態推定

統計モデル

- マクロスケールでの化学プロセスで利用
- モデル構築に多数の計測情報が必要

物理モデル

- モデル構築に多数の計測情報が不要
- マイクロスケールの流れ場では厳密な物理モデルが容易に構築可能



状態空間モデル構築に物理モデルを採用

状態推定システム(状態空間モデル)

物理モデル

$$f\left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t}, \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{z}}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{u}\right) = 0$$

離散化

● 状態空間モデル
(状態方程式・観測方程式)

$$\mathbf{x}_n = \tilde{f}(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{u}_n) + \mathbf{w} \quad \mathbf{w} \in N(0, \mathbf{Q})$$

$$\mathbf{y}_n = h(\mathbf{x}_n) + \mathbf{v} \quad \mathbf{v} \in N(0, \mathbf{R})$$

$\mathbf{x}$: 状態量ベクトル

t : 時刻

$\mathbf{u}$: 制御入力ベクトル

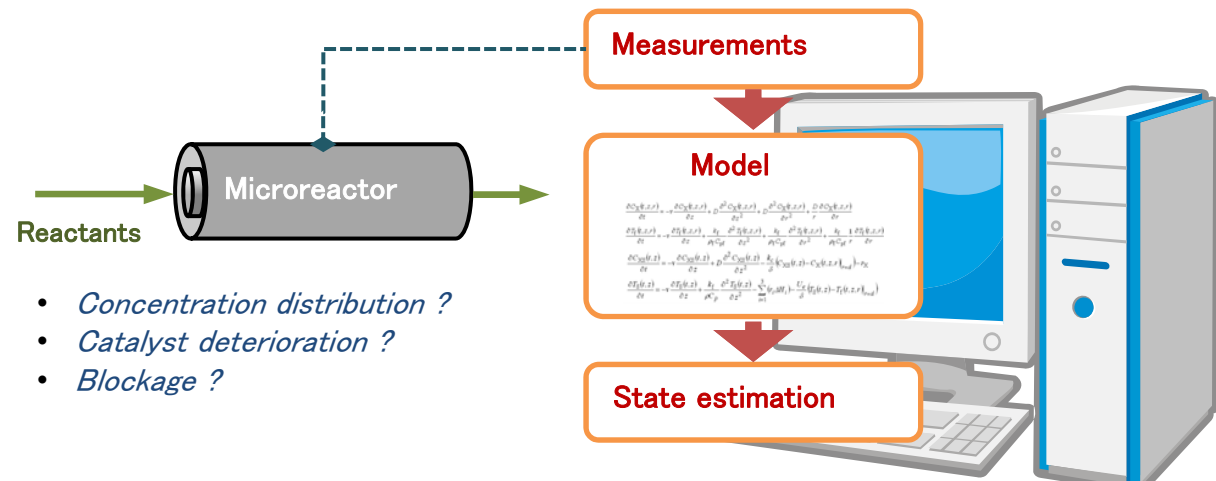
$\mathbf{y}$: 観測量ベクトル

$\mathbf{w}$: システムノイズ

(平均0, 分散 $\mathbf{Q}$ の正規分布)

$\mathbf{v}$: 観測ノイズ

(平均0, 分散 $\mathbf{R}$ の正規分布)



状態推定システム(非線形状態推定)

物理モデル(非線形)

$$f\left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t}, \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{z}}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{u}\right) = 0$$

状態空間モデル(非線形)

$$\mathbf{x}_n = \tilde{f}(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{u}_n) + \mathbf{w} \quad \mathbf{w} \in N(0, \mathbf{Q})$$

$$\mathbf{y}_n = h(\mathbf{x}_n) + \mathbf{v} \quad \mathbf{v} \in N(0, \mathbf{R})$$

$\mathbf{x}$: 状態量ベクトル
 t : 時刻
 $\mathbf{u}$: 制御入力ベクトル
 $\mathbf{y}$: 観測量ベクトル
 $\mathbf{w}$: システムノイズ
 $\mathbf{v}$: 観測ノイズ

● 非線形状態推定アルゴリズム

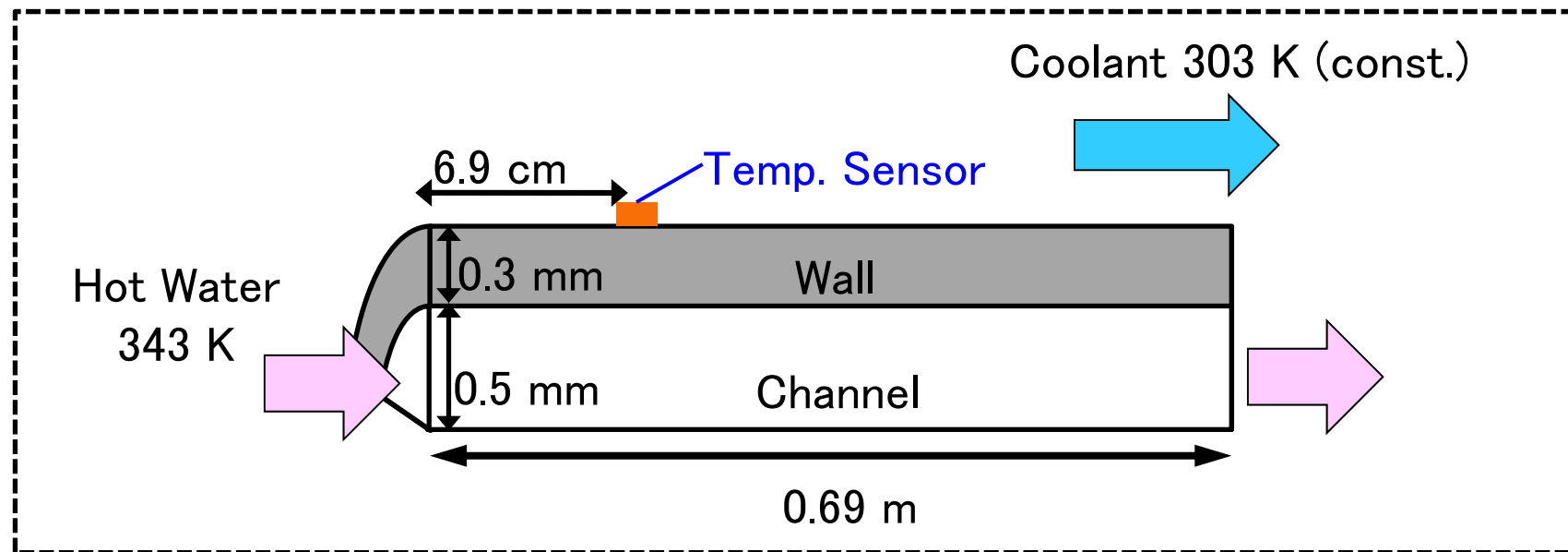
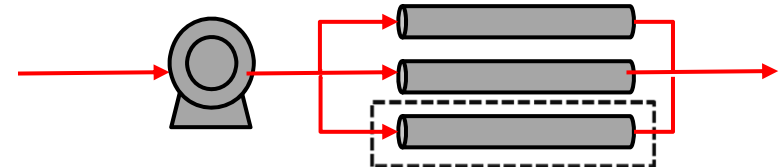
- Extended Kalman Filter (EKF)
- Unscented Kalman Filter (UKF)
- Particle Filter (PF)
- Moving Horizon Estimation (MHE)

	EKF	UKF	PF	MHE
計算精度	Δ	$\bigcirc$	$\bigcirc$	$\odot$
計算時間	$\odot$	$\bigcirc$	$\bigcirc$	$\times$

Teixeira, B.O.S, et al.,
Journal of Process Control (2010)

CASE1. マイクロ熱交換器の閉塞診断

1/16 inch SUS管製単一流路熱交換器



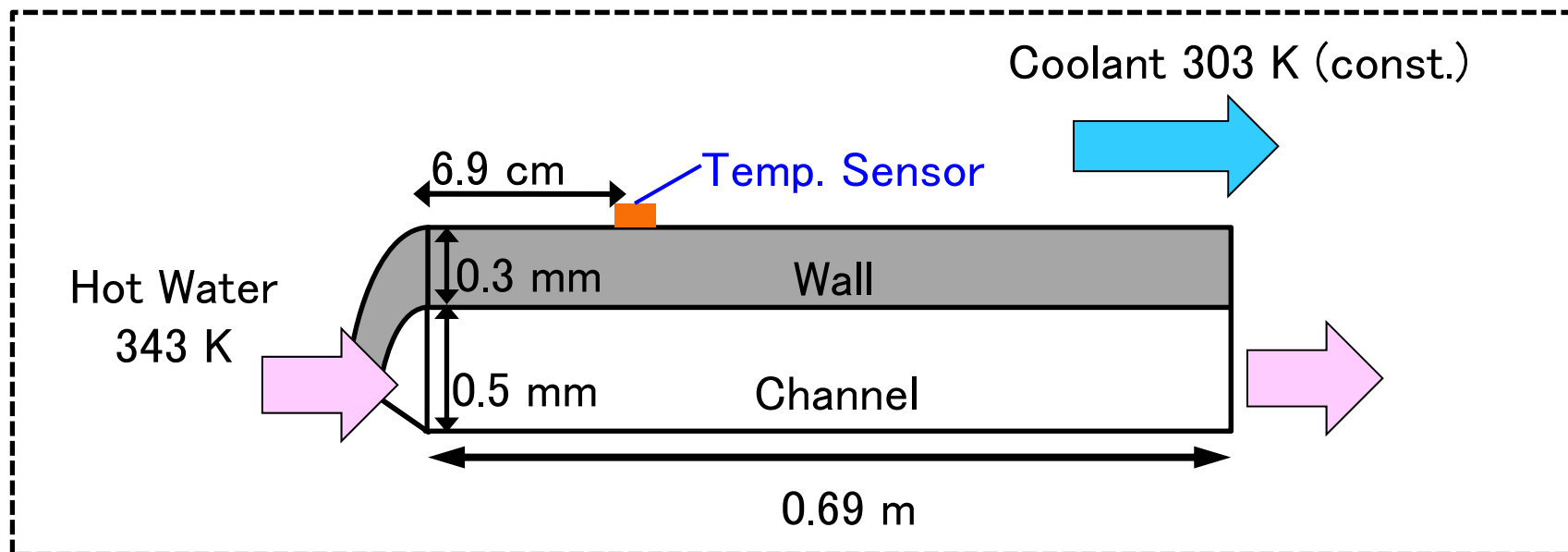
吐出圧一定でポンプが運転

温水流量の低下により流路閉塞を表現

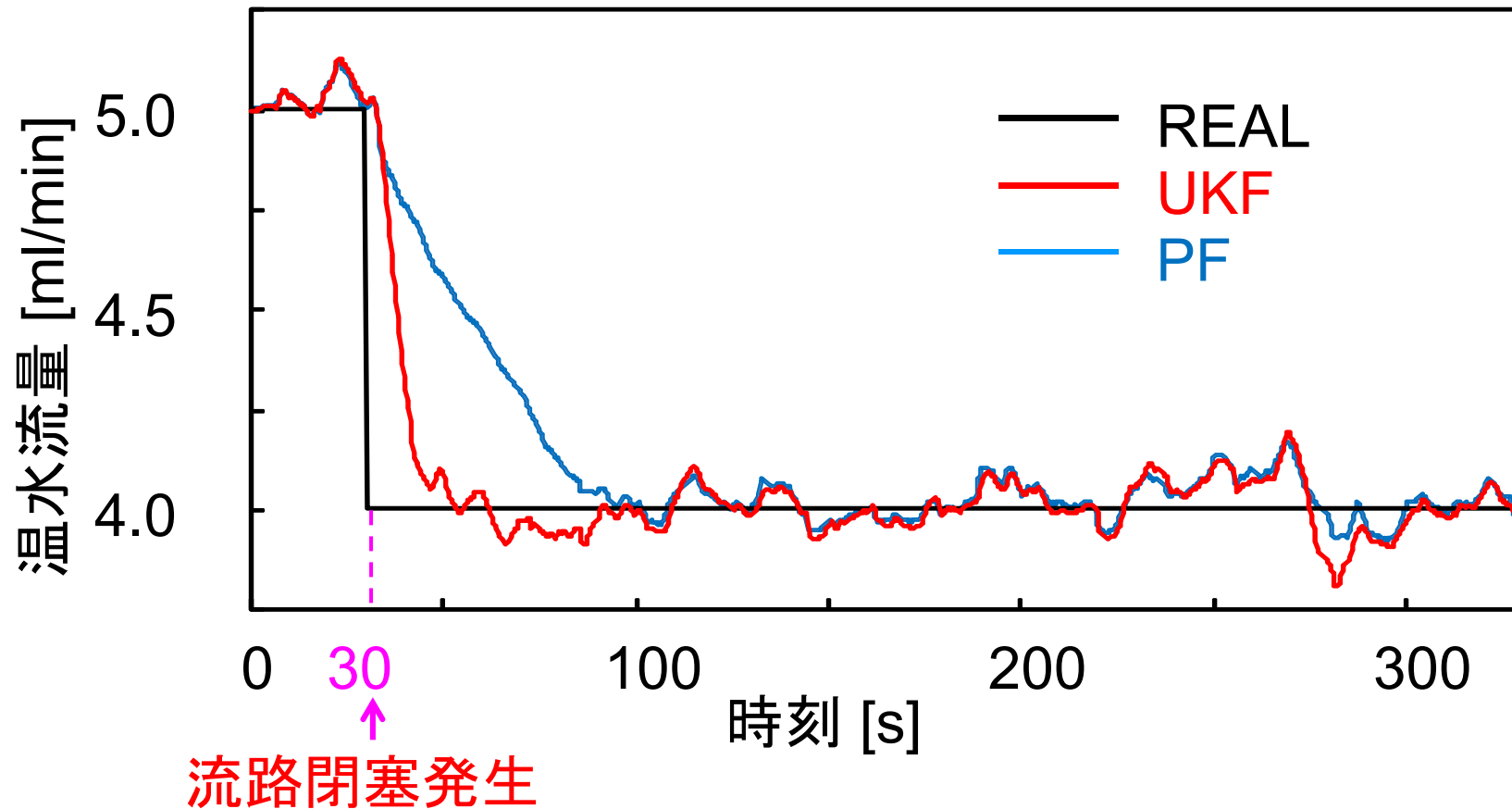
CASE1. マイクロ熱交換器の閉塞診断

状態空間モデルの構築

- ・熱収支式を時間, 流れ方向に有限差分近似により離散化(20分割)し, 状態空間モデルを構築(41次元のモデル)
- ・管壁表面の1点に設置した熱電対により正常時の管壁温度データを取得し, 状態方程式中の未知のパラメータ(管壁-冷媒間伝熱係数)をフィッティングにより決定



CASE1. 温水流量推定結果

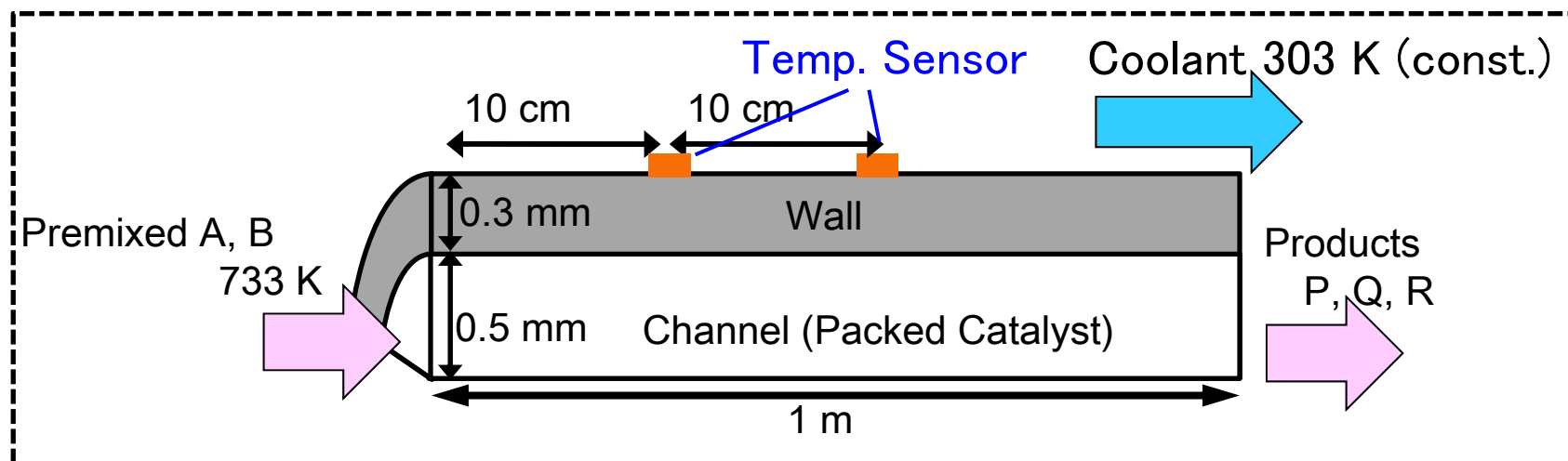


状態が急激に変化するとPFの推定値変化が遅れる

UKFの方がより高い精度で推定が可能

CASE2. 管型マイクロリアクタの異常診断

- 1/16 inch SUS管製単一流路マイクロリアクタ



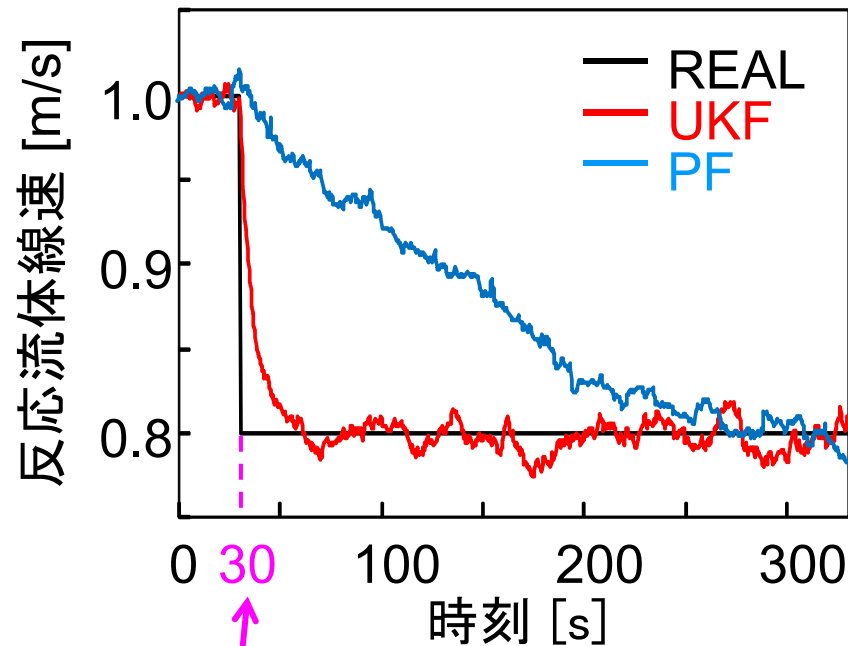
- 反応式・反応速度式(逐次並列発熱反応)



- 流路閉塞, 触媒劣化(触媒活性度 η の低下)が同時に発生

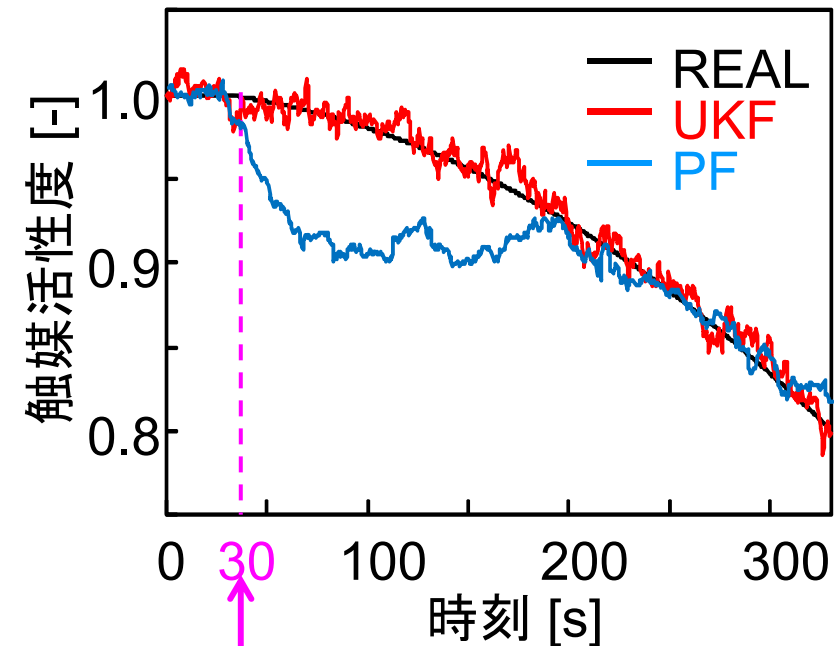
CASE2. 同時異常発生 (推定結果)

推定結果(反応流体線速)



流路閉塞発生

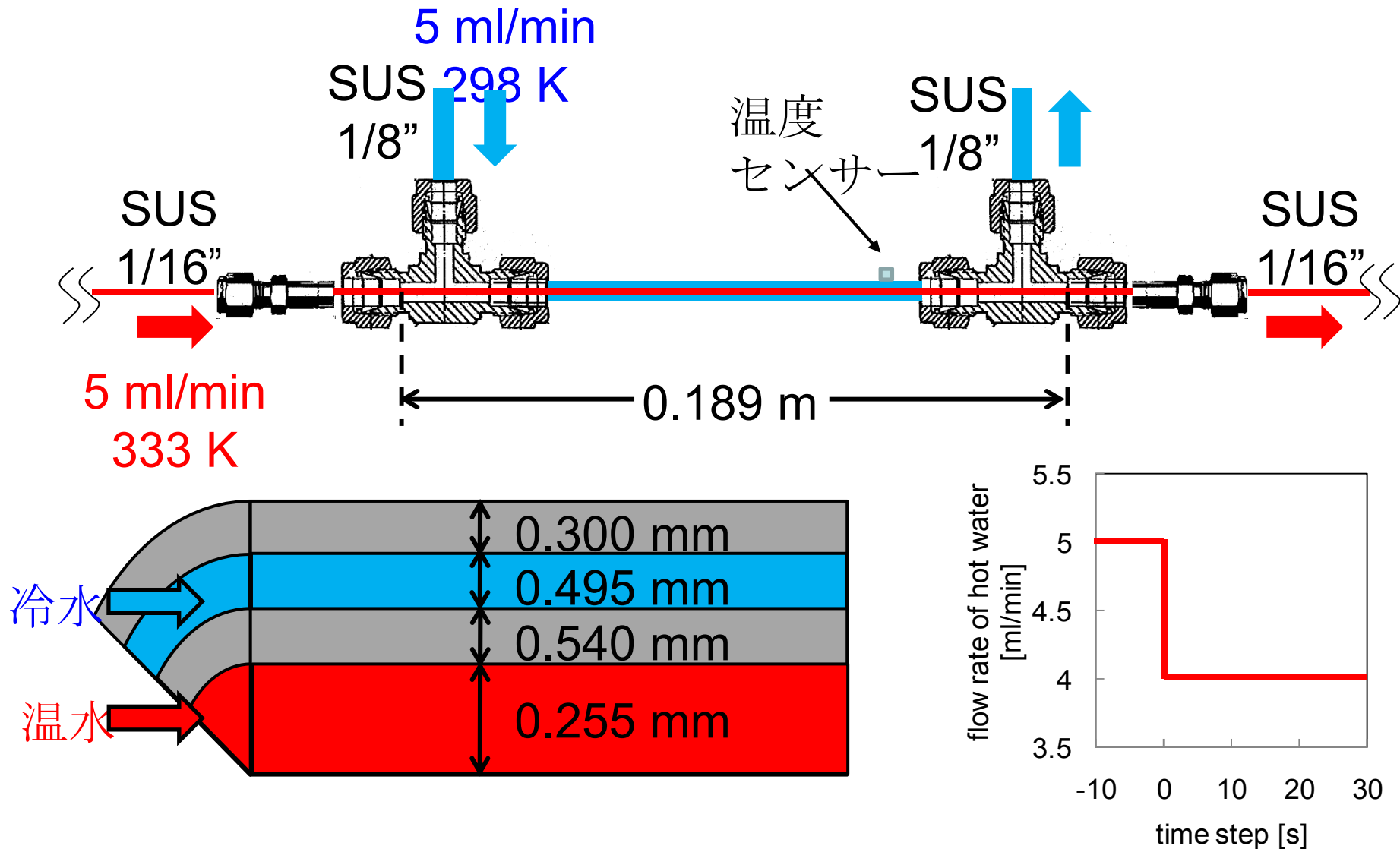
推定結果(触媒活性度)



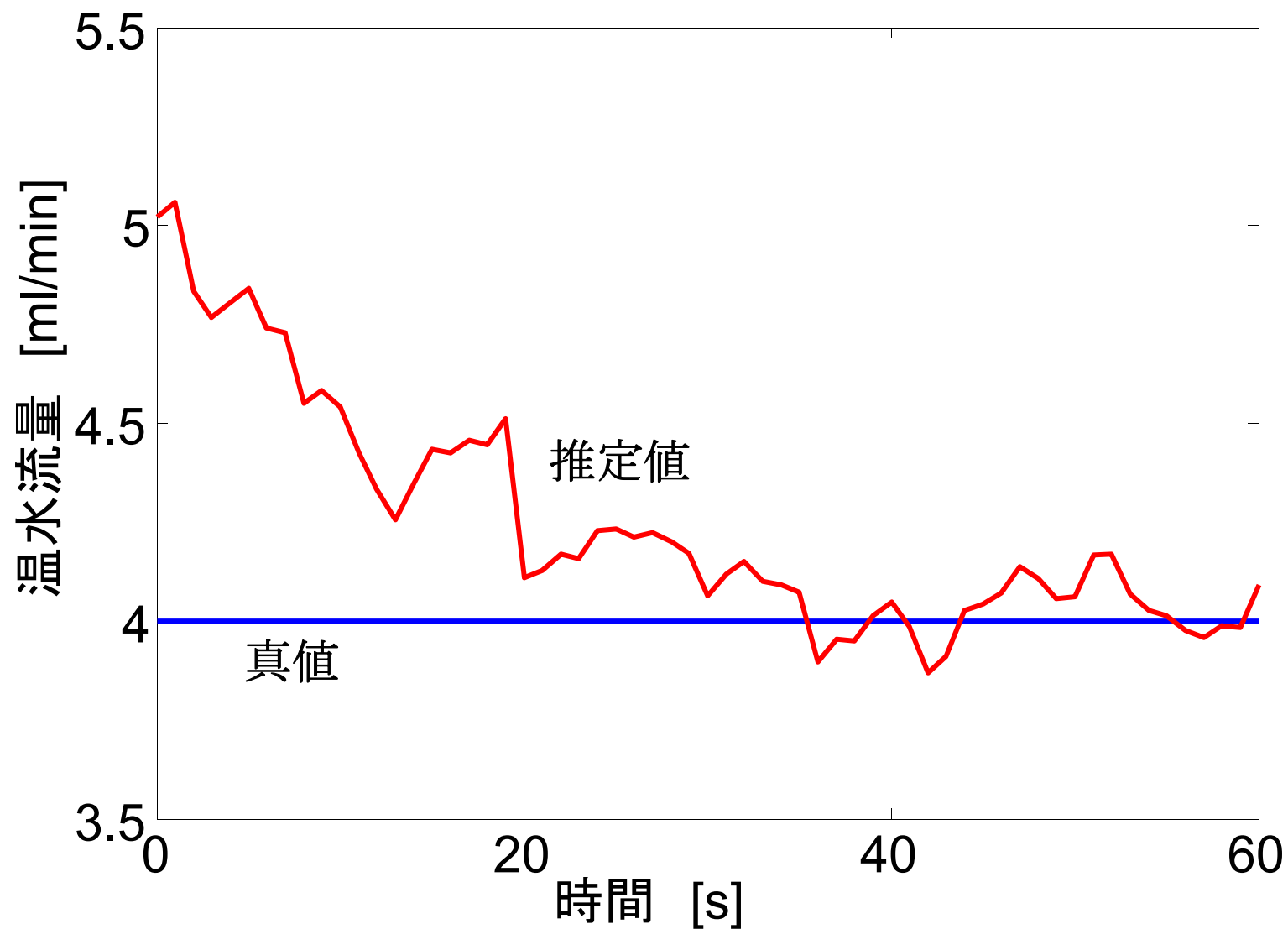
触媒劣化発生

UKFにより複数の状態変化が同時に発生する場合でも推定が可能

CASE 3. マイクロ熱交換器



CASE 3. 温度から流量の推定



マイクロ化学プラント

マイクロリアクタの実生産への適用と長期安定運転の実現のためには、モニタリングや制御システムの開発が不可欠

流量計や濃度計のマイクロ流路への直接挿入は流れ場を乱す

» 間接的なセンシングに基づいてプロセスの状態を推定する技術が求められる

実用規模の生産には、並列化(ナンバリングアップ)が不可欠

並列化した全ての流路の流量を計測することは不経済

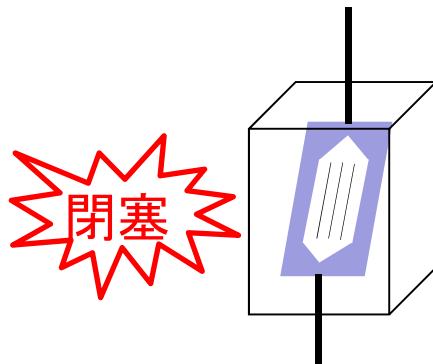
» 少数流路の計測情報に基づいて全ての流路の流量変動を推定する技術が求められる

マイクロプラントによる実生産

生産量の確保

内部ナンバリングアップ

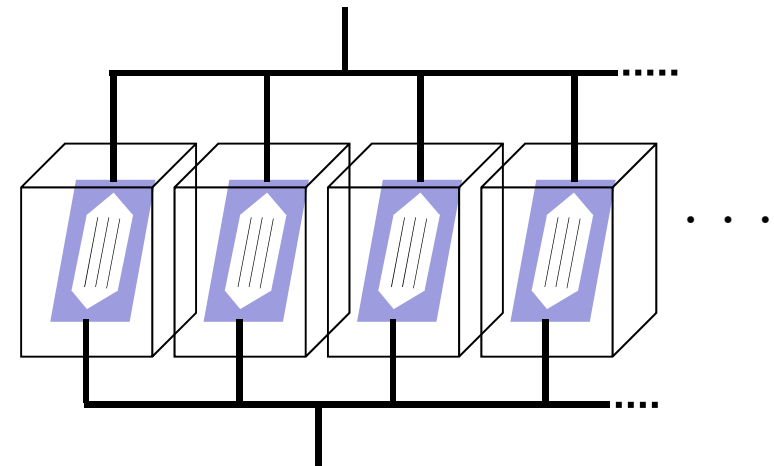
1つのハウジングの中に
流路を並列化・積層化



- ◆ 単一の流路を交換することは困難
- ◆ 閉塞を検知し、装置一式を取り替えるのが現実的

外部ナンバリングアップ

装置を並列化

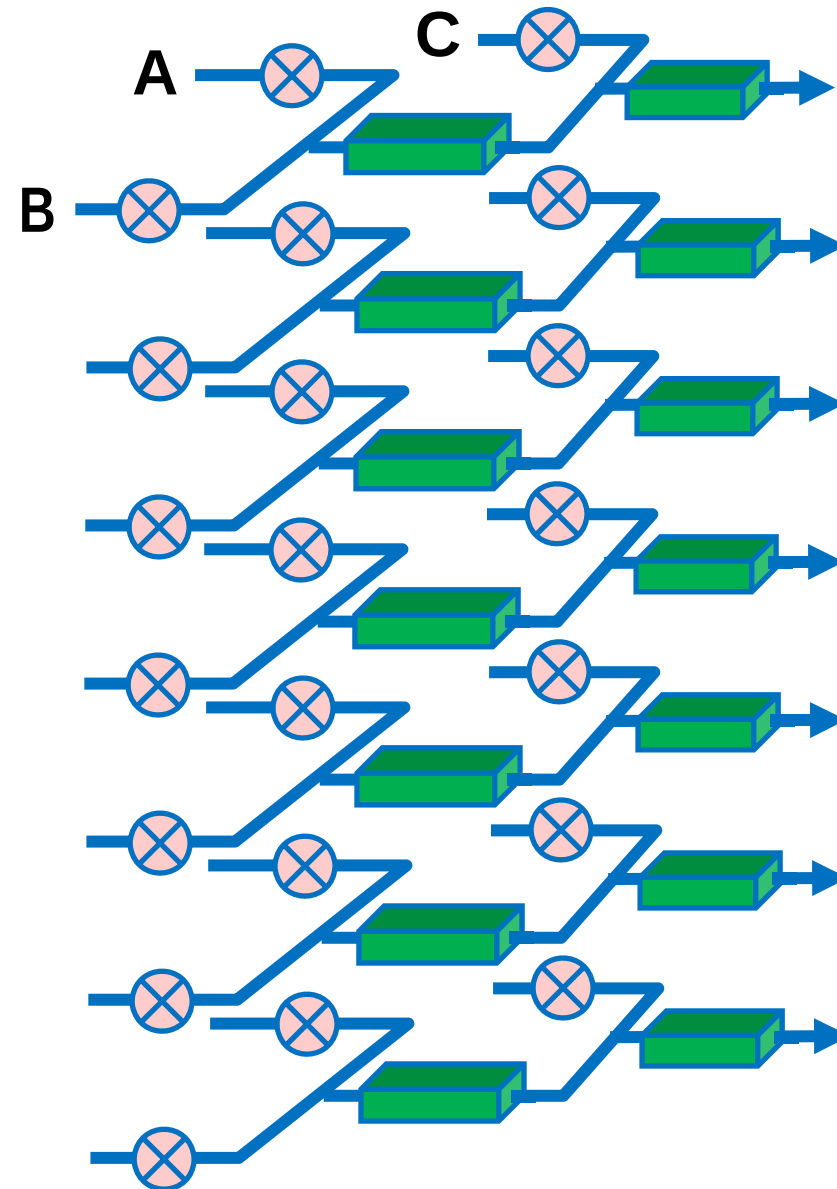
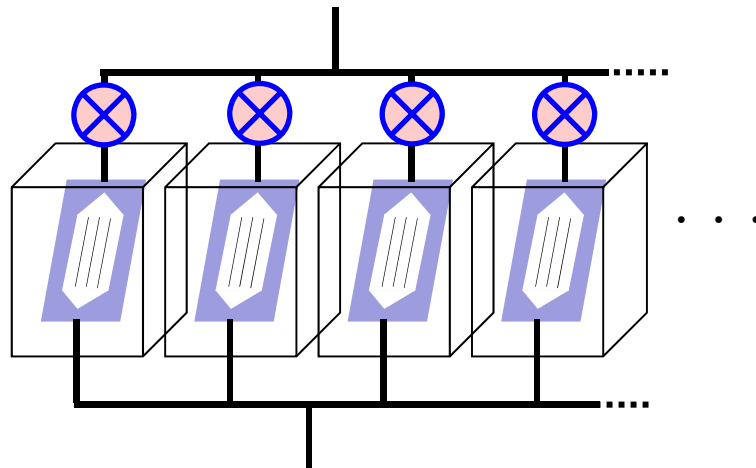


- ◆ 各装置を交換することが可能
- ◆ 閉塞を検知すると同時に、閉塞箇所の特特定が必要

流量計の設置

閉塞の検知・診断

全ての経路に流量計を設置



流量計をどこまで減らせる？

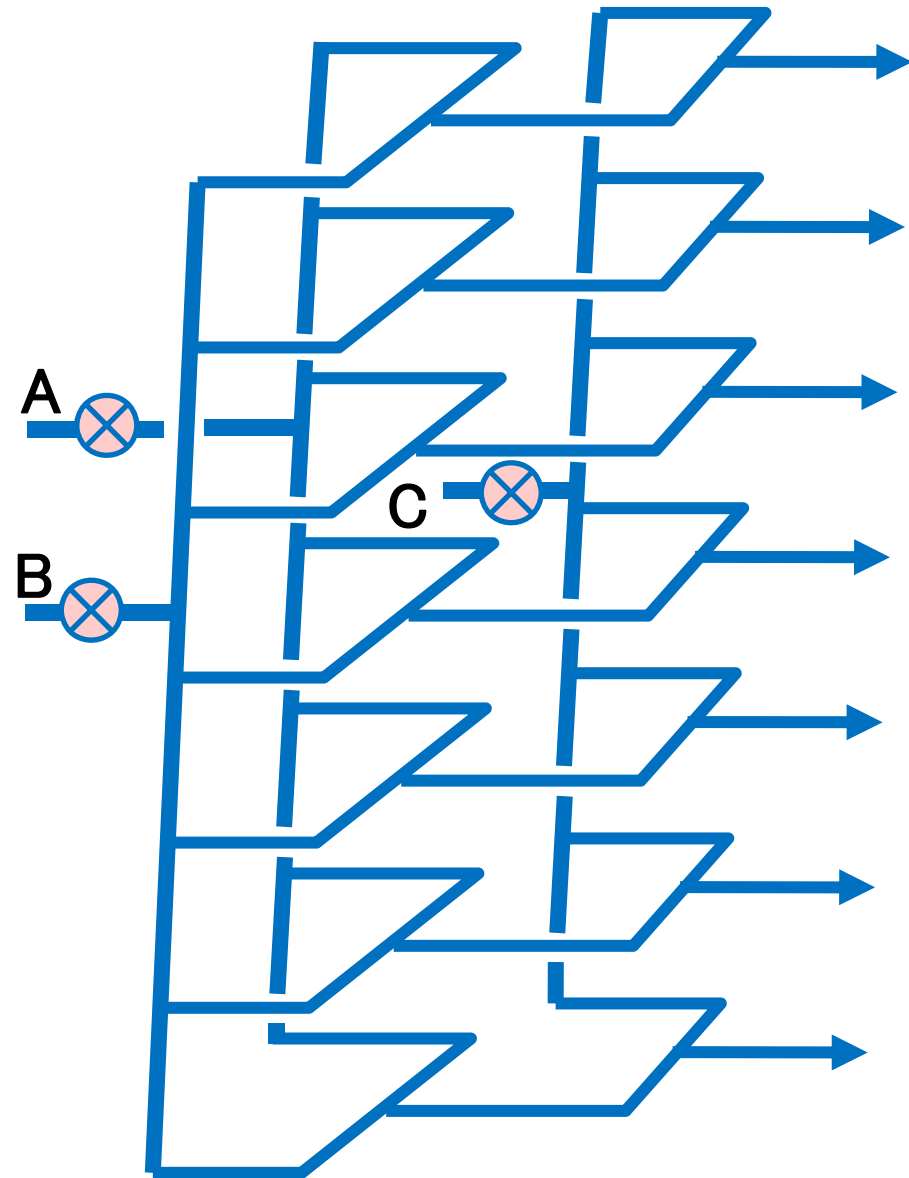
閉塞の検知・診断

少数の経路に流量計を設置



閉塞を診断するためには
どれだけの流量計が必要か？

閉塞診断に適した分配、合流
構造（集配構造）は？



流量計をどこまで減らせる？

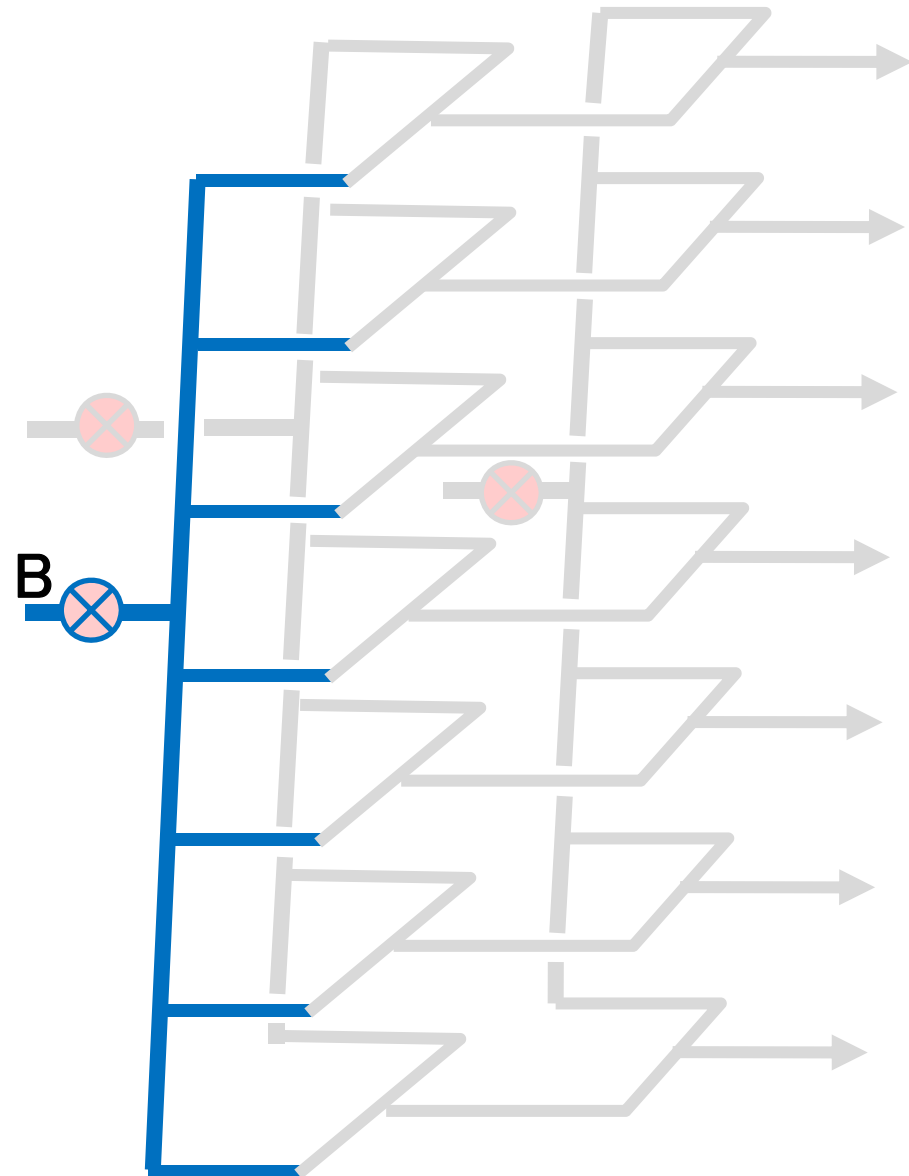
閉塞の検知・診断

少数の経路に流量計を設置



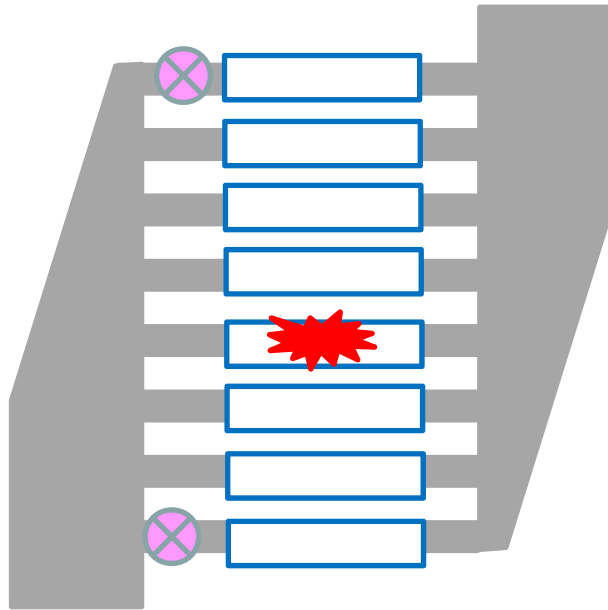
閉塞を診断するためには
どれだけの流量計が必要か？

閉塞診断に適した分配、合流
構造（集配構造）は？

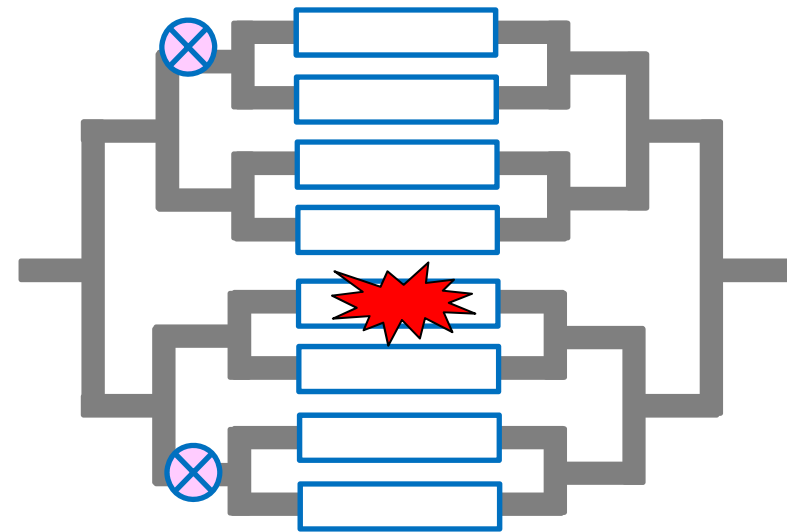


様々な分岐構造

2流路の流量を計測 ➡ 他の流路の閉塞を検知，診断できるか？



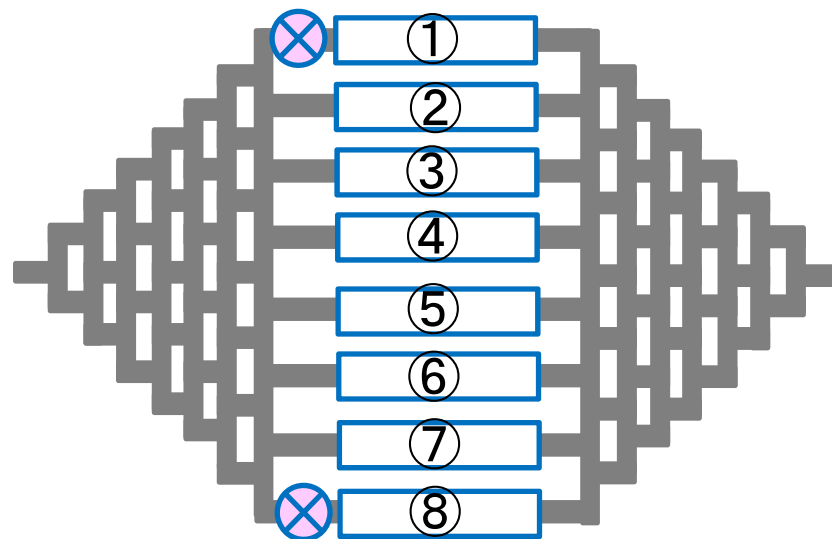
マニホールド型



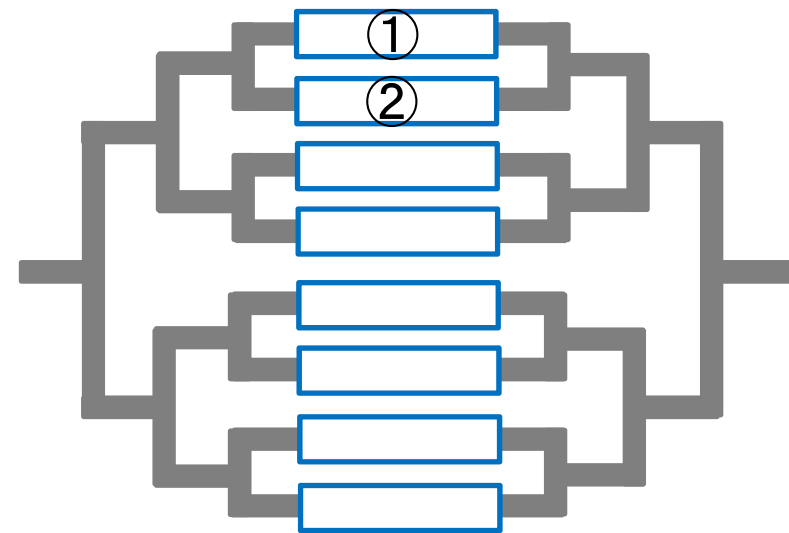
分岐式流体集配構造

流体集配構造

分合流式流体集配構造



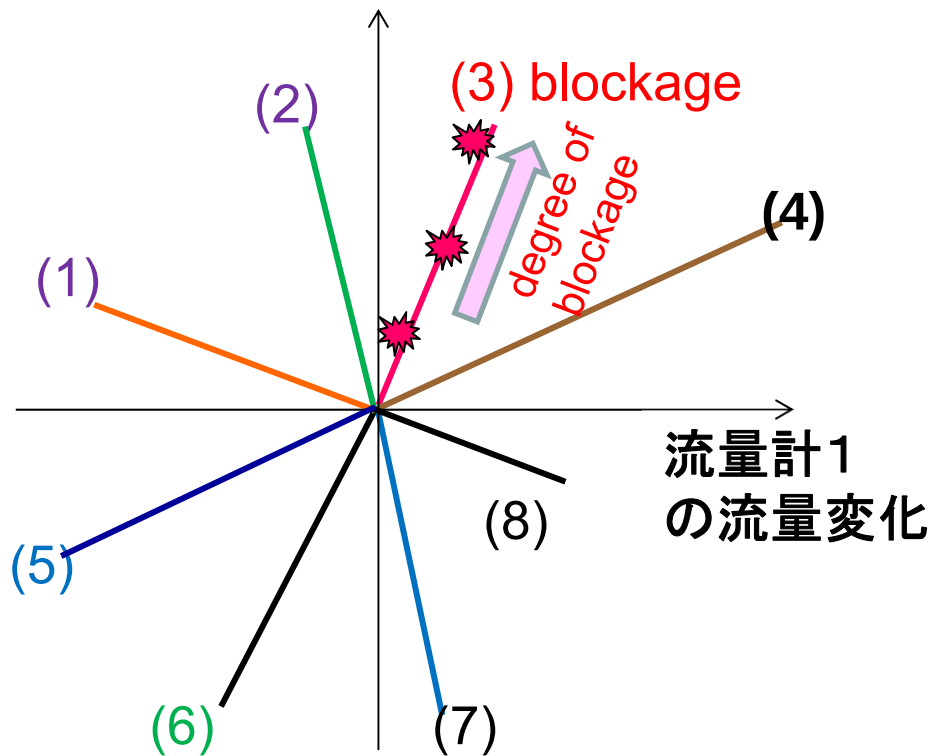
分岐式流体集配構造



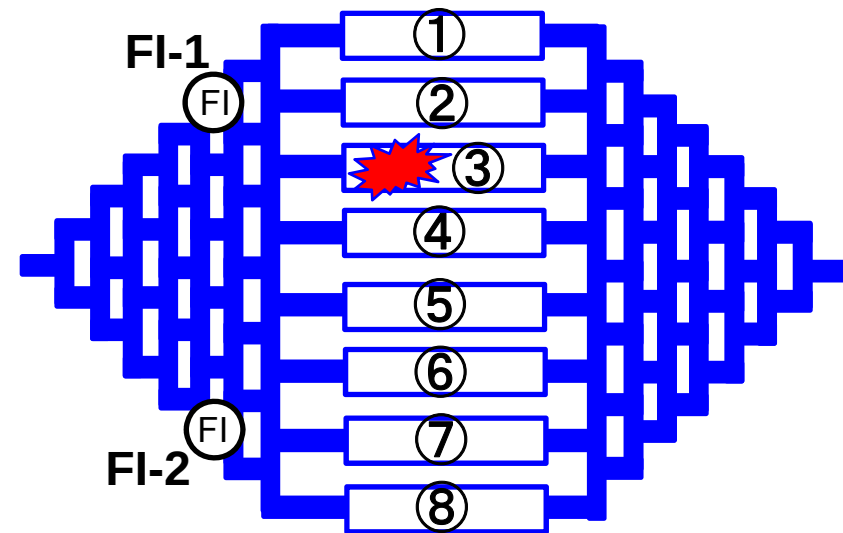
閉塞したデバイスの違いが、計測点に異なった影響として現れるような集配構造を考えることができれば、少数の計測点で閉塞デバイスを特定することが可能

閉塞の検知(ターゲット)

流量計2の流量変化

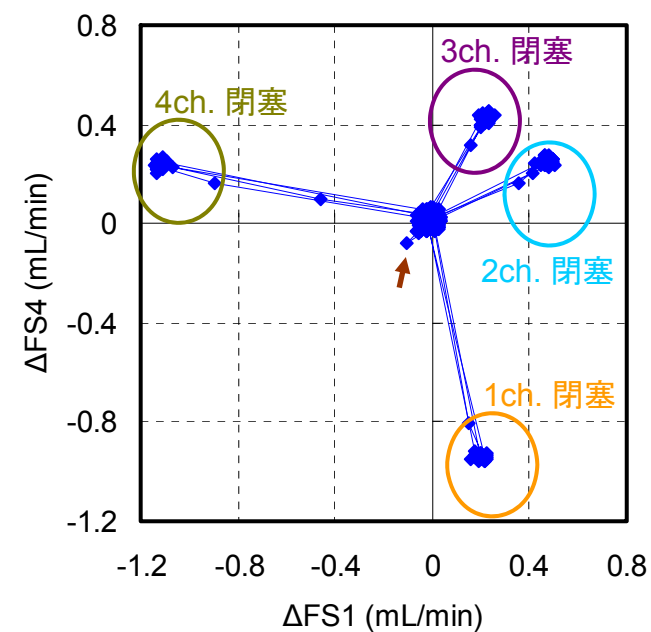
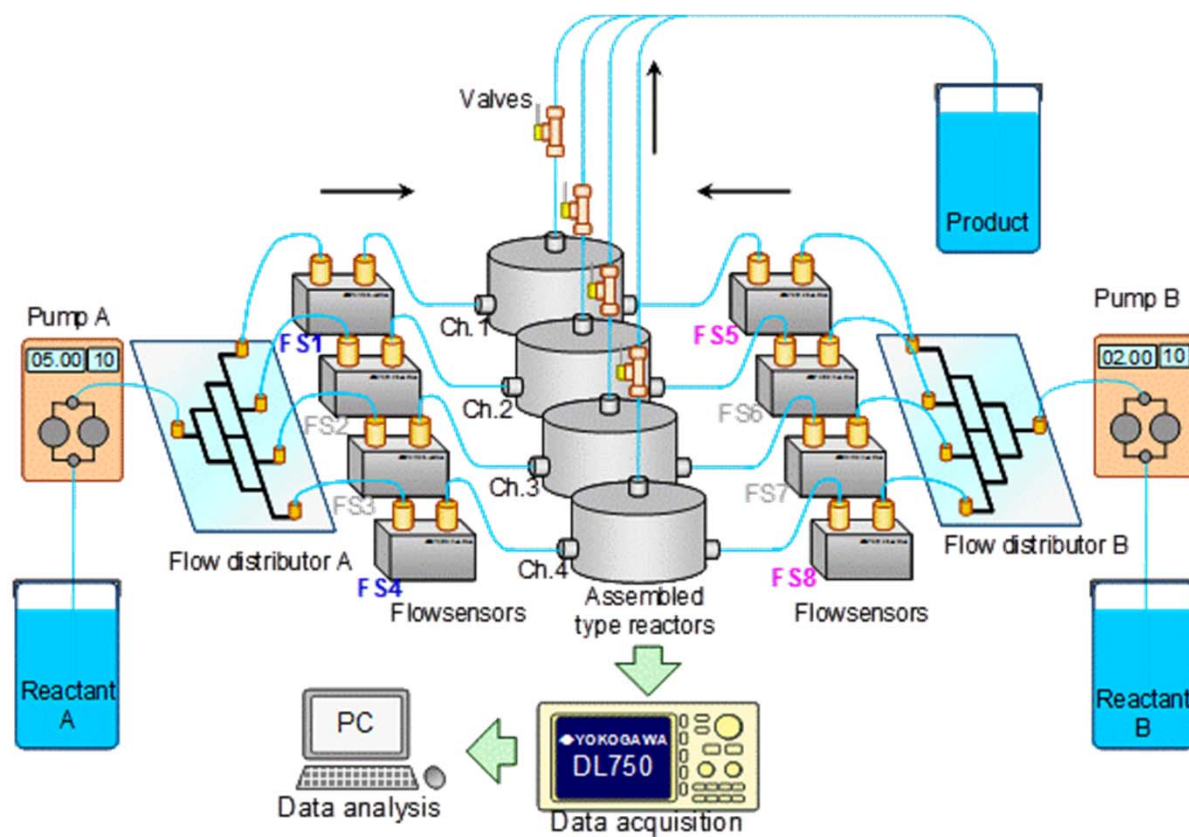


Proposed

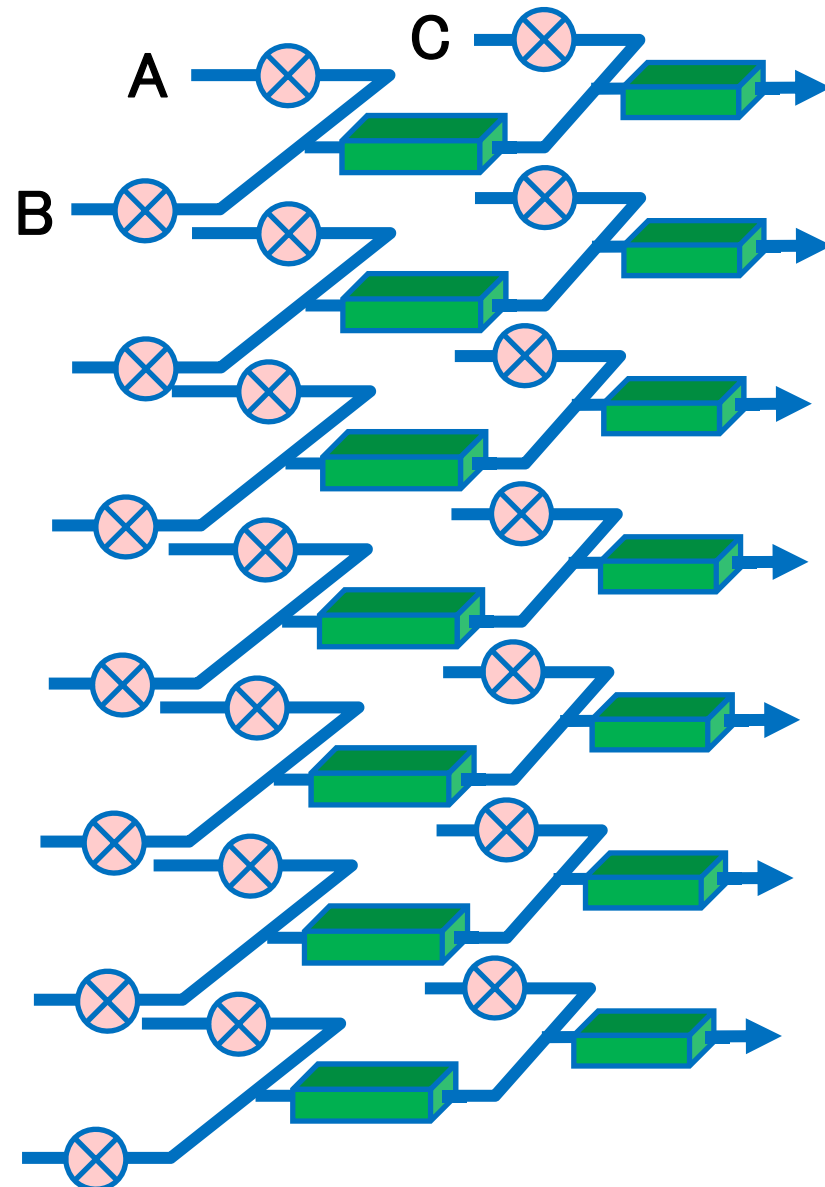
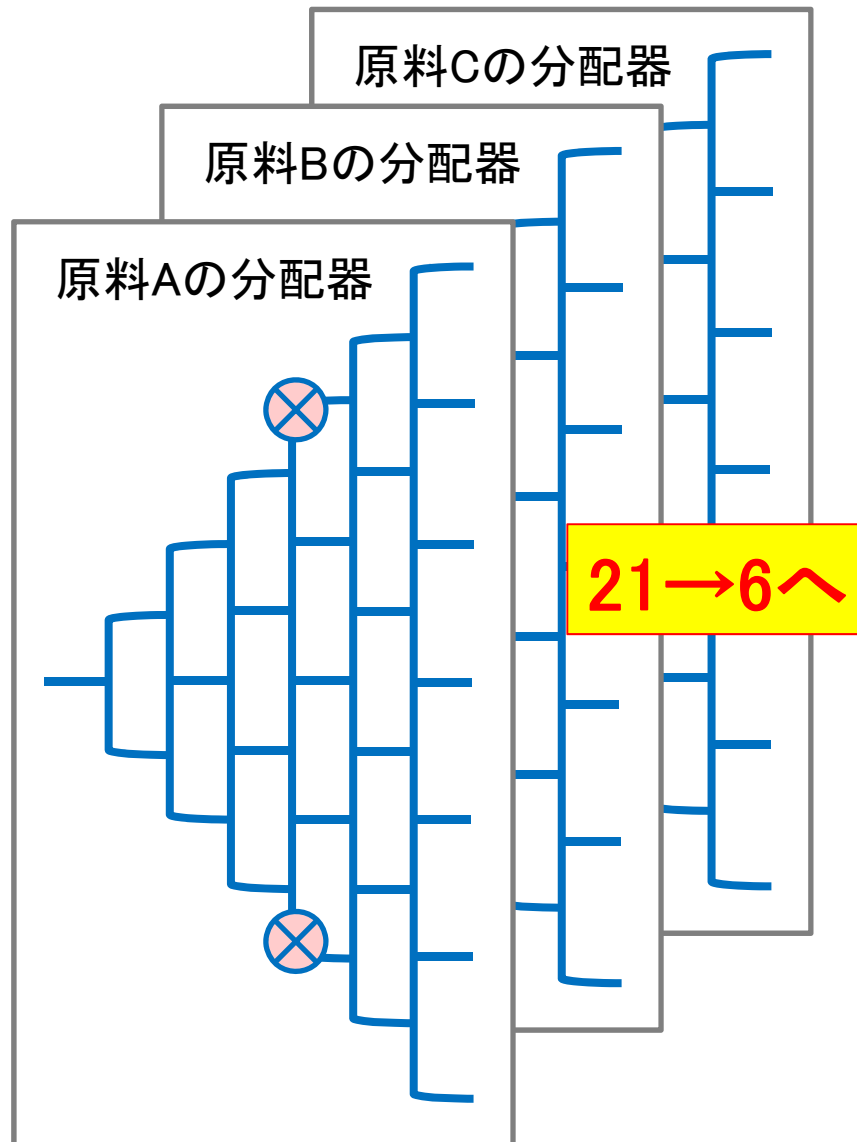


閉塞の影響は2つの流量計の流量変化に現れる。
 区別できるような流量計配置、経路設計

実験による検証(3)



並列反応器の閉塞診断



おわりに

インテックセンターを利用できたことにより,

- ・NEDO「**マイクロ分析・生産システム**」プロジェクト(H15-18),
「**革新的マイクロ反応場利用部材技術開発**」プロジェクト
(H19-23)を効率的に実施できた.
- ・経済産業省, **マイクロ化学プロセス中核人材育成事業**
(H20,21)を実施できた.
- ・産学連携の**マイクロ化学生産研究コンソーシアム**の活動拠
点を確保できた(H23~).