論文内容の要旨

博士論文題目

Optimal Quality Control of Continuous Polymerization Reactor

(連続ポリマー反応器の最適品質制御)

氏 名

Guo Qing (郭 青)

(論文内容の要旨)

Continuous polymerization reactors are widely used to produce various polymers in the chemical industry. The polymer reactor is often operated under multiple conditions to produce several different grades of the same polymer, depending on the demands of the customers. In this thesis, we discuss the optimal quality control of polymer production in a continuous stirred tank reactor (CSTR) from the viewpoints of steady-state operation and grade-transition operation.

In Chapter 2, a mathematical model is developed for describing both static and dynamic behaviors of general free-radical polymerization in the CSTR. Polymer quality is represented by a set of concentrations of dead polymers with different chain lengths, and this is called the molecular weight distribution (MWD) function.

Chapter 3 discusses the optimal steady-state operating condition to produce polymers with the best match to a specified MWD profile. The MWD profile is characterized by three parameters: Mn (number-average molecular weight), Mw (weight-average molecular weight), and PDI (polydispersity index).

In Chapter 4, the correlation between the MWD specifications and the operating conditions is discussed. Through a case study of free-radical polymerization, an important condition was found: An operating condition is determined uniquely by specifying two MWD parameters, Mn and PDI. To be exact, the specification of Mn and PDI cannot determine an operating point when the polymer reaction system does not involve termination by combination reaction.

Chapter 5 discusses the optimal grade-transition operation to minimize the raw material and energy costs during the grade transition as well as to shorten the transition time. An optimal grade-transition policy becomes necessary when several grades of polymers are produced in the same CSTR. A combination of feed-forward control, based on the results of this dynamic optimization, and regulatory control systems is proposed for a grade-transition operation. Through simulation, it is shown that the optimal production of different polymer grades is achieved by applying the steady-state optimization and the optimal grade-transition operation based on dynamic optimization.

(論文審査結果の要旨)

一般にポリマー(高分子化合物)は異なる重合度の分子の混合物であり、ポリマーを構成しているモノマー数(鎖長)である重合度の分布はポリマーの性質(品質)を決定する重要な因子である。本論文は所望した品質をもつポリマーを生産するための操作条件の決定方法および異なる品種を切替えて製造するときの最適な操作方法について考察したものである。

ポリマーの品質が重合度分布によって規定される場合の連続重合反応器の最適 操作条件を決定する問題は従来から研究されてきた。アプローチとしては、対象と する連続反応器で起こる重合反応機構からモデルを導き、このモデルを基に生成さ れるポリマーの重合度分布を計算する。論文では、対象としたフリーラジカル重合 反応において重合度分布を特徴づける二つのパラメータが簡単に3つのモーメント を用いて計算できることを示した。次いで、重合度分布が与えられたときの最適操 作条件を求める問題を、重合度分布の形状を一致させる問題として、また二つの重 合度関連パラメータを一致させる問題として定式化して数値計算を行った結果、操 作条件が一意に決まらないケースがあることを見つけた。その原因を探るため反応 機構について考察した結果、ある反応(termination by combination reaction)が 起こらない場合にこのようなことが起こることを突き止めた。

次に、グレードの異なる品種を連続的に生産する場合、品種切替え時の操作方法が問題になる。このとき、品種切替え中の規格外製品の生産量や原料およびエネルギーの使用量をできるだけ少なくすることが求められる。このような動的な最適問題を解く方法として、まず最短時間問題を解いた後、適切な評価関数および終端時間を選んで最適操作問題を解く方法を提案した。このとき、品種切り替えは定常状態から新たな定常状態へのフィードフォワード制御で実行するとして、制御問題の終端条件の与え方について考察した。最後に、フィードフォワード制御とフィードバック制御を組み合わせた制御法を提案し、シミュレーションで有効性を確認している。

以上のように、本論文は、ポリマーの品質が重合度分布によって指定される際の、操作条件の決定および品種切り替えを最適に行う方法を提案し、コンピュータシミュレーションによって提案手法の有効性を検証したものとして、プロセス制御、システム制御の分野において、学術上、実用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。