

プロセスシステムの最適化と  
感度解析に関する研究

橋本 伊織



プロセスシステムの最適化と  
感度解析に関する研究

昭和45年

橋本 伊織

# プロセスシステムの最適化と感度解析に関する研究

## 目 次

第I章	序 論	1
	参考文献	7
第II章	集中定数系の定常最適化と感度解析	8
II-1	代数方程式系で表わされるプロセスシステムの最適化	8
1-1	緒 論	8
1-2	最適化の数理的手法	8
1-3	結 論	16
	参考文献	17
II-2	代数方程式系で表わされるプロセスシステムの感度解析	19
2-1	緒 論	19
2-2	パラメータ変動に対する感度	21
2-3	操作量変動に対する感度	26
2-4	各段抽出プロセスへの適用	38
2-5	結 論	56
	参考文献	57
II-3	感度解析の設計問題への応用	59
3-1	緒 論	59
3-2	感度を考慮したいくつかの設計法	60
3-3	設計余裕量の決定における定量的考察	66
3-4	熱交換器システムへの応用	68
3-5	結 論	87
	参考文献	90



第Ⅲ章	分布定数系の定常最適化と感度解析	92
Ⅲ-1	常微分方程式系で表わされるプロセスシステムの最適化	92
1-1	緒論	92
1-2	最適化の数理的手法	92
1-3	結論	104
	参考文献	105
Ⅲ-2	常微分方程式系で表わされるプロセスシステムの感度解析	107
2-1	緒論	107
2-2	システムパラメータ変動の分類と感度方程式	108
2-3	最適化問題における感度解析	118
2-4	化学反応器の最適化と感度解析的考察	123
2-4-1	管型反応装置内の最適温度分布と流体混合	123
2-4-2	固定床管式反応器の最適解媒量とその感度解析的考察	149
2-4-3	二通路自己熱交換型反応器の最適化と感度解析	164
2-4-4	管型反応器の冷却方式に関する若干の考察	186
2-5	結論	207
	参考文献	208
Ⅲ-3	感度解析の設計問題への応用	215
3-1	緒論	215
3-2	結合された分布定数系における設計変数の余裕量に対する定量的考察	216
3-3	断熱型固定床管式反応器の触媒量余裕に対する考察	221
3-4	結論	240
	参考文献	241

## 序 論

人間の生活を豊かにするために 現在の生産方式を改良し、より新しい生産方法を創造する努力の一翼をになうものとして さまざまな工学研究が行なわれている。衛生プロセスや化学プロセスの最適化に関する研究も数多く発表されてはいるが、その研究を正しい方向に発展させるためには、まず第一にこの研究そのものを 科学の歴史的発展の中に 明確に位置づけることが必要であろう。

元来、人間が一つの生産活動に従事しているうちに いろいろな現象に対する経験をつむことによつて、その経験を生産活動の改良・発展に還元する仕方には、直接、経験を生産活動に応用する技術改良的な側面と、多くの経験をまず分析、整理、総括した後に、はじめて応用可能ないわゆる自然科学そのものにつながる側面が存在する。そして生産活動を、それぞれの側面から改良・発展させる人間を、技術者と科学者と区別して呼んでいる。しかし科学の発展の初期には、科学者と技術者との間の区別はなかった。しかし19世紀以後の資本主義の発展にともなう科学の急速な進歩が、両者の区別を明確にしてゆき、両者の間のギャップは大きくなった。この時期の両者の相互理解と協力の欠如の原因は自然科学そのものの発展が未熟で、工学技術の基礎となりえなかったことにある。しかし20世紀の初めには自然科学は工学技術の基礎となりうる程度に発展し、その反映としてあらゆる工学技術は、自然科学の単なる応用とみなされるようになってきた。この考え方も現時点では明らかに誤りである。というのは、もともと自然科学の研究対象は自然全体でなく、自然のなかのそれぞれの現象を抽象化し、その環境のなかから分離してきたものであるため、自然科学の取り扱う世界は形式化され、単純化された自然界である。しかも自然全体がたえず発展していることから考えても自然科学はたえず発展しなければならず、科学理論が自然全体を包括することは出来ない。従つて自然科学は工学技術の基礎であっても、それを完全に包括することは出来ないのである。すなわち、自然科学の理論を工学技術に応用するためには、単なる推論、演繹の作業ではなく、まさに創造的な作業をへなければならない。

このように自然科学を工学技術に応用する段階においては自然科学を基礎とし工学技術に服務する新しい一つの学問として技術科学が必要なことが明らかとなってきた。<sup>1)</sup> すなわち生産方法をたえず改良、発展させるためには、自然科学、技術科学、工学技術の有機的な結合と、それらの発展が不可欠なのである。こうしてみると、現在のプロセスの最適化に関する研究は、まさに自然科学と工学技術の総合をおこない新しい工学理論をうちたてようとしている技術科学の一分野となっていることがわかる。しかしこの自然科学と工学技術の結合である新しい技術科学は、当然その研究方法そのものにおいても自然科学、工学技術とは異なった特徴をもっているはずである。次にこの技術科学としてのプロセスの最適化に関する研究の方法論について考察する。

技術科学の研究には、①数学的方法とそれに付随する②Computerの利用という二つの要因が不可欠なものとなる。この点について従来強調されすぎたために、あたかも技術科学の本質が数学的方法とComputerを用いた計算そのものであるかの如き考え方が蔓延しているのが現状である。しかしこのような考え方は誤ったものであることを十分認識し、正しい技術科学研究の方法論を明らかにする必要がある。全ての科学研究において最も重要なことは研究する問題の認識、つまり研究対象の矛盾の認識にある。ところが技術科学は自然科学を基礎とし工学技術に服務する学問であることから、その研究問題の認識、すなわち研究するに値する問題は実際の生産活動における感性的認識を出発とし、それをさらに理性的認識にたかめることによって生れてくるのである。これは人間の認識過程そのものが、感性的段階から理性的認識の段階に進んでいくことから当然であろう。

しかし現体制下では技術科学を研究する人間が生産活動に直接参加することはほとんどできない、といってもよい状態であり、そのことから問題の認識が非常に恣意的になりやすい。それを避けるには生産過程に直接参加している人の論文を中心にして情報を集め、その中からこそ問題を抽出してくるべきである。またその為の資料(データ、研究結果)も出来るだけまずい抽象化をうけていないものを厳選すべきである。これは

年間、化学プロセスの最適化に関する論文だけでも千数百も発表され、T. J. Williams<sup>2)</sup>の言によれば、是非読むべきものが400はあるといわれる。まさに情報氾濫の時代、泡沫のような論文の洪水の中で、有用な論文を取捨選択する際の一つの基準となりえよう。

プロセスの最適化問題に関する研究を行なう場合、あるプロセスをある目的に対して最適にするという意味をもっと深く分析する。すなわち最適化を考えてゆく上で、外部要因と内部要因の明確な区別、さらにそれぞれの要因において主要な要素と副次的な要素が何であるか、また存在はしても省略出来る要素が何であるか、について十分な認識をしなければならない。この段階は次にのべるそれぞれの要因及び要素間の定量的な表現、すなわち、外因、内因の主要と考えられる要素による表現であるモデル作りの段階であり、これこそ最も創造的な作業になるのである。

すなわち外部要因の数式的表現が評価関数であり、内部要因の主要な要素によるそれらの間の数式表現が対象とするプロセスの数式モデルなのである。評価関数は Mass Model と同一という考え方があがるが、厳密には外因と内因という決定的な差異がある。数学上での単なる取扱い上から、これら二つの要因を同一視する考え方は、一つのプロセスの最適化を考えてゆく過程の中で、主要な役割を演ずるのは内因である。つまり外因は変化の条件であり、内因こそ変化の根拠である。という観点からみた時、その認識が不徹底であることがわかる。問題を正しく認識しているかどうかによって、計算結果に対する検討の際に、大きな違いが出てくるであろう。問題の明確な認識のあとで、次にそれに必要な資料をもとにして、モデル作成の段階にはいる。錢学森<sup>1)</sup>はモデルについて次のようにのべている。

「モデルとは問題の現象に対するわれわれの理解をつうじ、考究しえたメカニズムを利用して、すべての主要な要素をとり入れ、すべての主要でない要素を省略して作りだした「一幅の絵」であり、ひとつの思考上の構成体である。それはひとつの模型であって、現象そのものではない。」

すなわち、モデルというのは外因が内因を通じて作用する際の内因そのものを、つまり対象とするプロセスの内部矛盾の(外因との関係において)主要な側面を、主要な要素で表現したものといえる。したがって作用する

外因が変わればとり出される内部矛盾の主要な側面は別なものとなり、ことなつたモデルが作られる。これらのモデルが一見たがいに矛盾した対立したモデルであってもそれは対象そのものの本質によって統一されるのである。この際にモデルにとりいれられる主要な矛盾とこの主要な矛盾の主要な側面とは実践つまり具体的な生産活動、科学実験の段階を経なければ正しい認識とならないことに注意すべきである。またこのモデル化→実践→さらにモデル化という過程をへることによってモデルそのものが内部矛盾の主要な矛盾とその主要な側面をより適確に表現するもの発展してゆき、対象そのものの本質をより明確に表現するものになってゆく。いままでに Model Building の一般論を研究しようとする考え方があったがこれは不可能であろう。その一般論とは実践→理論化→実践→理論化のくり返しによる以外にはないと考えられる。特に一般論は一般論であり、Case study は case study という認識は特殊性の中にこそ普遍性があるということに反するものであり、正しい研究態度は多くの特殊な問題から出発し、その研究結果を概括総括することによって普遍的な結果をうることができるということを知ることにある。そしてその結果が正しい結論であるかどうかは、実践を通じてのみ検証されるのである。このようにモデル作成が実践ぬきで数学的方法によるのみ達成出来るとみることはまったくの誤りであり個々の問題においてまさに創造的にモデルを作る以外に方法はないといえる。このモデル作成の段階を経てはじめて数学的手法と computer が利用出来る分析と計算の段階にはいる。もともこの段階の記録が研究論文の大部分をしめているために、R. Aris<sup>3)</sup>のいっている waste paper と呼ばれる多くの論文が生れてくるのであろう。化学プロセスの最適化研究を行なっている研究者の中には、新しい数理的手法の開発こそ、プロセス最適化の発展の基礎であるとみているが、最適化研究そのものの発展過程において現在では数理的手法の開発そのものが、発展段階の主要な矛盾とはなっておらず、また最適化手法そのものはつねに最適化研究において外因にすぎず、研究の発展の根拠ではないことに十分留意しておくべきである。

化学反応装置の最適化に関する論文についていえば、初期の Dentigh<sup>4)</sup>



の研究論文が生産活動の実践の中から生れたものであるが故に、そこで用いられている数理的手法が古くさい陳腐なものであろうとも、有益な value の高い論文であろう。'60年代に発表された論文の内、多くのものが、用いられている手法が新しく、かつ高等なものであっても、最も創造的な部分を欠如し、生産活動の実践の中から認識された問題を取扱ってない為に waste paper にしかなりえなかったことがよい例であろう。

以上 プロセスシステムの最適化に関する研究を 科学の歴史的発展の中で 新しい技術科学の一つとして位置づけ その研究の方法論の一般的性質について論じてきた。

ここでもう少し この問題を詳細に検討してみる。

従来のプロセスシステムの最適化に関する研究は、確かに数式モデルを基礎にし、その上で新しい数学的手法と電子計算機<sup>5)</sup>の力を駆使して、いわゆる最適解を求めるという課程を経ている。しかし数多くの演繹的な作業を経て作られたモデルにおいても、多くの不確かさが存在する。

と言うのは、対象としているプロセスシステムとして、どれだけの範囲のものを考えているのか、モデルを微分方程式で表示している場合には、何階の微分方程式でそのモデルを構成しているのか、またモデルの中に含まれているパラメーターの値は、どの程度の精度のものであるのか、あるいは、本来時間的に変動すると考えられるパラメーターを、時間的に変動しない定数パラメーターとして取扱っていないか、等々、プロセスシステムのモデルには、多くの不確かさが存在しているのである。

プロセスシステムの研究は、従来、このような不確かさを十分認識せず、一つの数式モデルを基にして、高等な数学的手法と電子計算機<sup>5)</sup>の力を借りて、数理的な解を得るということに主要な努力が払われてきた。そのため、多大の労力を要して得られた最適解が、実用上、どの程度の意味を持つのか、またその解の信頼性がどの程度あるのか、全く不明のことが多く、プロセスシステムの最適化なる研究が、果して有効なのかどうか疑問視され、さらには、理論と実際のギャップの問題として論議されるようになってきた。<sup>5)</sup>

このように考えると、プロセスシステムの最適化の研究成果が、実際に活用

される前に 理論的研究 あるいは 計算機を利用したシミュレート の段階で  
まだまだ 検討しなければならぬ問題が存在すると考えられる。 即ち  
少なくとも 最適化問題を数式的に構成した際に含まれてくる種々の  
不確かさが、その数理的にえられた解に どのような影響を与えている  
のか また その不確かさを補うためには どのような対策を考えておか  
ねばならないかを、明確にしておかねばならない。

本論文では、従来のプロセスシステムの最適化の研究において 余り注  
目されていなかった 数式モデルの不確かさが プロセスシステムの操作設  
計を考えていく上で どのような影響を与えているのか さらに その不確  
かさを補うためには、設計の段階で どのような検討を加えねばならぬ  
いかを、感度 という概念を導入することによって考察してゆく。

プロセスシステムが 代数方程式系と 常微分方程式系によって、数式  
表現されている場合に、モデル中に含まれてくる種々の不確かさが  
最適化問題の解に及ぼす影響を解析する いわゆる感度解析が、  
どのような数学的手法で取扱いうるのかを 化学プロセスを例にとり  
ながら、検討してゆく。

さらに解析するだけでなく、そのような不確かさが含まれてくるシステムの  
設計問題が 感度という概念を用いることによって、どのように取扱う  
るかを 特に *Design margin* に対する考察を中心として論じてゆく。

## II. 集中定数系の定常最適化と感度解析

### II-1 代数方程式系で表わされるプロセスシステムの最適化

#### § 1-1. 緒論

集中定数系の定常最適化問題は 対象とするプロセスが代数方程式で、評価関数が多変数関数で表現されている場合であるから 数理的には、いわゆる条件付きの多変数関数の最大、最小問題といわれるものである。この種の問題を取扱う方法として、プロセス方程式も、評価関数も線型の場合には線型計画法があり、線型でない場合は一般に非線型計画法といわれる手法がある。線型計画法については G. B. Dantzig<sup>1)</sup>を始めとして多くの研究者によって研究されており、広い分野にわたる適用例がみられる。しかしこの方法にはプロセス方程式 評価関数ともに線型というきわめて大きな制約があるため 化学プロセスの最適化問題解決にはあまり役立たない。プロセス方程式も評価関数も非線型かつ多次元の問題を取扱う手法や研究として Lagrange 乗数法<sup>2)</sup> Kuhn & Tucker<sup>3)</sup>による研究、Bellman の Dynamic programming<sup>4~6)</sup>、Discrete Maximum Principle<sup>7~11)</sup>、Gradient Method<sup>12)</sup>、Multi level Techniques<sup>13~17)</sup>等、多くのものが発表されてきている。ここでは感度解析との関連もあるので、特に Multi-level Technique をとりあげ簡単にのべておく。

#### § 1-2. 最適化の数理的な手法

化学プロセスシステムの中には集中定数系として取扱えるものも少なくない。又、このようなシステムに対して定常最適設計や操作を考えてゆくとき、このような問題は一般に次のように定式化することが出来る。

化学プロセスシステムの多くが複雑かつ大規模であることは周知の事実であるが、このようなシステムは数多くのサブシステムからなっており、いずれのシステムも Fig II-1 に示すような基本的なサブシステムの複雑な結合系から形成されている。

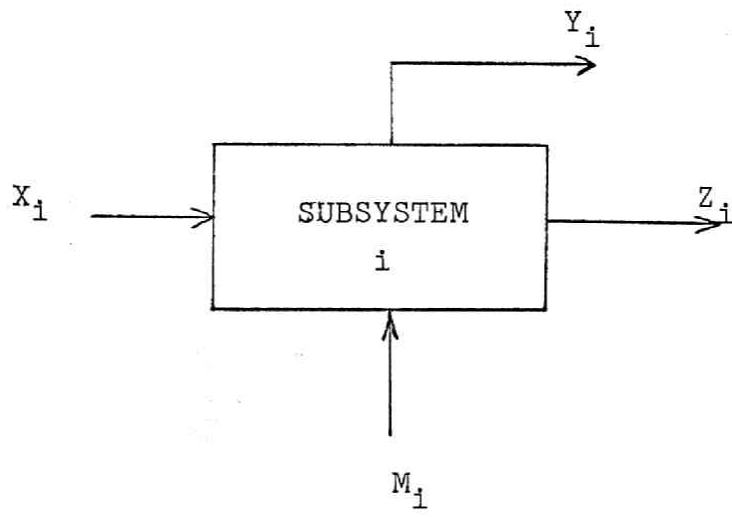


Fig. II-1 A typical subsystem

Fig. II-1 における変数を次のように定義する。

- $X_i$  : 他のサブシステムから  $i$  番目のサブシステムにはいる入力
- $M_i$  : 評価関数を最大または最小にするように選定される  $i$  番目のサブシステムに固有な設計変数または操作変数
- $Y_i$  :  $i$  番目のサブシステムから全システムの外に出てゆく出力で、全て目標値が定められている。  $Y_i$  の内でその値が free であるものは最適化には関係してこないのを除いてある。
- $Z_i$  :  $i$  番目のサブシステムから他のサブシステムへ出てゆく出力

定常状態においては一般にこれらの変数の間には次のような関係が成立している。

$$Z_i = F_i(X_i, M_i, P_i) \quad (II-1)$$

$$Y_i = G_i(X_i, M_i, Q_i) \quad (II-2)$$

$$i = 1, 2, \dots, N$$

- ここに  $Z_i$  :  $n_i$  次元ベクトル
- $Y_i$  :  $m_i$  次元ベクトル
- $X_i$  :  $l_i$  次元ベクトル
- $M_i$  :  $r_i$  次元ベクトル
- $N$  : サブシステムの総数

また  $P_i, Q_i$  は  $i$  番目のサブシステムに固有なプロセス・プラント・パラメーター、 $\times$   $i$  番目のサブシステムに全システム外からはいつてくる入力の規準値を示すパラメーター・ベクトルである。

全システムの定常状態は (II-1)(II-2) 式及び次の各サブシステム間の変数がどのように結合されているかを示す Matching condition によって完全に記述されることになる。

$$X_i = \sum_{j=1}^N [C_{ij}] Z_j \quad (II-3)$$

ここに  $[C_{ij}]$  は  $i$  番目のサブシステムの入力  $X_i$  の内のいずれのものが



幾し番目のサブシステムの入力となるかを示す Matrix である。

さらにこのシステムの評価関数は次のように分離した形で与えられているものとする。

$$F = \sum_{i=1}^N f_i(X_i, M_i) \quad (\text{II-4})$$

従って このように記述されるシステムの定常最適化の問題というのは、(II-4)式の評価関数を最小または最大にする設計変数あるいは操作変数  $M_i$  を (II-1)~(II-3)の束縛条件の下で見出す問題となる。

このように定式化される定常最適化問題の解を求める方法には種々のものが開発されているが、設計変数あるいは操作変数  $M_i$  に制限があって (II-4)式の評価関数の最大、最小を求める問題であるか、それとも単に停留点を求め、それらを比較することによって、極大値、極小値を求めればよいかによって、適用出来る手法も変わってくる。ここではまず  $M_i$  に何ら制限が課せられておらず、単に(II-4)式の評価関数、停留値を (II-1)-(II-3)式の束縛条件下で求める問題を取扱うことにし、その問題に適用可能な手段の内、以下の議論の基本となっており、又、利用価値も高いと考えられる Multi level Technique について簡単にふれる。

(II-1)~(II-4)式の問題の停留解の満たす必要条件は、一般に Lagrange 乗数 (adjoint variable) を導入することによって、次のようにえられる。

$$\frac{\partial L}{\partial X_i} = \frac{\partial f_i}{\partial X_i} + \beta_i' \frac{\partial G_i}{\partial X_i} + \alpha_i' \frac{\partial F_i}{\partial X_i} + \gamma_i' = 0 \quad (\text{II-5})$$

$$\frac{\partial L}{\partial Z_i} = -\alpha_i' + \sum_{j=1}^N \gamma_j' [C_{ji}] = 0 \quad (\text{II-6})$$

$$\frac{\partial L}{\partial M_i} = \frac{\partial f_i}{\partial M_i} + \beta_i' \frac{\partial G_i}{\partial M_i} + \alpha_i' \frac{\partial F_i}{\partial M_i} = 0 \quad (\text{II-7})$$

$$\frac{\partial L}{\partial \alpha_i} = F_i(X_i, M_i, P_i) - Z_i = 0 \quad (\text{II-8})$$

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_i} = G_i(X_i, M_i, Q_i) - Y_i = 0 \quad (\text{II-9})$$

$$\frac{\partial L}{\partial f_i} = \sum_{j=1}^N [C_{ij}] Z_j - X_i = 0 \quad (\text{II-10})$$

$i = 1, 2, \dots, N$

ここに  $L$  は次式で定義される Lagrangean である。

$$L = \sum_{i=1}^N \left\{ f_i + \alpha_i' (F_i - Z_i) + \beta_i' (G_i - Y_i) + \gamma_i' \left( \sum_{j=1}^N [C_{ij}] Z_j - X_i \right) \right\} \quad (\text{II-11})$$

また

$$\frac{\partial F_i}{\partial X_i} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_i'}{\partial X_i'} & \dots & \frac{\partial F_i'}{\partial X_i^{n_i}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F_i^{m_i}}{\partial X_i'} & \dots & \frac{\partial F_i^{m_i}}{\partial X_i^{n_i}} \end{pmatrix} \quad \frac{\partial F_i}{\partial M_i} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_i'}{\partial M_i'} & \dots & \frac{\partial F_i'}{\partial M_i^{r_i}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F_i^{m_i}}{\partial M_i'} & \dots & \frac{\partial F_i^{m_i}}{\partial M_i^{r_i}} \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial G_i}{\partial X_i} = \begin{pmatrix} \frac{\partial G_i'}{\partial X_i'} & \dots & \frac{\partial G_i'}{\partial X_i^{n_i}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial G_i^{l_i}}{\partial X_i'} & \dots & \frac{\partial G_i^{l_i}}{\partial X_i^{n_i}} \end{pmatrix} \quad \frac{\partial G_i}{\partial M_i} = \begin{pmatrix} \frac{\partial G_i'}{\partial M_i'} & \dots & \frac{\partial G_i'}{\partial M_i^{r_i}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial G_i^{l_i}}{\partial M_i'} & \dots & \frac{\partial G_i^{l_i}}{\partial M_i^{r_i}} \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial X_i} = \left( \frac{\partial f_i}{\partial X_i'}, \dots, \frac{\partial f_i}{\partial X_i^{n_i}} \right), \quad \frac{\partial f_i}{\partial M_i} = \left( \frac{\partial f_i}{\partial M_i'}, \dots, \frac{\partial f_i}{\partial M_i^{r_i}} \right)$$

' は転置を表わすものとする。

$$\alpha_i' = (\alpha_i', \dots, \alpha_i^{m_i}), \quad \beta_i' = (\beta_i', \dots, \beta_i^{l_i}), \quad \gamma_i' = (\gamma_i', \dots, \gamma_i^{n_i})$$

(II-1)~(II-4)式の停留解は、(II-5)~(II-10)式を解くことによってえられるが対象としているシステムを構成しているサブシステムの総数が増加しても、又、状態変数の種類が多くなってもこれらの方程式を直接解くことは、はなはだ困難になってくる。これらの方程式を出来るだけ組織的にかつ Digital computer によって扱いやすいように一つの Algorithm の形にのせて解く方法が必要なのであるが、そのために開発された Multi-level Technique の内、C. B. Brosilow, L. S. Lasdon & J. D. Pearson による feasible method<sup>(4)</sup> についてのべる。

### Feasible Method

(II-5)~(II-10)式で示されている必要条件をもう少し詳しく考察してみるとあるしに対して (II-5)(II-7)(II-8)(II-9)式は、第  $i$  番目のサブシステムに関する変数、即ち  $M_i, X_i, Z_i$ 、及び Lagrange 乗数  $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$  のみを含んでいる。(II-5)(II-7)(II-8)(II-9)式は次の関数が

$$f_i(M_i, X_i) \quad (II-12)$$

次式を束縛条件として

$$F_i(X_i, M_i, P_i) = Z_i^0 \quad (II-13)$$

$$G_i(X_i, M_i, Q_i) = Y_i \quad (II-14)$$

$$X_i = \sum_{j=1}^N [C_{ij}] Z_j^0 = X_i^0 \quad (II-15)$$

$M_i, X_i$  に関して極値をとるための必要条件と一致する。ここに  $Z_i^0$  は既知の可変パラメータと考える。このことから第  $i$  番目の subproblem として次の問題が定式化される。

#### Subproblem $i$

(II-13)~(II-15)を束縛条件とし、 $f_i(M_i, X_i^0)$  に極値を与える

$M_i$  を見い出せ。

そうすると subproblem の解  $M_i$  はパラメータ  $Z_1^0, \dots, Z_N^0$  に依存していることがわかる。従って  $Z_i^0$  がもとの問題 (Integrated Prob.) の解と一致するよ

うに選ばれれば、そのときの subproblem の解は (II-5)~(II-10) 式の integrated problem の解がみたす必要条件を全てみたすことになり、

(II-1)~(II-4) 式で定式化された極値問題がとけたことになる。

しかし任意に選ばれた  $Z_i^0$  に対して (II-6) 式はみたされないので、2nd-level における coordination algorithm を定義する。即ち (II-6) 式がみたす  $Z_i^0$  をどのようにして見い出せばよいかを定式化する必要がある。

ここで注意すべきことは、 $Z_i^0$  の選び方がどうあろうと 全システムを分解して考えてはいるが、この  $Z_i^0$  に対してとかれた解は最適解ではないが、各 system 間の matching condition の関係を常にみたしていることである。このことから本方法が feasible method と呼ばれているのである。

次にこの 2nd-level における coordination algorithm についてのべる。この方法は feasible 即ち、 $Z_i^0$  の選び方にかかわらず、(II-1)~(II-3) 式の束縛条件は常にみたされていることから (II-11) 式のラグランジアンは

$$L = \sum_{i=1}^N f_i (=F) \quad (II-16)$$

となるのがわかる。この関係は束縛条件 (II-1)~(II-3) 式を満足する全ての点 即ち feasible point に対して成立し、

$$\frac{\partial L}{\partial Z_i} = \frac{\partial F}{\partial Z_i} \quad (II-17)$$

が成立する。しかし  $\partial F / \partial Z_i$  は adjustable parameter  $Z_i$  についての  $F$  の gradient を示しており、これは  $Z_i$  を調整するのに必要な情報を与えていることになる。従って

$$(Z_i)_{n+1} = (Z_i)_n + \kappa L_{Z_i} \quad \kappa \geq 0. \quad (n: \text{iteration no. } (II-18))$$

は  $\kappa$  を小さくするとき 各 iteration ごとに  $F$  のより大きい値を与えるような  $Z_i$  を決定してゆく一つの algorithm になることがわかる。

従ってこの feasible method で (II-1)~(II-5) 式の問題の解を得ようとするときの計算手段は次のようになる。

(1).  $Z$  に対して適当な  $Z_i^0$  を仮定しこれを 1st level に送る。

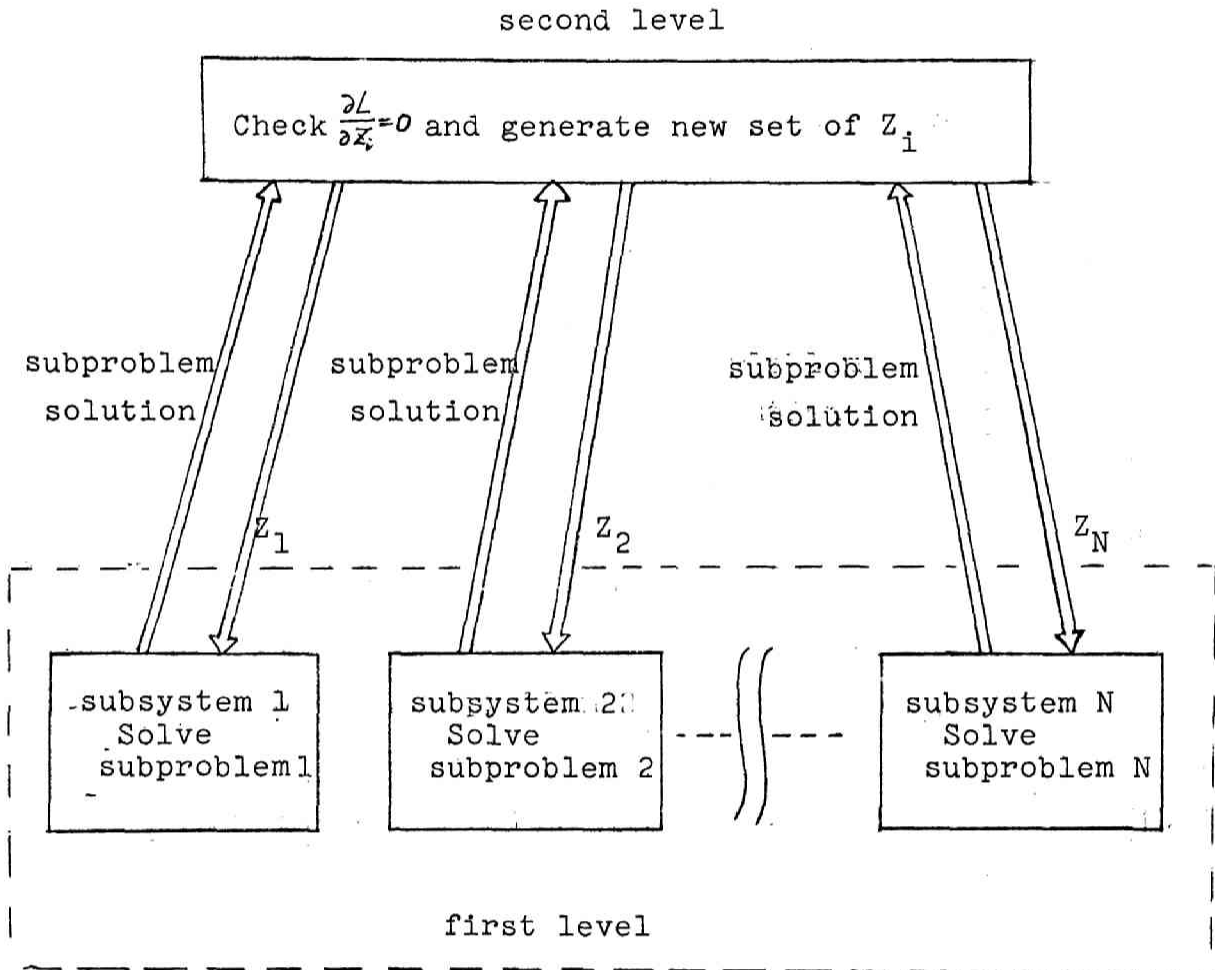


Fig. II-2 Schematic diagram of two level procedure



(2) 1st levelにおいて、各 subproblem をとき  $M_i(Z^0)$ ,  $X_i(Z^0)$ ,  $Y_i(Z^0)$  をうる。

(3)  $\alpha_i, \gamma_i$  を 2nd level に送り、そこで

$$\frac{\partial L}{\partial Z_i} = -\alpha_i' + \sum_{j=1}^N \beta_j' [C_{ji}]$$

を計算する。

一般に全ての  $i$  について  $\frac{\partial L}{\partial Z_i} \neq 0$ 。

(4)  $|\frac{\partial L}{\partial Z_i}| \rightarrow 0$  にするように  $Z_i$  の新しい組を計算し、これを first-level に送る。

(5) (2) の step にもとどり、 $\frac{\partial L}{\partial Z_i} = 0$  がみたされるまでくり返す。

以上の手順を示すのが、Fig II-2 である。

### § 1-3 結論

ここでは、本論文で以下必要になる最小限度の最適化方法についての理論、特に Multi level Technique の feasible Method について述べた。現在も大規模かつ複雑なプロセスの最適化問題が容易に取扱いうる方法についての研究が活発に進められており<sup>(18~21)</sup>、今後さらに計算時間の短縮、取扱いうる問題の大きさ、即ち変数の数や拘束条件が増大した場合、あるいは目的関数が滑らかでない場合等が容易に取扱いうるようになろう。それによって、対象としている問題を計算上の都合から元の問題の意味がそこなわれるような簡略化を行わなくてもよくなり、より現実的な問題が解決され、プロセスの最適化が今まで以上に有用かつ重要な問題となろう。

(II-1) 参考文献

- 1) Dantzig, G.B.; Linear Programming and Extension;  
Princeton, (1963)
- 2) Bliss, G.A.; Lecture on the Calculus of Variations;  
Univ. of Chicago press. (1946)
- 3) Kuhn, H.W. and A.W. Tucker;  
Nonlinear programming; Second Berkeley Symposium on  
Mathematical Statistics and Probability (1950)
- 4) Bellman, R.; Dynamic Programming; Princeton, (1957)
- 5) Roberts, S.M.; Dynamic Programming in Process Control and  
Chemical Engineering; Academic, (1964)
- 6) Nemhauser, G.L.; Introduction to Dynamic Programming;  
John Wiley, (1966)
- 7) Rozonoer, L.I.;  
The maximum principle of L.S. Pontryagin in optimal-  
system theory; Automat. Telemekh. Moscow, Vol.20,  
p.1320,1441,1561 (1960)
- 8) Katz, S.;  
A discrete version of Pontryagin's maximum principle;  
J. Electron. Control, Vol.13, p.179 (1962)
- 9) Katz, S.;  
Best operating points for staged system; I.E.C.  
Fundamentals, Vol.1, p.226 (1962)
- 10) Fan, L.T. and C.S. Wang; The Discrete Maximum Principle;  
John Wiley, (1964)
- 11) Takamatsu, T., E. Nakanishi, and I. Hashimoto;  
向流阶段操作の定常最適化 . 制御工学. vol.8. no.9 p462 (1964)
- 12) Kelley, H.J.; Optimization Techniques; edited by G. Leitman  
Academic (1962)

- 13) Lasdon, L.S. et al.;  
A multi-level technique for optimization; Proc. of  
J.A.C.C., p85 (1965)
- 14) Brosilow, C.B. et al.;  
Feasible optimization methods for interconnected  
systems; Proc. of J.A.C.C., p79 (1965)
- 15) Mesarovic, M.D. et al.;  
A multi-level structure for a class of linear dynamic  
optimization problem; Proc. of J.A.C.C., p93 (1965)
- 16) Brosilow, C.B. et al.;  
A two level optimization technique for recycle processes;  
Proc. of A.I.Ch.E.-I.E.C. Joint Meeting, London, p67  
(1965)
- 17) Broisilow, C.B. and E. Nunez;  
Multi-level optimization applied to a catalytic cracking  
plant; Canadian J. of C.E., Vol. 46, p205 (1968)
- 18) Fletcher, R. and C.M. Reeves;  
Function minimization by conjugate gradients; British  
Comp. J., Vol. 7, p149 (1964)
- 19) Fletcher, R. and M.J.D. Powell;  
A rapidly convergent descent method for minimization;  
British Comp. J., Vol. 6, p163 (1963)
- 20) Goldfarb, D. and L. Lapidus;  
Conjugate gradient method for non-linear programming  
problems with linear constraints; I.E.C. Fundamentals,  
Vol. 7, No. 1, p142 (1968)
- 21) Lasdon, L.S., S.K. Mitter and A.D. Waren;  
The conjugate gradient method for optimal control problem;  
I.E.E.E. Trans. on A.C., Vol. AC-12, No. 2, p132 (1967)

## II-2 代数方程式系で表わされるプロセスシステムの 感度解析

### § 2-1 緒論

II-1 において、定常最適化問題の定式化と、その問題の解法の一つについてのべてきたが、そこにおいては対象としているプロセスシステムが (II-1)~(II-3) 式のように明確に数式表現されているという仮定から出発している。ところが (II-1)~(II-3) のような数学的モデル表現というのは実際の現象をある程度近似したものにすぎないことや、もともと動的なものを近似的、静的に取扱っているという点から考えても、その数式表現中に含まれているパラメータ、 $P$ 、 $Q$  はある程度誤差を含んだものであり、またプロセスの操業中にも種々の原因で変化するものと考えねばならない。従ってあるプロセスシステムの定常最適化問題というのも数式モデルを基にして一つの評価関数を最大、最小にする最適な設計変数や操作変数の値を求めれば数学的にはそれで解決されたのかも知れないが、実際のプロセスシステムにその解を適用しようとする時には、数式モデル中のパラメータ  $P$ 、 $Q$  に含まれる誤差、あるいはそれらの不測の変化に対しても、その最適解を用いて十分であるというある程度の保証がなければ、より実際的な観点からすると、最適化問題が解決されたことにはならないのである。II-1 でのべた定常最適化問題も、より実際的な立場から見たとき、必然的に、モデル中のパラメータ変化に対して、最適な状態というのは、どの程度悪くなるのか、又対象としているプロセスシステムの一定にしておきたい出力がどの程度その目標値から変動してくるのか、といった感度解析が必要となってくるのである。<sup>1,2,3)</sup>

またプロセスシステムの最適操作量が II-1 でのべた方法によって計算上は求まったとしても、その最適値に、正確に実際のプロセスシステムにおける操作量を維持することは、はなはだ困難である。このとき最適操作量の微小変動に対して、評価関数がどの程度の影響をうけるかを知ることが出来れば、許容される評価関数の変動値内にプロセスシステムの状態を維持するには、各最適操作量の値をどの程度の精度で維持

することが必要なのかを知ることが出来る。

§II-1 でのべた定常最適化問題が、もともと動的なものを近似的に静的なものとして取扱った結果であることを重視すれば、このような感度解析を行なうことによって、即ち、パラメーター、操作量等のさけられない変動に対してうけるシステムの影響を知ることによって、プロセスシステムの設計や、その制御システムの設計の際に、必要な情報をうる事が出来るのである。又、一つのプロセスシステムの設計において、種々の入力変動や外乱に対して出来るだけ影響をうけないシステム、即ち、*low sensitive* なシステムを設計するにはどのようにすればよいかという問題に対しても、一つの情報を与えてくれるのである。

このような感度解析の結果を設計問題にどのように応用してゆくべきかについての考察は §II-3 でのべることにし、ここでは II-1 でのべた定常最適化問題をより実際的な見地からみて有用なものにするために、是非欠くことの出来ない感度解析を大きく次の3つに分類し、それぞれの問題に対して、どのような方法で接近してゆくべきかを論じてゆく。

即ち以下の節では

1. パラメーターあるいは操作量変動に対するプロセスシステムの出力の感度——プロセスシステムの数式モデル中に含まれるパラメーターの変動に対して、一定値に保ちたいシステム出力がうける影響
2. パラメーター変動に対する評価関数の感度——プロセスシステムの数式モデル中に含まれるパラメーターの変動に対する評価関数のうける感度
3. 最適操作量に対する評価関数の感度——操作量の最適値からのずれが評価関数に対して与える影響

の3つの問題を取りあげる。



## § 2-2. パラメータ変動に対する感度

§ 2-1 においてのべたように II-1 で定式化された定常最適化問題において、対象としているプロセスシステムの数式表現である (II-1)~(II-2) に含まれているパラメータ  $P, Q$  について、その規準値とその許容誤差の範囲のみが与えられている場合、パラメータの値がある範囲を常に変動していると考えねばならないことがしばしばある。このようなパラメータ変動が、一定にしておきたいプロセスシステムの入力に与える影響と、評価関数に与える影響を、どのようにすれば知ることが出来るかについて本節でのべる。

### i) 一定にしておきたいシステムの入力に対するパラメータの感度<sup>4)</sup>

今、(4)式の評価関数を最大又は最小にする最適な設計変数、操作変数  $M_i$  の値は、§II-1 でのべた方法によって決定されていると仮定する。このとき、プロセスシステムのモデル中に含まれているパラメータ  $P_i, Q_i, (i=1, \dots, N)$  が、その規準値から変動したとすると、システム出力  $Y_i$  は一定値にしておきたい値  $b^i$  から変動する。

即ち、パラメータ  $P_i, Q_i$  の規準値  $\bar{P}_i, \bar{Q}_i$  からの変動量を  $\delta P_i, \delta Q_i$  とすると、このパラメータ変動のために、状態変数  $Y_i, X_i, Z_i$  もその最適状態から  $\delta Y_i, \delta X_i, \delta Z_i$  だけ変動することになる。

これらの変動量  $\delta P_i, \delta Q_i, \delta Y_i, \delta X_i, \delta Z_i$  の間に成立する関係は (II-1)~(II-4) 式で示される問題を解きなおさなくても、II-1 で導入した adjoint variable <sup>(5,6,7)</sup> を利用することによって容易に求めることが出来る。即ち、一次の変分方程式が (II-1)~(II-3) 式から次のように与えられる。

$$\delta Z_i = \frac{\partial F_i}{\partial X_i} \delta X_i + \frac{\partial F_i}{\partial P_i} \delta P_i \quad (\text{II-19})$$

$$\delta Y_i = \frac{\partial G_i}{\partial X_i} \delta X_i + \frac{\partial G_i}{\partial Q_i} \delta Q_i \quad (\text{II-20})$$

$$\delta X_i = \sum_{j=1}^N [C_{ij}] \delta Z_j \quad (\text{II-21})$$

ここで次式を満足する adjoint variable

$$\alpha_i = (\alpha_i^1, \alpha_i^2, \dots, \alpha_i^{m_i})', \quad \beta_i = (\beta_i^1, \beta_i^2, \dots, \beta_i^{l_i}), \quad \gamma_i = (\gamma_i^1, \gamma_i^2, \dots, \gamma_i^{n_i})$$

を導入する。

即ち

$$\alpha_i' \frac{\partial F_i}{\partial X_i} + \beta_i' \frac{\partial G_i}{\partial X_i} - \gamma_i' = 0 \quad (\text{II-22})$$

$$-\alpha_i + \sum_{j=1}^N [C_{ji}]' \gamma_j = 0 \quad (\text{II-23})$$

<境界条件>

$$\left. \begin{aligned} \beta_n^m &= 1, & \beta_n^j &= 0 & j &\neq m \\ \beta_i^j &= 0 & i &\neq n \text{ and } j &= 1, 2, \dots, l_i \\ & & & & i &= 1, 2, \dots, N \end{aligned} \right\} (\text{II-24})$$

この adjoint variable  $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$  と (II-19) (II-20) (II-21) の両辺との内積をとり、 $i$  について辺々加え合わせることにより、次式がえられる。

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \beta_i' \delta Y_i &= \sum_{i=1}^N \left[ \left( \alpha_i' \frac{\partial F_i}{\partial X_i} + \beta_i' \frac{\partial G_i}{\partial X_i} - \gamma_i' \right) \delta X_i \right. \\ &\quad + \left( -\alpha_i' + \sum_{j=1}^N \gamma_j' [C_{ji}] \right) \delta Z_i \\ &\quad \left. + \left( \beta_i' \frac{\partial G_i}{\partial M_i} + \alpha_i' \frac{\partial F_i}{\partial M_i} \right) \delta M_i \right] \quad (\text{II-25}) \\ &\quad + \sum_{i=1}^N \left( \alpha_i' \frac{\partial F_i}{\partial P_i} \delta P_i + \beta_i' \frac{\partial G_i}{\partial Q_i} \delta Q_i \right) \end{aligned}$$

(II-25)式において その adjoint variable の値として (II-22)~(II-24)式の解を用いると (II-25)式はさらに次のように簡単化される。

$$\begin{aligned} \delta Y_n^m &= \sum_{i=1}^N \left[ (\beta_i)'_{nm} \frac{\partial G_i}{\partial M_i} + (\alpha_i)'_{nm} \frac{\partial F_i}{\partial M_i} \right] \delta M_i \\ &+ \sum_{i=1}^N \left[ (\alpha_i)'_{nm} \frac{\partial F_i}{\partial P_i} \delta P_i + (\beta_i)'_{nm} \frac{\partial G_i}{\partial Q_i} \delta Q_i \right] \end{aligned} \quad (\text{II-26})$$

ここに  $(\beta_i)_{nm}$ ,  $(\alpha_i)_{nm}$  は境界条件が (II-24)式 のときの (II-22)(II-23)式の解である。

この (II-26)式は パラメータベクトル  $P_i, Q_i$  に その規準値から  $\delta P_i, \delta Q_i$  なる変動があったときに 今一定にしておきたい 第  $n$  番目のサブシステムの 第  $m$  番目の システム出力  $Y_n^m$  が、その目標値からどの程度変動するかを示している。

従って一般にパラメータが その規準値から変動したとき 任意のシステムの出力が その目標値からどれだけ変動するかは、上述した議論から 次のベクトル形式の方程式によって容易に求めることができる。

即ち

$$\begin{aligned} \delta Y_n &= \sum_{i=1}^N \left[ (B_i)_n \frac{\partial G_i}{\partial M_i} + (A_i)_n \frac{\partial F_i}{\partial M_i} \right] \delta M_i \\ &+ \sum_{i=1}^N \left[ (A_i)_n \frac{\partial F_i}{\partial P_i} \delta P_i + (B_i)_n \frac{\partial G_i}{\partial Q_i} \delta Q_i \right] \end{aligned} \quad (\text{II-27})$$

ここに  $(A_i), (B_i)$  はそれぞれ  $l_n \times m_i$  及び  $l_n \times l_i$  の matrix で、これらは adjoint system と呼ばれ、次の方程式及び境界条件をみたすものである。

$$(A_i)_n \frac{\partial F_i}{\partial x_i} + (B_i)_n \frac{\partial G_i}{\partial x_i} - (\Gamma_i)_n = 0. \quad (\text{II-28})$$

$$-(A_i)'_n + \sum_{j=1}^N [(C_j i)'] (\Gamma_j)'_n = 0 \quad (\text{II-29})$$

$$(B_n)_n = E, \quad (B_i)_n = 0 \quad (i \neq n) \quad (\text{II-30})$$

ここに  $\Gamma_i$  は  $l_n \times m_i$  matrix であり、また  $E$  は unit matrix,  $0$  は null matrix を示すものとする。

ii) パラメータ変動に対する評価関数感度

次に システムのパラメータ変動が、プロセスシステムの操作、設計の良否を判定する基準である評価関数に、どのような影響が出てくるかについて考察する。

いま 対象とするプロセスシステムの操作量は最適値に維持されているとき、パラメータ  $P_i, Q_i$  に変動があると、その操作量はもはや最適ではなく、(II-1)(II-2)(II-3), (II-4) 式で表わされるプロセスシステムの定常状態及び評価関数  $F$  は次のように変化する。

すなわち

$$\delta Z_i = \frac{\partial F_i}{\partial X_i} \delta X_i + \frac{\partial F_i}{\partial P_i} \delta P_i \quad (\text{II-31})$$

$$\delta Y_i = \frac{\partial G_i}{\partial X_i} \delta X_i + \frac{\partial G_i}{\partial Q_i} \delta Q_i \quad (\text{II-32})$$

$$\delta X_i = \sum_{j=1}^N [C_{ij}] \delta Z_j \quad (\text{II-33})$$

また 評価関数  $F$  については

$$\delta F = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\partial f_i}{\partial X_i} \delta X_i \right] \quad (\text{II-34})$$

ここで (II-1) ~ (II-4) で定式化される定常最適化問題を解く際に導入した次式を満たす adjoint system  $\alpha, \beta, \sigma$  を導入する。

$$\frac{\partial f_i}{\partial X_i} + \beta_i' \frac{\partial G_i}{\partial X_i} + \alpha_i' \frac{\partial F_i}{\partial X_i} - \sigma_i' = 0 \quad (\text{II-35})$$

$$-\alpha_i' + \sum_{j=1}^N \sigma_j' [C_{ji}] = 0 \quad (\text{II-36})$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial M_i} + \beta_i' \frac{\partial G_i}{\partial M_i} + \alpha_i' \frac{\partial F_i}{\partial M_i} = 0 \quad (\text{II-37})$$

まず (II-31)(II-32)(II-33) の各式に  $\alpha_i, \beta_i, \sigma_i$  を作用させると

$$\alpha_i' \delta Z_i = \alpha_i' \frac{\partial F_i}{\partial X_i} \delta X_i + \alpha_i' \frac{\partial F_i}{\partial P_i} \delta P_i \quad (\text{II-38})$$

$$\beta'_i \delta Y_i = \beta'_i \frac{\partial f_i}{\partial X_i} \delta X_i + \beta'_i \frac{\partial f_i}{\partial \theta_i} \delta \theta_i \quad (\text{II-39})$$

$$\gamma'_i \delta X_i = \gamma'_i \sum_{j=1}^N [C_{ij}] \delta Z_j \quad (\text{II-40})$$

さらに最適化問題を解く際に求まっている adjoint system の値は  $\delta Y_i = 0$  の条件下で求めたものであるから、(II-38)~(II-40) 式の辺々を  $\delta$  について加え合わせることによって

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \left[ \gamma'_i - \alpha'_i \frac{\partial F_i}{\partial X_i} - \beta'_i \frac{\partial f_i}{\partial X_i} \right] \delta X_i \\ = \sum_{i=1}^N \left[ \sum_{j=1}^N \gamma'_j [C_{ji}] - \alpha'_i \right] \delta Z_i + \sum_{i=1}^N \left[ \alpha'_i \frac{\partial F_i}{\partial P_i} \delta P_i + \beta'_i \frac{\partial f_i}{\partial \theta_i} \delta \theta_i \right] \end{aligned} \quad (\text{II-41})$$

ここで (II-35) (II-36) 及び (II-34) 式に注意することによって 評価関数の変動量は次式のように求まる。

$$\delta F = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f_i}{\partial X_i} \delta X_i = \sum_{i=1}^N \left[ \alpha'_i \frac{\partial F_i}{\partial P_i} \delta P_i + \beta'_i \frac{\partial f_i}{\partial \theta_i} \delta \theta_i \right] \quad (\text{II-42})$$

さらに (II-42) 式に含まれている adjoint system の値は、操作量  $M_i$  が最適値のときの各状態変数に対して評価しているから、既に最適化問題を解く際に求まっているのである。したがって、プロセスシステムのパラメータ変動が評価関数に与える影響は、プロセス方程式を変動したパラメータ値に対して解きなおさなくても、(II-42) 式から容易に求まることがわかる。

### §2-3 操作量変動に対する感度<sup>8.9)</sup>

Ⅱ-1でのべた化学プロセスの定常最適化問題においては、流量を操作量としてとることが多いが、流量の測定は比較的簡単であるとはいえ、相当大きい誤差を含むものである。従って、たとえ流量の最適操作量が数理的に求まったとしても、その値を厳密に維持することは不可能に近く、流量のような最適操作量は、実際のプロセスプラントにおいては、一般にその最適値から少しずれた所に維持されていると考えるのが自然であろう。そうすると、この操作量の最適値からのずれが評価関数に対して持つ影響が大きいか、小さいか、特にプロセスが多段結合系である場合、各段にある操作量の最適値からのずれが評価関数に与える影響は、いずれの段の操作量についても同程度の影響力を持つものかどうか、あるいは特定の段の操作量の影響のみが異常に大きくなる可能性があるかどうか、またプロセスの結合形式によって、各段の操作量の変動の影響はどのように異なってくるか、といったことを知る必要がある。

即ち、化学プロセスの最適操作、設計を考える場合、単に評価関数の大小だけでなく、各操作量をどれ程、精確に最適値に維持しなければならないか、また操作量の最適値からのずれが、評価関数に大きな影響を与えないような結合形式としては、どのようなものを選択すればよいか、といった問題を考えてゆく際の一つの判定基準として、各操作量の感度をとることが考えられる。ここでは、各段の操作量の最適値からのずれが評価関数に与える影響、即ち各操作量の感度について考察する。

ここでは記述を簡単化するために、並流及び単一 Feed back をもつ多段結合系のプロセスに限定して、最適化問題の解法として有力な Discrete Maximum Principle を応用する方法について考察し、抽出プロセスの適用例を示す。

#### i) 並流多段結合系における操作量の評価関数に及ぼす感度

Fig. Ⅱ-3 に示すような並流多段結合プロセスの最適化問題は、Ⅱ-1 で述べたシステムの一つの退化した形であり、このプロセスは次のように一般的に



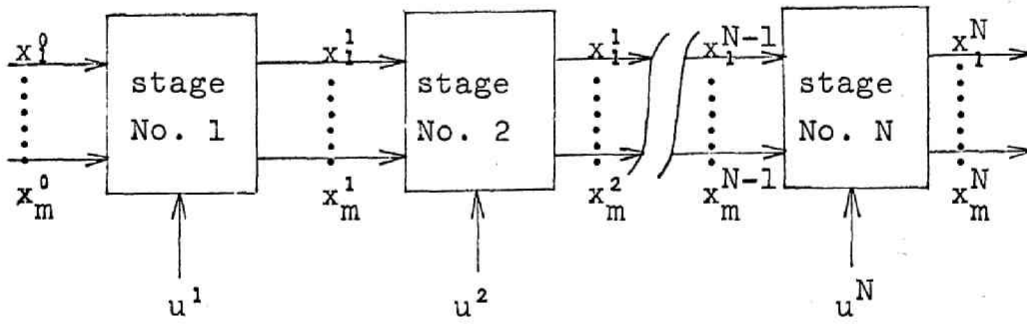


Fig. II-3 Multi-stage cocurrent process

記述できる。

〈プロセス方程式〉

$$x_i^n = F_i(x^{n-1}, u^n) \quad (\text{II-43})$$

〈初期条件〉

$$x_i^0 = a_i \quad (\text{II-44})$$

〈評価関数〉

$$x_i^N \longrightarrow \text{Min.} \quad (\text{II-45})$$

このシステムの最適化問題において Discrete Maximum Principle を用いることによって 最適操作量  $u_1, \dots, u_N$  を容易に求めることができる。

しかし  $u^n$  が  $\varepsilon$  だけ変動したとしても その変動が評価関数  $x_i^N$  に与える影響は  $n$  によって すなわち 何番目の段の操作量であるかによって異なるものと考えられる。もしある段の操作量の変動のみが  $x_i^N$  に非常に大きい影響を与え 他の段の操作量は少々変動しても  $x_i^N$  に大した影響がないことが明らかとなれば  $x_i^N$  に大きい影響を与える段の操作量は最適値によく一致させることが必要であるが その他の段の操作量については 最適値に一致させるということ。あるいは その操作量の最適値からのずれをそれほど重要に考えなくてもよいことがわかる。

ここでは 各段の操作量の変動の  $x_i^N$  に与える影響を 最適解を出すときに導入する adjoint system を利用して どのように知ることができるかを示す

Discrete Maximum Principle では 最適操作量を求めるのに 操作量  $u^n$  の評価関数  $x_i^N$  に及ぼす first order の変動量が零になるような  $u^n$  を求めた。したがって  $u^n$  の変動が  $x_i^N$  に与える影響は first order の摂動論では求められず、2nd order 以上の変動について調べる必要がある。ここでは全ての変動量を 2nd order まで考慮して考察する。

今  $n = \nu$  番目の段の操作量  $u^\nu$  のみが最適値  $\overline{u^\nu}$  から変動し その他の段の操作量が最適値のままであったとすると

$$\text{すなわち} \quad u^\nu = \overline{u^\nu} + \varepsilon \quad \varepsilon: \text{small.} \quad (\text{II-46})$$

$$u^n = \overline{u^n} \quad n=1, 2, \dots, \nu-1, \nu+1, \dots, N \quad (\text{II-47})$$

なる操作量の変動に対して 各段の状態変数は  $\overline{x_i^n}$  から次のように変化する。

$$x_i^n = \bar{x}_i^n + \varepsilon y_i^n + \varepsilon^2 z_i^n + o(\varepsilon^3) \quad i=\nu, \nu+1, \dots, N \quad (\text{II-48})$$

一方、各段の操作量が最適値であった場合の状態変数  $\bar{x}_i^n$  は、

$$\bar{x}_i^n = F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n) \quad (\text{II-49})$$

であり、 $\nu$  番目の段の操作量のみが最適値から (II-46) 式のように変動している場合、各段の状態変数は次のように与えられる。

$$x_i^\nu = F_i(\bar{x}^{\nu-1}, u^\nu) \quad (\text{II-50})$$

$$x_i^n = F_i(x^{n-1}, \bar{u}^n) \quad n=\nu+1, \dots, N \quad (\text{II-51})$$

したがって、今操作量に変動のある段より、出口に近い任意の段における状態変数の first 及び 2nd order の変動量は (II-48)~(II-51) 式より次のように求まる。

$$\begin{aligned} n=\nu: \quad \varepsilon y_i^\nu + \varepsilon^2 z_i^\nu &= F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu + \varepsilon) - F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu) + o(\varepsilon^3) \\ &= \frac{\partial F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial \bar{u}^\nu} \varepsilon + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial (\bar{u}^\nu)^2} \varepsilon^2 + o(\varepsilon^3) \end{aligned} \quad (\text{II-52})$$

$$\begin{aligned} \nu+1 \leq n \leq N: \quad \varepsilon y_i^n + \varepsilon^2 z_i^n &= F_i(x^{n-1}, \bar{u}^n) - F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n) + o(\varepsilon^3) \\ &= \varepsilon \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1}} y_j^{n-1} + \varepsilon^2 \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1}} z_j^{n-1} \\ &\quad + \varepsilon^2 \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1} \partial \bar{x}_k^{n-1}} y_j^{n-1} y_k^{n-1} + o(\varepsilon^3) \end{aligned} \quad (\text{II-53})$$

したがって状態変数の first order の変動量  $\varepsilon y_i^n$  に対しては  $n=\nu$  番目の段よりあとに対して次の関係が成立する。

$$n=\nu: \quad y_i^\nu = \frac{\partial F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial \bar{u}^\nu} \quad (\text{II-54})$$

$$i=1, 2, \dots, m$$

$$\nu+1 \leq n \leq N: \quad y_i^n = \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1}} y_j^{n-1} \quad (II-55)$$

$i=1, 2, \dots, m$

そこでこの状態変数の first order の変動量  $\varepsilon y_i^n$  の係数のみたす方程式に対する adjoint system を、最適操作量を求める際に導入したのと同じようにとる。

$$\text{すなわち} \quad \left\{ \begin{array}{l} \lambda_i^{n-1} = \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_j(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_i^{n-1}} \lambda_j^n \\ \lambda_i^N = \delta_{i1} \end{array} \right. \quad (II-56)$$

(II-52), (II-53) 式とこの新しく導入した adjoint system との関係は

$$n=\nu: \quad \varepsilon \sum_{i=1}^m y_i^\nu \lambda_i^\nu + \varepsilon^2 \sum_{i=1}^m z_i^\nu \lambda_i^\nu = \varepsilon \sum_{i=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial \bar{u}^\nu} \lambda_i^\nu + \varepsilon^2 \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial (\bar{u}^\nu)^2} \lambda_i^\nu \quad (II-57)$$

$$\begin{aligned} \nu+1 \leq n \leq N: \quad \varepsilon \sum_{i=1}^m y_i^n \lambda_i^n + \varepsilon^2 \sum_{i=1}^m z_i^n \lambda_i^n &= \varepsilon \sum_{i=1}^m y_i^{n-1} \lambda_i^{n-1} + \varepsilon^2 \sum_{i=1}^m z_i^{n-1} \lambda_i^{n-1} \\ &+ \varepsilon^2 \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \lambda_i^n \sum_{j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1} \partial \bar{x}_k^{n-1}} y_j^{n-1} y_k^{n-1} \end{aligned} \quad (II-58)$$

となる。したがって  $n=\nu$  番目の段の操作量が最適値から  $\varepsilon$  だけずれたとき、今最小にしたい評価関数  $x^N$  の first, 及び 2nd order の変動量は、(II-56)~(II-58) 式を考慮することによって次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \varepsilon y_1^N + \varepsilon^2 z_1^N &= \varepsilon \sum_{i=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial \bar{u}^\nu} \lambda_i^\nu + \varepsilon^2 \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial (\bar{u}^\nu)^2} \lambda_i^\nu \\ &+ \varepsilon^2 \frac{1}{2} \sum_{n=\nu+1}^N \sum_{i=1}^m \lambda_i^n \sum_{j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1} \partial \bar{x}_k^{n-1}} y_j^{n-1} y_k^{n-1} \end{aligned} \quad (II-59)$$

ところが  $\bar{u}^\nu$  は  $x^N$  を最小にする最適操作量であるから

$$\sum_{i=1}^m \lambda_i^\nu \frac{\partial F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial \bar{u}^\nu} = 0 \quad (II-60)$$

したがって、 $x_i^N$  の first order の変動量  $\varepsilon y_i^N$  は零となる。

結局  $n = \nu$  番目の段の操作量が その最適値から  $\varepsilon$  だけずれたとき、 $x_i^N$  の最適値からの変動量係数  $Z_i^N$  (これを評価関数に対する感度係数と呼ぶ)

$$Z_i^N = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \frac{\partial^2 F_i(x^{n-1}, u^\nu)}{\partial (u^\nu)^2} \lambda_i^\nu + \frac{1}{2} \sum_{n=\nu+1}^N \sum_{i=1}^m \lambda_i^n \sum_{j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_i(x^{n-1}, u^n)}{\partial x_j^{n-1} \partial x_k^{n-1}} y_j^{n-1} y_k^{n-1} \quad (\text{II-61})$$

で与えられる。したがって実際にどの段の操作量の変動が評価関数  $x_i^N$  に最も大きい影響を与えるかは (II-54), (II-55), (II-56) 式を  $\nu = 1 \dots N$  について解き、 $Z_i^N$  を (II-61) 式から求め、その値の大きさを比較することによって知ることが出来る。

## ii) 単-Feed back をもつ並流多段結合プロセスにおける

Fig II 4 に示す Feed back をもつ並流多段結合プロセスにおける各段の操作量の変動が 評価関数に及ぼす影響を知るには、どのようにすればよいかを次に示そう。

Fig. II. 4 のように示されるプロセスにおいては、次の関係が一般に成立する。

< プロセス方程式 >

$$x_i^n = F_i(x^{n-1}, u^n) \quad \begin{array}{l} i=1, 2, \dots, m \\ n=1, 2, \dots, N \end{array} \quad (\text{II-62})$$

< Junction condition >

$$x_i^o = G_i(x^f, x^N, L, R) \quad i=1, 2, \dots, m \quad (\text{II-63})$$

< 初期条件 >

$$L = L^o \quad L^o: \text{定数} \quad (\text{II-64})$$

$$x_i^f = a_i \quad a_i: \text{定数} \quad i=1, 2, \dots, m$$

< 評価関数 >

$$x_i^N \rightarrow \text{Min.} \quad (\text{II-65})$$

上述のプロセスにおいて、最適操作量  $\bar{u}^1, \dots, \bar{u}^N$  が求まったとき、各操作量が、その最適値から変動したときに、評価関数に及ぼす影響は、i) と同様に adjoint system を利用することによって、以下のように求められる。

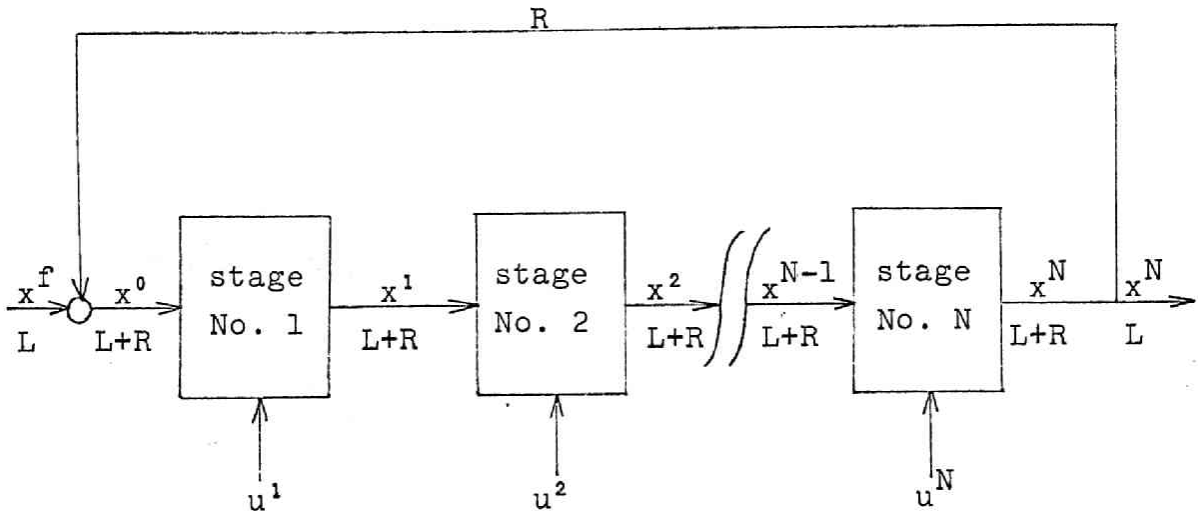


Fig. II-4 Multi-stage cocurrent process with a recycle

ii-1)  $1 \leq n \leq N$  における操作量の変動の影響

今  $n=\nu$  番目の段の操作量  $u^\nu$  のみに変動が与えられ、その他の段の操作量は最適値のままであったとする。

すなわち 
$$u^\nu = \bar{u}^\nu + \varepsilon \quad (\text{II-66})$$

$$u^n = \bar{u}^n \quad n=1, 2, \dots, \nu-1, \nu+1, \dots, N \quad (\text{II-67})$$

なる操作量の変動に対して 各段の状態変数は 全段の操作量が最適値であったときとっていた値  $\bar{x}_i^n$  から次のように変化する。

$$x_i^n = \bar{x}_i^n + \varepsilon y_i^n + \varepsilon^2 z_i^n + o(\varepsilon^3) \quad n=1, 2, \dots, N \quad (\text{II-68})$$

一方  $n=1 \sim N$  に対して、各段の操作量が最適値である場合には (II-62) 式から

$$\bar{x}_i^n = F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n) \quad i=1, 2, \dots, m. \quad (\text{II-69})$$

また  $n=\nu$  番目の段の操作量のみ その最適値から変動したとき、各段の状態変数は次式で与えられる

$$n=\nu: \quad x_i^\nu = F_i(x^{\nu-1}, u^\nu) \quad (\text{II-70})$$

$$n \neq \nu: \quad x_i^n = F_i(x^{n-1}, \bar{u}^n) \quad (\text{II-71})$$

したがって 各段の状態変数  $x_i^n$  からの変動量は (II-68) ~ (II-71) 式から次式のように求まる。

$1 \leq n \leq \nu-1:$

$$\varepsilon y_i^n + \varepsilon^2 z_i^n = \varepsilon \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1}} y_j^{n-1} + \varepsilon^2 \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1}} z_j^{n-1} + \frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1} \partial \bar{x}_k^{n-1}} y_j^{n-1} y_k^{n-1} \quad (\text{II-72})$$

$n=\nu:$

$$\varepsilon y_i^\nu + \varepsilon^2 z_i^\nu = \varepsilon \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_i(x^{\nu-1}, u^\nu)}{\partial x_j^{\nu-1}} y_j^{\nu-1} + \varepsilon^2 \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_i(x^{\nu-1}, u^\nu)}{\partial x_j^{\nu-1}} z_j^{\nu-1} + \frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_i(x^{\nu-1}, u^\nu)}{\partial x_j^{\nu-1} \partial x_k^{\nu-1}} y_j^{\nu-1} y_k^{\nu-1} + F_i(x^{\nu-1}, u^\nu) - F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu) \quad (\text{II-73})$$

$\nu+1 \leq n \leq N:$

$$\varepsilon y_i^n + \varepsilon^2 z_i^n = \varepsilon \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1}} y_j^{n-1} + \varepsilon^2 \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1}} z_j^{n-1} + \frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1} \partial \bar{x}_k^{n-1}} y_j^{n-1} y_k^{n-1} \quad (\text{II-74})$$



これらの式から first order の状態変数の変動量  $\varepsilon y_i^n$  の係数間の関係は、

$$y_i^n = \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^n, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1}} y_j^{n-1} + \delta_{nv} \frac{\partial F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{u}^n} \quad \begin{matrix} i=1,2,\dots,m \\ n=1,2,\dots,N \end{matrix} \quad (\text{II-75})$$

とえられる。ここで最適操作量  $\bar{u}^n$  を求める際に用いた adjoint system、すなわち

$$\lambda_i^{n-1} = \sum_{j=1}^m \frac{\partial F_j(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_i^{n-1}} \lambda_j^n \quad (\text{II-76})$$

$$\lambda_i^N - \sum_{j=1}^m \lambda_j^0 \frac{\partial G_j(\bar{x}^N, \bar{x}^N, L, R)}{\partial \bar{x}_i^N} = \delta_{i1} \quad (\text{II-77})$$

を導入する。

この adjoint system を (II-72) (II-73) (II-74) 式に用い  $\varepsilon^3$  以上の higher order を無視することによって

$n \neq 1$  :

$$\begin{aligned} \varepsilon \sum_{i=1}^m y_i^n \lambda_i^n + \varepsilon^2 \sum_{i=1}^m \sum_{i=1}^m \lambda_i^n \lambda_i^n &= \varepsilon \sum_{i,j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1}} y_j^{n-1} \lambda_i^n + \varepsilon^2 \sum_{i,j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1}} \sum_{j=1}^m \lambda_j^{n-1} \lambda_i^n \\ &+ \frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{i,j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1} \partial \bar{x}_k^{n-1}} y_j^{n-1} y_k^{n-1} \lambda_i^n \quad (\text{II-78}) \end{aligned}$$

$n = \nu$  :

$$\begin{aligned} \varepsilon \sum_{i=1}^m y_i^\nu \lambda_i^\nu + \varepsilon^2 \sum_{i=1}^m \sum_{i=1}^m \lambda_i^\nu \lambda_i^\nu &= \varepsilon \sum_{i,j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial \bar{x}_j^{\nu-1}} y_j^{\nu-1} \lambda_i^\nu + \varepsilon^2 \sum_{i,j=1}^m \frac{\partial F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial \bar{x}_j^{\nu-1}} \sum_{j=1}^m \lambda_j^{\nu-1} \lambda_i^\nu \\ &+ \frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{i,j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial \bar{x}_j^{\nu-1} \partial \bar{x}_k^{\nu-1}} y_j^{\nu-1} y_k^{\nu-1} \lambda_i^\nu \\ &+ \varepsilon \sum_{i=1}^m \lambda_i^\nu \frac{\partial F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial \bar{u}^\nu} + \frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{i=1}^m \lambda_i^\nu \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial (\bar{u}^\nu)^2} \quad (\text{II-79}) \end{aligned}$$

とえられ  $n=1 \sim N$  に対しては、次式が成立する。

$$\begin{aligned}
\varepsilon \sum_{i=1}^m \lambda_i^N y_i^N + \varepsilon^2 \sum_{i=1}^m \lambda_i^N z_i^N &= \varepsilon \sum_{i=1}^m \lambda_i^0 y_i^0 + \varepsilon^2 \sum_{i=1}^m \lambda_i^0 z_i^0 \\
&+ \frac{\varepsilon^2}{Z} \sum_{n=1}^N \sum_{i,j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{n-1}, \bar{u}^n)}{\partial \bar{x}_j^{n-1} \partial \bar{x}_k^{n-1}} y_j^{n-1} y_k^{n-1} \lambda_i^n \\
&+ \varepsilon \sum_{i=1}^m \lambda_i^\nu \frac{\partial F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial \bar{u}^\nu} + \frac{\varepsilon^2}{Z} \sum_{i=1}^m \lambda_i^\nu \frac{\partial^2 F_i(\bar{x}^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial (\bar{u}^\nu)^2}
\end{aligned} \tag{II-80}$$

ii-2) Junction における操作量の変動の影響

次に Junction における  $n=1 \sim N$  の任意の段の操作量の変動の影響を考察する。  $n=1 \sim N$  の操作量が その最適値から変動したために  $\bar{x}_i^0$  は  $x_i^0$  に変わり、両者の間には

$$x_i^0 - \bar{x}_i^0 = \varepsilon y_i^0 + \varepsilon^2 z_i^0 + o(\varepsilon^3) \tag{II-81}$$

$i=1, 2, \dots, m$

なる関係が成立する。

また  $x_i^0$ ,  $\bar{x}_i^0$  は、それぞれ Junction condition (II-63) 式を満たさねばならないから 次式が成立する。

$$x_i^0 = G_i(x^T, x^N, L, R) \tag{II-82}$$

$$\bar{x}_i^0 = G_i(x^T, \bar{x}^N, L, R) \tag{II-83}$$

したがって、 $x_i^0$  の  $\bar{x}_i^0$  からの変動量は 次式で与えられる。

$$\begin{aligned}
\varepsilon y_i^0 + \varepsilon^2 z_i^0 &= \sum_{j=1}^m \frac{\partial G_i(x^T, \bar{x}^N, L, R)}{\partial \bar{x}_j^N} \varepsilon y_j^N \\
&+ \varepsilon^2 \left[ \sum_{j=1}^m \frac{\partial G_i(x^T, \bar{x}^N, L, R)}{\partial \bar{x}_j^N} z_j^N + \frac{1}{Z} \sum_{j,k=1}^m \frac{\partial^2 G_i(x^T, \bar{x}^N, L, R)}{\partial \bar{x}_j^N \partial \bar{x}_k^N} y_j^N y_k^N \right]
\end{aligned} \tag{II-84}$$

したがって first order の変動量  $\varepsilon y_i^0$  には 次の関係が成立している。

$$y_i^0 = \sum_{j=1}^m \frac{\partial G_i(x^T, \bar{x}^N, L, R)}{\partial \bar{x}_j^N} y_j^N \quad i=1, 2, \dots, m \tag{II-85}$$

$\varepsilon^3$  以上の higher order を無視し、adjoint system  $\lambda_i^0$  と (II-84) 式との内積を考えると。

$$\begin{aligned} \varepsilon \sum_{i=1}^m \lambda_i^0 y_i^0 + \varepsilon^2 \sum_{i=1}^m \lambda_i^2 z_i^0 &= \varepsilon \sum_{i,j=1}^m \frac{\partial G_{i0}(x^+, \bar{x}^N, L, R)}{\partial x_j^N} y_i^N \lambda_i^0 \\ &+ \varepsilon^2 \left[ \sum_{i,j=1}^m \frac{\partial G_{i0}(x^+, \bar{x}^N, L, R)}{\partial x_j^N} z_j^N \lambda_i^0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k=1}^m \frac{\partial^2 G_{i0}(x^+, \bar{x}^N, L, R)}{\partial x_j^N \partial x_k^N} y_j^N y_k^N \lambda_i^0 \right] \end{aligned} \quad (\text{II-86})$$

ここで (II-80), (II-85) 式及び adjoint system に対する境界条件 (II-77) 式とを合わせて考えることにより、次式がえられる。

$$\begin{aligned} \varepsilon y_i^N + \varepsilon^2 z_i^N &= \varepsilon \sum_{i=1}^m \lambda_i^0 \frac{\partial F_{i0}(x^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial u^\nu} \\ &+ \frac{\varepsilon^2}{2} \left[ \sum_{i,j,k=1}^m \frac{\partial^2 G_{i0}(x^+, \bar{x}^N, L, R)}{\partial x_j^N \partial x_k^N} y_j^N y_k^N \lambda_i^0 + \sum_{n=1}^N \sum_{i,j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_{i0}(x^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial x_j^{\nu-1} \partial x_k^{\nu-1}} y_j^{\nu-1} y_k^{\nu-1} \lambda_i^0 \right. \\ &\left. + \sum_{i=1}^m \lambda_i^0 \frac{\partial^2 F_{i0}(x^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial (\bar{u}^\nu)^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{II-87})$$

しかし  $\bar{u}^\nu$  は最適操作量であるから  $\varepsilon$ -order の  $x_i^N$  の変動  $y_i^N = 0$  ならしめる操作量であり、また  $\nu = V$  は  $1 \sim N$  の任意の番号と考えてよいから、一般に操作量の最適値からのずれが、評価関数  $x_i^N$  に与える変動量  $\varepsilon^2 z_i^N$  の係数  $z_i^N$  は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} z_i^N &= \frac{1}{2} \left[ \sum_{i,j,k=1}^m \lambda_i^0 \frac{\partial^2 G_{i0}(x^+, \bar{x}^N, L, R)}{\partial x_j^N \partial x_k^N} y_j^N y_k^N + \sum_{n=1}^N \sum_{i,j,k=1}^m \frac{\partial^2 F_{i0}(x^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial x_j^{\nu-1} \partial x_k^{\nu-1}} y_j^{\nu-1} y_k^{\nu-1} \lambda_i^0 \right. \\ &\left. + \sum_{i=1}^m \lambda_i^0 \frac{\partial^2 F_{i0}(x^{\nu-1}, \bar{u}^\nu)}{\partial (\bar{u}^\nu)^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{II-88})$$

ここに  $y_i^N$ ,  $\lambda_i^N$  はそれぞれ (II-54) (II-55) 式及び (II-56), (II-57) 式をみたす。

i) の並流多段結合プロセスの場合と比較すると Feed back を持つ場合には、変数  $y_i^N$  と、adjoint system  $\lambda_i^N$  とに対する境界条件が異なり、感度係数  $z_i^N$  の右辺に Junction condition の影響が加わり、第 2 項の和が全段にわたっている点が異なっている。

これは Feed back を持たない並流多段結合プロセスでは  $\nu = V$  番目の

操作量の変動を考えている場合には  $\pi=1 \sim \nu-1$  番目までの状態変数の変化は起らないが *Feed back* を含む場合には、 $\pi=\nu$  番目の操作量の変動は、 $\pi=1, 2, \dots, \nu-1$  の状態変数をも変化させることに起因している。しかし (II-54), (II-55) 式は、一意的に解けるから *Feed back* を持たない場合と同様に 操作量  $u^n$  の最適値を求める際に、自動的に求まってくる (II-56), (II-57) 式の *adjoint system* と  $y_i^n$  を利用することによって、各段の操作量の 評価関数に及ぼす感度を容易に求めることができる。

## § 2-4 多段抽出プロセスへの適用

§ 2-3でのべた各操作量が評価関数に対して与える影響が基本的な結合形式である並流、及び単一 Feed back を持つ並流多段結合系によってどのように変わるかを調べるために、ここでは十字流多段抽出プロセスを例にとりて考察する。さらに 2 流体間の平衡関係は非線型 5 次方程式で近似し、種々の形で与えられている場合について考察し、平衡関係を表わす関係の形によって、最適政策とその最適操作量に対する評価関数の感度、及びパラメーター変動に対する評価関数感度の三つがどのように変わるかを検討するため、種々数値計算を行なった。

### i) 直列多段結合の場合

十字流多段直列結合プロセスの定常最適化問題は 1959年に R. Aris,<sup>10)</sup> D. F. Rudd, N. R. Amundson<sup>10)</sup> 等によって、2 流体間の平衡関係が非線型で 3 段の場合について、Dynamic Programming を用いて初めて研究された。その後 1963年に R. L. Zahradnik,<sup>11)</sup> D. H. Archer<sup>11)</sup> 等によって、また 1964年には L. T. Fan,<sup>12)</sup> C. S. Wang<sup>12)</sup> 等によってもまったく同一の場合が Kat's Algorithm を用いて研究されている。また同じ年に E. S. Lee<sup>13)</sup> が Gradient Method によって同じ非線型の平衡関係を用い、3 段 10 段 20 段の場合について数値計算を行ない Gradient Method のこれらの問題に対する適用性を調べている。

一般に多段抽出プロセスは Fig II-5 のように示されるが、この図において  $g$  は solvent の流量、 $w^n$  は第  $n$  段目における溶媒流量 (水洗プロセスでは水の流量)、又  $x_R^n$ ,  $x_E^n$  はそれぞれ第  $n$  段を去る抽料及び抽削中の抽質の組成である。従ってこのプロセスの第  $n$  段に対して次の関係式が成立する。

$$\langle \text{物質収支} \rangle \quad g(x_R^{n-1} - x_R^n) = w^n x_E^n \quad (n=1, 2, \dots, N) \quad (\text{II-89})$$

$$\langle \text{平衡関係} \rangle \quad x_E^n = \phi(x_R^n) \quad (\text{II-90})$$

$$\langle \text{各段における利益} \rangle \quad p^n = \alpha w^n x_E^n - \beta w^n \quad (\text{II-91})$$

但し  $\alpha, \beta$  はそれぞれ抽質、及び抽削の単価である。

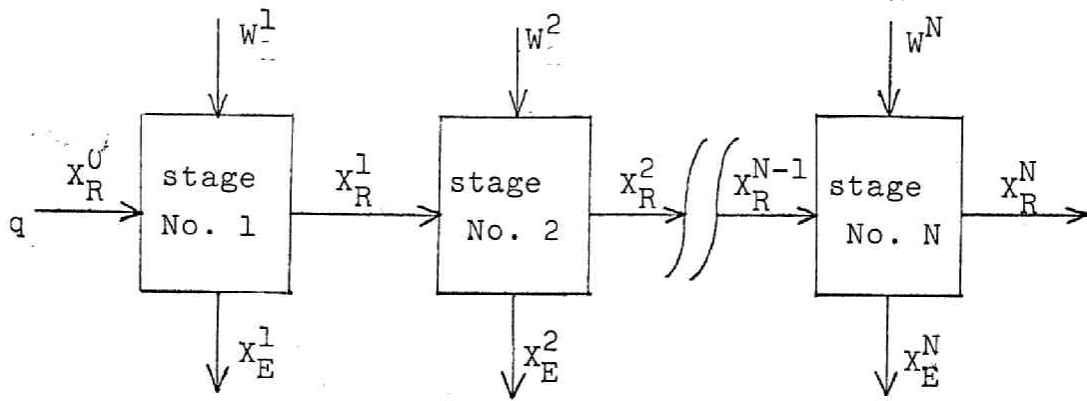


Fig. II-5 multi-stage extraction process

このプロセスに対する定常最適化問題は、全段からえられる利益  $\sum_{n=1}^N P_n$  を最大にするには、各段の抽削の量  $w^n$  をどのように与えればよいか、という問題である。そのときの感度の問題は、その抽削量が実際のプロセスにおいて、その最適値よりずれておれば、全段からえられる利益がどの程度低減するか、という問題である。

さてここで、全ての変数を無次元化するために

$$\lambda = \frac{\beta}{\alpha} \quad u^n = \frac{w^n}{q} \quad x_1^n = x_R^n \quad (\text{II-92})$$

$$x_2^n = x_2^{n-1} + u^n (x_E^n - \lambda) \quad x_2^0 = 0$$

なる新しい変数を導入すれば、全段からの利益  $\sum P^n$  は  $x_2^N \alpha q$  となるから (II-89)~(II-91) の定常最適化問題は次のように定式化される。

<プロセス方程式>  $x_1^{n-1} = x_1^n + \phi(x_1^n) \quad (\text{II-93})$

$$x_2^{n-1} = x_2^n + u^n (\lambda - \phi(x_1^n)) \quad (\text{II-94})$$

<初期条件>

$$x_1^0 = a \quad (\text{II-95})$$

$$x_2^0 = 0 \quad (\text{II-96})$$

<評価関数>

$$x_2^N \rightarrow \text{Max.} \quad (\text{II-97})$$

とする操作量  $u^1, u^2, \dots, u^N$  を決定せよ

いま (II-93) 式が

$$x_1^n = F_1(x_1^{n-1}, u^n) \quad n=1, 2, \dots, N \quad (\text{II-98})$$

の形に解けたとすると

$$x_2^n = F_2(x_1^{n-1}, x_2^{n-1}, u^n) = x_2^{n-1} + u^n [\phi \cdot F_1 - \lambda] \quad (\text{II-99})$$

となる。

したがって (II-98), (II-99) に対する adjoint variable をそれぞれ  $\lambda_1^n, \lambda_2^n$  とすると、これらの変数は次の関係式を満足する。



$$\lambda_1^{n-1} = \sum_{j=1}^2 \frac{\partial F_j(x_1^{n-1}, x_2^{n-1}, u^n)}{\partial x_1^{n-1}} \lambda_j^n = \frac{\lambda_1^n + u^n \frac{d\phi(x_1^n)}{dx_1^n}}{1 + u^n \frac{d\phi(x_1^n)}{dx_1^n}} ; \lambda_1^N = 0 \quad (\text{II-100})$$

$$\lambda_2^{n-1} = \sum_{j=1}^2 \frac{\partial F_j(x_1^{n-1}, x_2^{n-1}, u^n)}{\partial x_2^{n-1}} \lambda_j^n = \lambda_2^n ; \lambda_2^N = 1 \quad (\text{II-101})$$

また各段の最適操作量は 次の評価関数に極値を与える必要条件から次のように与えられる。

$$\sum_{j=1}^2 \lambda_j^n \frac{\partial F_j(x^n, u^n)}{\partial u^n} = -\lambda_1^n \phi(x_1^n) + \lambda - \phi(x_1^n) - u^n (\lambda - \phi(x_1^n)) \frac{d\phi(x_1^n)}{dx_1^n} - u^n \frac{d\phi(x_1^n)}{dx_1^n} \phi(x_1^n) = 0 \quad (\text{II-102})$$

$$u^n = \frac{\phi(x_1^n)(\lambda_1^n - 1) + \lambda}{-\lambda \frac{d\phi(x_1^n)}{dx_1^n}} \quad (\text{II-103})$$

従って adjoint system 及び  $x_1^n$  は一般に次のように求められる。

$$\begin{cases} \lambda_1^n = -\frac{\lambda - \phi(x_1^n)}{\phi(x_1^n)} & \lambda_1^N = 0 \\ \lambda_2^n = 1 & n=1, 2, \dots, N \end{cases} \quad (\text{II-104})$$

$$\begin{cases} x_1^{n-1} = x_1^n + \frac{\phi(x_1^n) \left\{ \frac{\phi(x_1^n)}{\phi(x_1^{n+1})} - 1 \right\}}{\frac{d\phi(x_1^n)}{dx_1^n}} \\ \phi(x_1^{N+1}) = \lambda \end{cases} \quad n=1, 2, \dots, N \quad (\text{II-105})$$

従って、実際の計算にあたっては  $x_1^N$  を仮定し、 $x_1^0$  が与えられた初期値  $a$  に一致するまで  $x_1^N$  の仮定をやりなおせば良いことになる。そして各段の最適操作量は (II-103) 式を用いることによってえられる。

次に、このプロセスの最適操作量の評価関数に対する感度は §2-3 の理論から次のように求めることが出来る。

即ち、今幾番目の段の操作量  $u^N$  が、その最適値からずれたとすると、この変動による評価関数の変動  $Z_2^N$  は次のようにえられる。

$$2 \cdot Z_2^N = \frac{-\lambda^2}{(\lambda_1^N - 1)^2 \frac{d\phi(x_1^N)}{dx_1^N}} \left[ \frac{d^2\phi(x_1^N)}{d(x_1^N)^2} \left\{ (\lambda_1^N - 1) \phi(x_1^N) + \lambda \right\} - \frac{d\phi(x_1^N)}{dx_1^N} (\lambda_1^N - 1) \right]$$

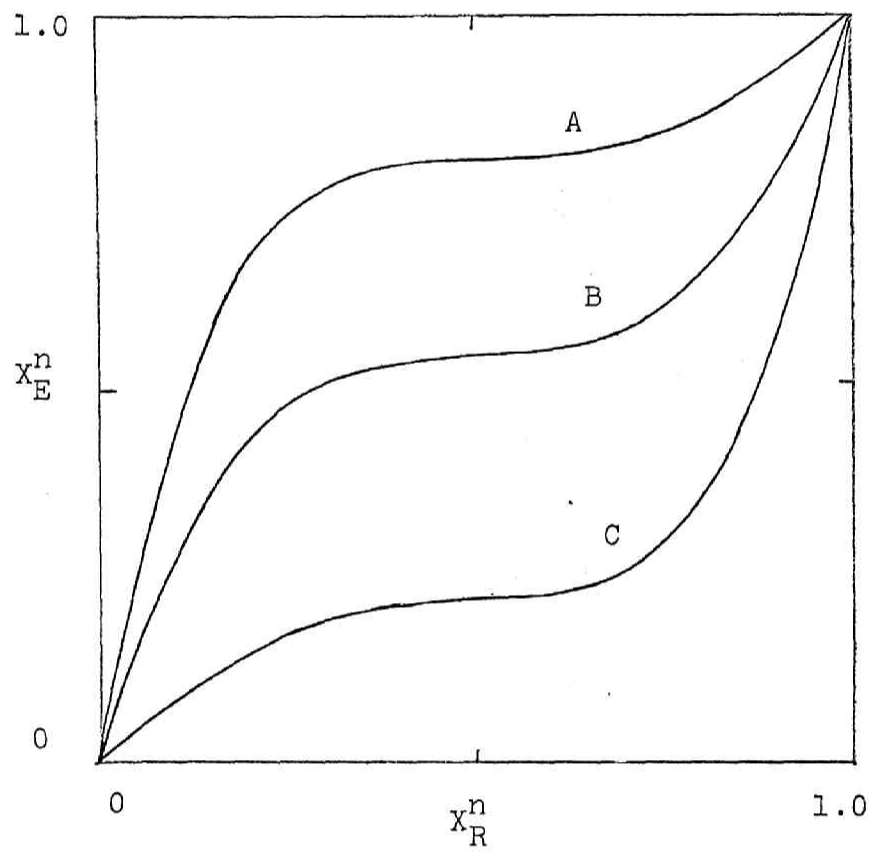


Fig. II-6 equilibrium curve

$$- \sum_{n=\nu+1}^N \frac{-\lambda^2 \{ (\lambda_1^n - 1) \phi(x_1^n) + \lambda \} \frac{d^2 \phi(x_1^n)}{d(x_1^n)^2}}{(\lambda_1^n - 1)^2 \phi(x_1^n) \frac{d\phi(x_1^n)}{dx_1^n}} \cdot (y_1^{n-1})^2 \quad (\text{II-106})$$

$$y_1^\nu = \frac{\lambda}{(\lambda_1^\nu - 1)}, \quad y_1^n = \frac{-\lambda}{(\lambda_1^n - 1) \phi(x_1^n)} y_1^{n-1} \quad \nu+1 \leq n \leq N \quad (\text{II-107})$$

### 数値計算

一般的に考察してきた問題を数値計算によって検討する。全段数が10段からなる十字流多段抽出プロセスを考え、平衡関係が Fig. II-6 に示されるような3つの場合について計算を行なった。それぞれの平衡関係は次の5式方程式によって与えられるものである。

$$A: \quad \phi = 1.4531 \cdot (x_R^n)^5 - 8.4764 \cdot (x_R^n)^4 + 16.9527 \cdot (x_R^n)^3 - 14.5309 \cdot (x_R^n)^2 + 5.6014 \cdot x_R^n \quad (\text{II-108})$$

$$B: \quad \phi = -0.8413 \cdot (x_R^n)^5 + 1.4021 \cdot (x_R^n)^4 + 3.5053 \cdot (x_R^n)^3 - 6.3095 \cdot (x_R^n)^2 + 3.2434 \cdot x_R^n \quad (\text{II-109})$$

$$C: \quad \phi = 0.922 \cdot (x_R^n)^5 + 2.290 \cdot (x_R^n)^4 - 3.1200 \cdot (x_R^n)^3 + 0.0922 \cdot (x_R^n)^2 + 0.8156 \cdot x_R^n \quad (\text{II-110})$$

又、ラフィネートの入口濃度は  $x_R^0(x_1^0) = a = 0.95$  とし、抽質及び抽削の単価の比  $\lambda = \frac{\beta}{\alpha}$  が 0.05, 0.5 の2つの場合について計算を行なった。 $\lambda = 0.05$  場合の最適な操作量 即ち各段の最適な抽削流量の 抽料流量に対する比が Fig. II-7 に、又、 $\lambda = 0.5$  の場合が Fig. II-8 に示されている。

そのときの最適操作量の評価関数に対する感度はそれぞれ Fig. II-9, Fig. II-10 に示されている。

Fig. II-7, Fig. II-8 にも示されているように、平衡関係が  $A \rightarrow B \rightarrow C$  と変ることによって、最適操作量の最大値の位置は最初の段から順次出口に近い段に移ることがわかる。又、最適操作量の値が最も大きい段が操作量の 評価関数に対する感度はかえって小さく、操作量の値が小

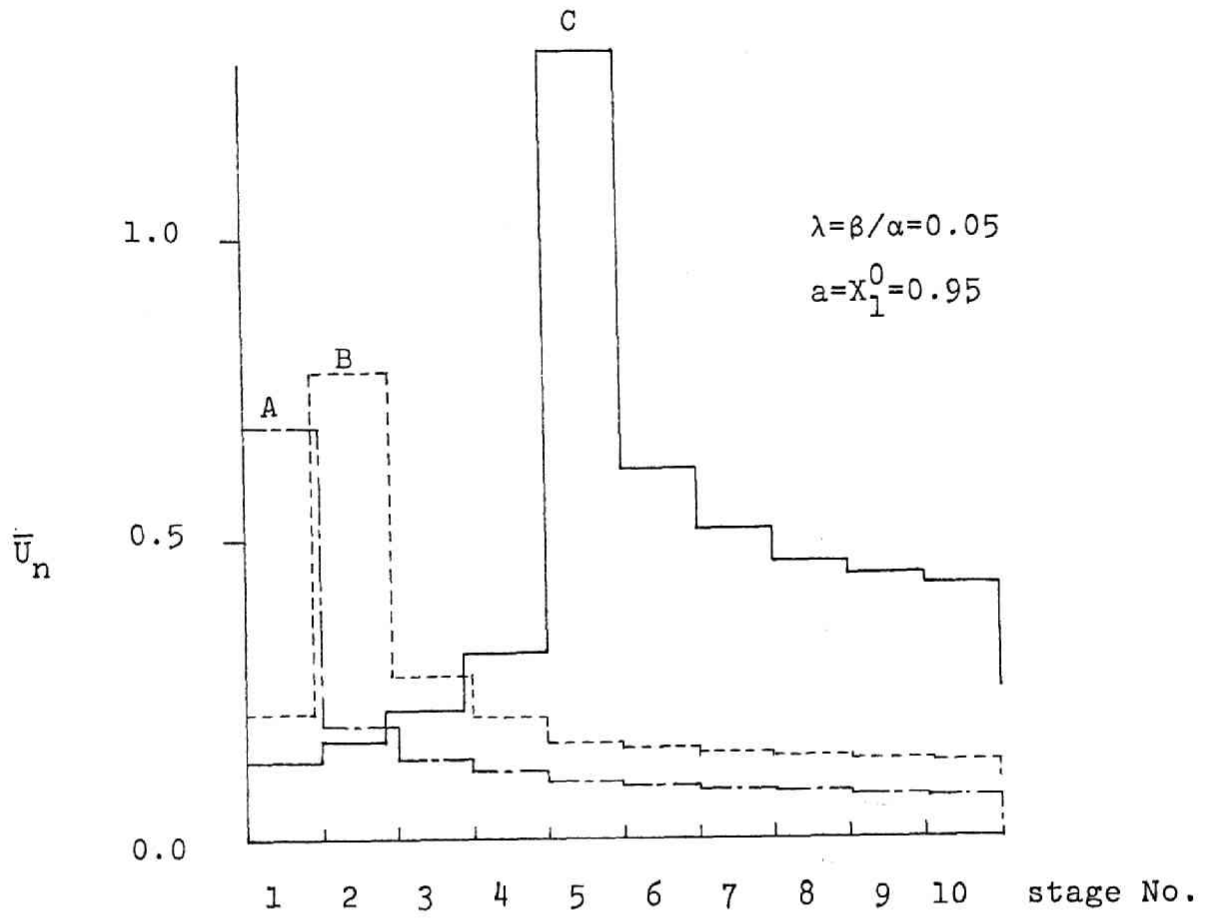


Fig. II-7 Optimum value of flow rate of solvent

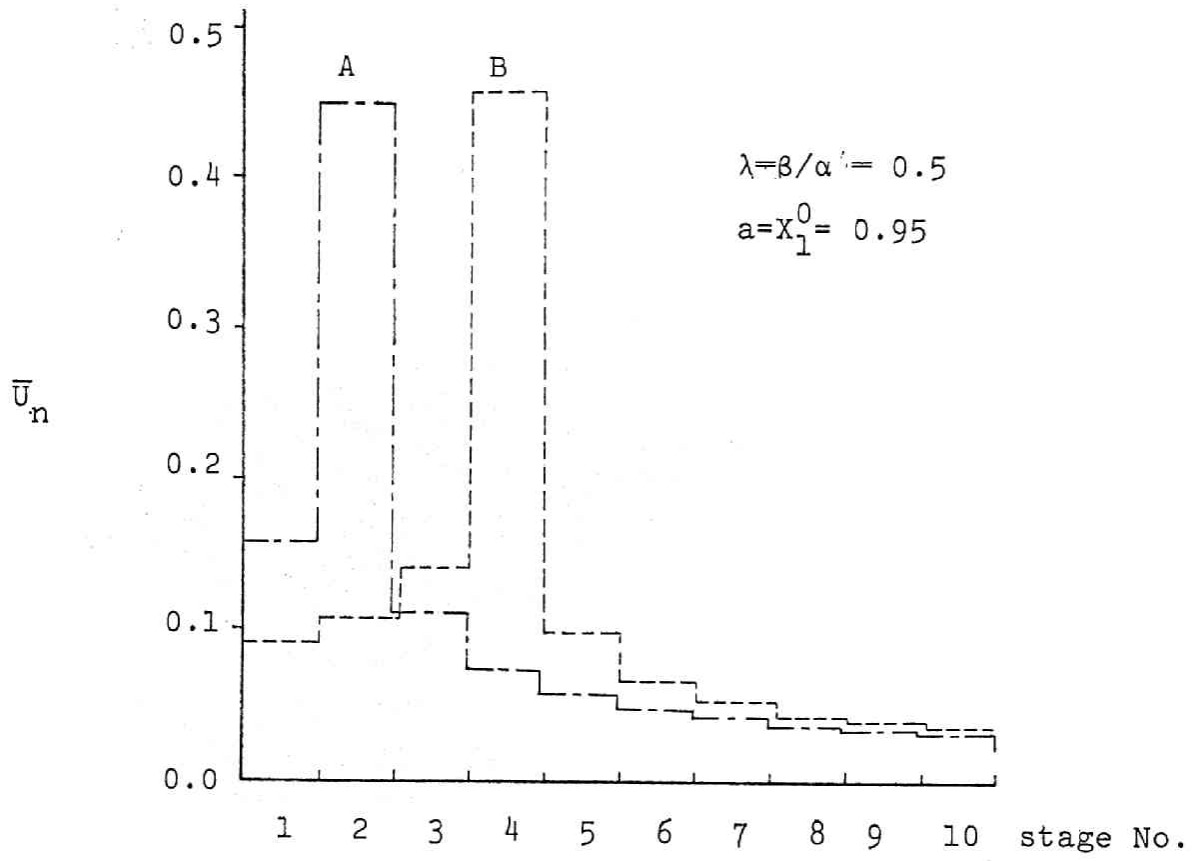


Fig. II-8 Optimum value of flow rate of solvent

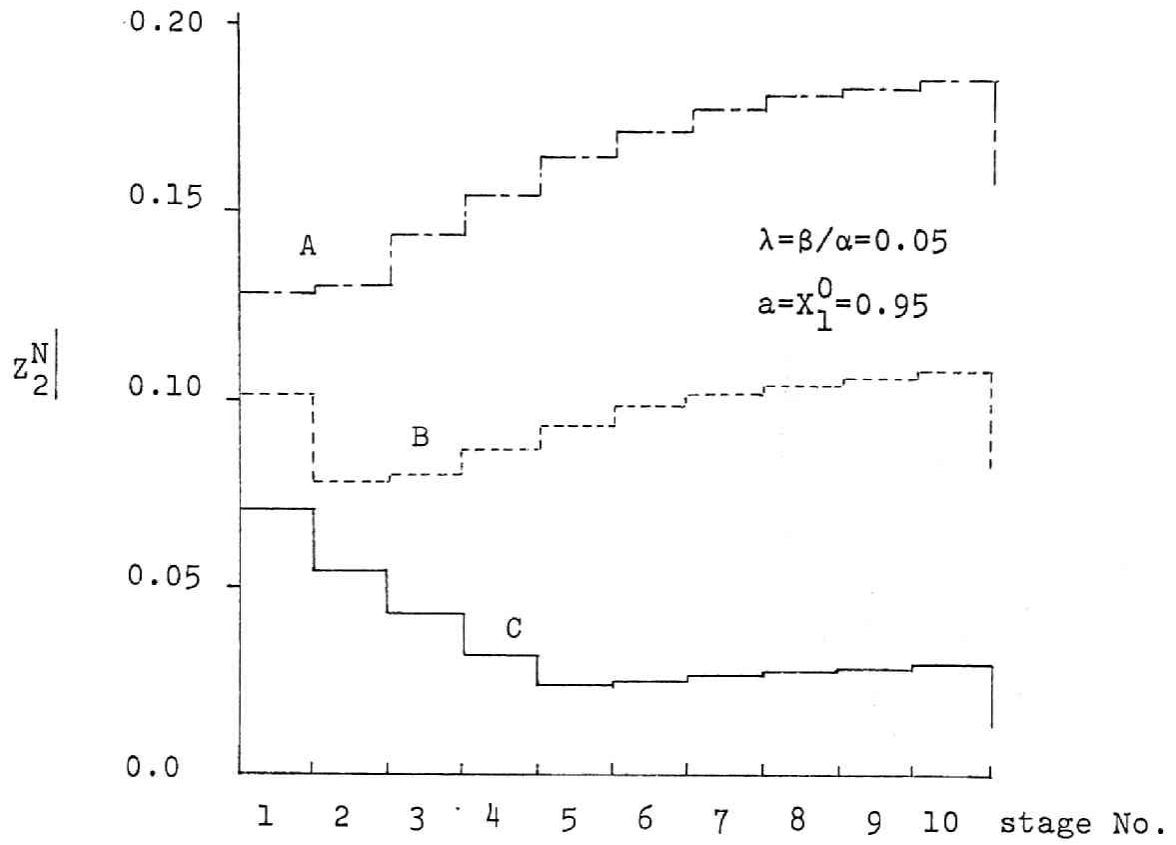


Fig. II-9 Sensitivity coefficient

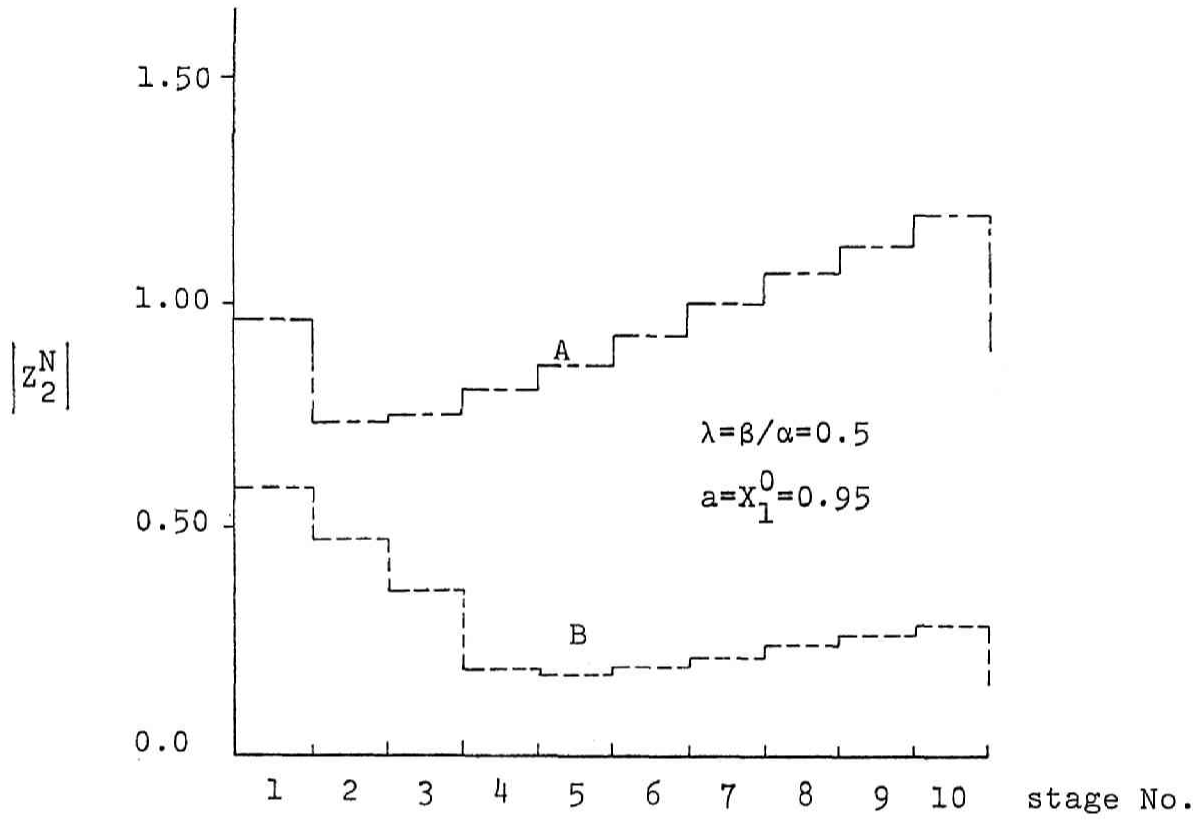


Fig. II-10 Sensitivity coefficient



さい段の方が大きい感度を持ち、操作量をその最適値に維持することを、小さい値をもつ操作量に対してかなり精度よく考える必要のあることがわかる。

## ii) 単一-Feed back をもつ十字流多段抽出プロセス

Feed back をもつ十字流多段抽出プロセスの最適化問題は、1962年に Rudd<sup>(12)</sup> が i) でのべた Aris 等の取扱った全段数が3段の場合に単一のリサイクルをつけた問題を Dynamic programming で研究しているのが最初であり、その後 L.T. Fan 等が D.M.P. で同一の問題を考察している。いずれの研究においても段数は3段で平衡関係は Fig. II-11 に示されているものである。ここでは同一の平衡関係を用いるが段数を10段とし、かつ単一のリサイクルをもつ十字流多段抽出プロセスについて検討を加えた。

単一-Feed back をもつ十字流多段抽出プロセスは Fig. II-12 のように示されるがプロセス変数を i) の場合と同じようにとるとこのときのプロセス方程式は次のように表わされる。

$$\langle \text{物質収支} \rangle \quad x_R^{n-1} = x_R^n + \frac{w^n}{f+R} \cdot x_E^n \quad (\text{II-111})$$

$$\langle \text{平衡関係} \rangle \quad x_E^n = \phi(x_R^n) \quad (\text{II-112})$$

$$\langle \text{Matching の条件} \rangle \quad R x_R^f + f x_R^f = (f+R) x_R^o \quad (\text{II-113})$$

$$\langle \text{各段の利益} \rangle \quad p^n = \alpha w^n x_E^n - \beta w^n \quad (\text{II-114})$$

このプロセスに対する定常最適化問題は、ここで新しく

$$\frac{w^n}{f} = u^n \quad \beta/\alpha = \lambda, \quad R/f = \sigma \quad (\text{II-115})$$

$$x_1^n = x_R^n \quad x_2^{n-1} = u^n \{ \phi(x_1^n) - \lambda \}$$

を導入することによって

$$\langle \text{プロセス方程式} \rangle \quad \begin{cases} x_1^{n-1} = x_1^n + \frac{u^n}{1+\sigma} \phi(x_1^n) \\ x_2^{n-1} = x_2^n + u^n \{ \lambda - \phi(x_1^n) \} \end{cases} \quad (\text{II-116})$$

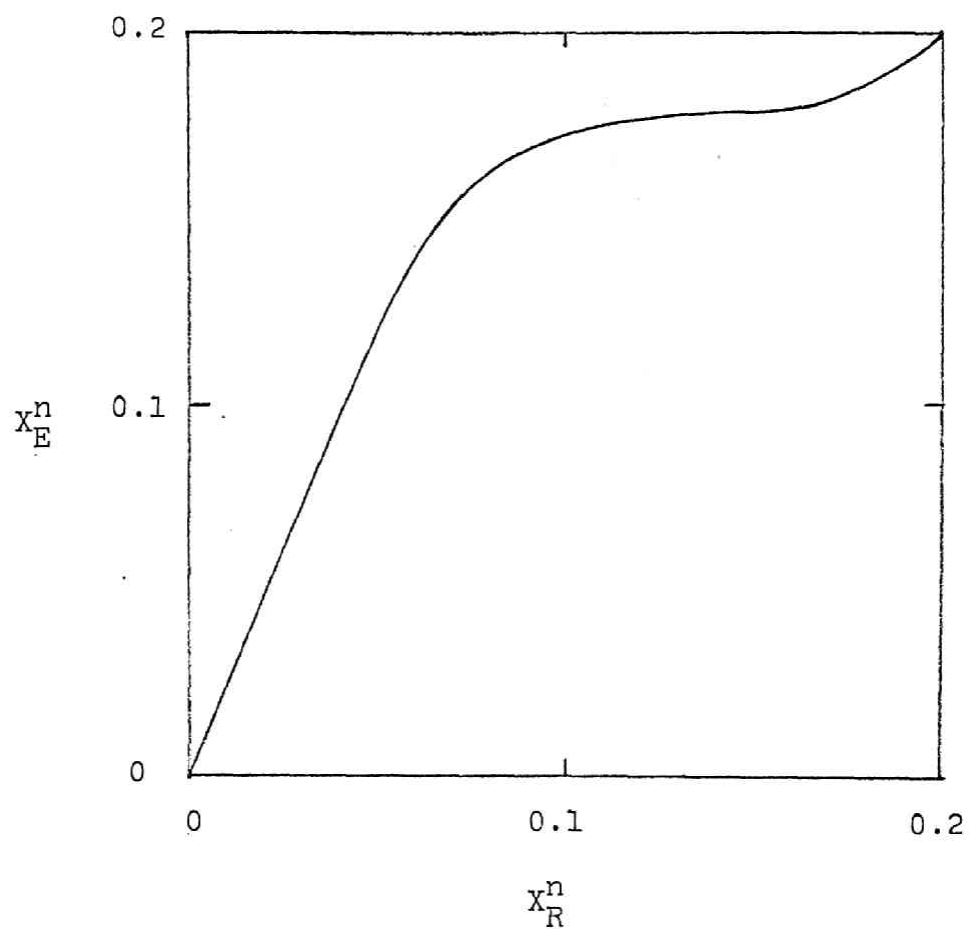


Fig. II-11 equilibrium curve

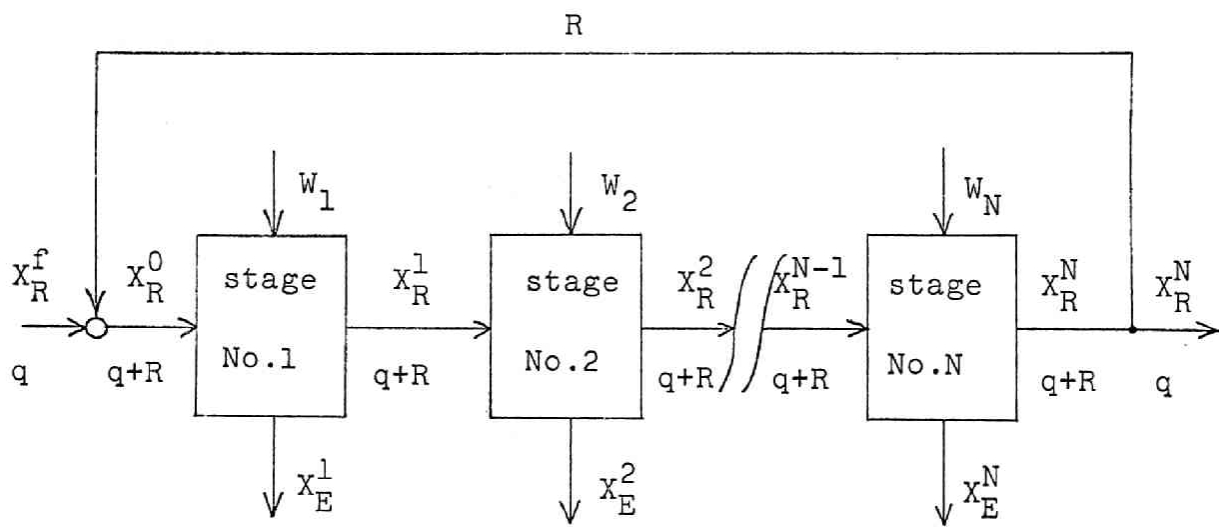


Fig. II-12 Multi-stage extraction process with a recycle

< Matching の条件 > 
$$x_1^0 = \frac{x_1^1}{1+r} + \frac{r}{1+r} x_1^N \quad (\text{II-117})$$

において  $x_2^N$  を最大にする各段の操作量  $u^1 \cdots u^N$  を求めよという問題になる。

この定常最適化問題は i) の場合と同様に adjoint variable  $\lambda_1^n, \lambda_2^n$  を導入すると、(II-116), (II-117) 式のプロセス方程式から、 $\lambda_1^n, \lambda_2^n$  は次の式をみたすことがわかる。

$$\lambda_1^{n-1} = - \frac{(1+r) \{ \lambda - \phi(x_1^n) \}}{\phi(x_1^n)} \quad (\text{II-118})$$

$$\lambda_1^N - \lambda_1^0 \frac{r}{1+r} = 0 \quad (\text{II-119})$$

$$\lambda_2^n = 1 \quad (\text{II-120})$$

$n=1, 2, \dots, N$

各段の最適操作量は D.M.P を適用することによって

$$u^n = \frac{-(1+r) \left\{ \left( \frac{\lambda_1^n}{1+r} - 1 \right) \phi(x_1^n) + \lambda \right\}}{\lambda \frac{d\phi(x_1^n)}{dx_1^n}} \quad (\text{II-121})$$

とえられる。

従ってプロセスの状態変数の間には

$$x_1^{n-1} = x_1^n + \frac{\phi(x_1^n) \left\{ \frac{\phi(x_1^n)}{\phi(x_1^n)} - 1 \right\}}{\frac{d\phi(x_1^n)}{dx_1^n}} \quad n=1, 2, \dots, N \quad (\text{II-122})$$

が成立し  $\phi(x_1^{N+1})$  と  $x_1^N$  とを仮定して (II-122) と (II-118) 式とを  $n=N$  から  $n=1$  まで解いてゆく。そのとき (II-119) 式から  $\tilde{\lambda}_1^N = \lambda_1^0 \frac{r}{1+r}$  を求め、その  $\tilde{\lambda}_1^N$  を (II-118) 式に代入し、求まる  $\tilde{\phi}(x_1^{N+1}) = \frac{(1+r)\lambda}{(1+r) - \tilde{\lambda}_1^N}$  及び (II-117) 式から求まる  $\tilde{x}_1^N = \left\{ (1+r)x_1^0 - x_1^1 \right\} / r$

とがそれぞれ最初に仮定した  $\phi(x_1^{N+1})$  と  $x_1^N$  に等しくなるまで  $\phi(x_1^{N+1})$  と  $x_1^N$  との仮定をやりなおして (II-118), (II-122) 式を解けばよい。そのときの最適操作量は (II-121)

式より求まる。

次に単一 Feed back を持つ場合の各段の操作量に対する評価関数の感度は、 $\nu$  番目の操作量  $x_i^\nu$  のみに変動のある場合を考えると、{2-3の結  
果から、次のように求まる。

$$2. \Sigma_2^N = \frac{-\lambda^2}{(1+r)^2 \left(\frac{\lambda_i^n}{1+r} - 1\right)^2 \frac{d\phi(x_i^n)}{dx_i^n}} \left[ \frac{d^2\phi(x_i^n)}{d(x_i^n)^2} \left\{ \left(\frac{\lambda_i^n}{1+r} - 1\right)\phi(x_i^n) + \lambda \right\} - \left(\frac{d\phi(x_i^n)}{dx_i^n}\right)^2 \left(\frac{\lambda_i^n}{1+r} - 1\right) \right] \\ + \sum_{n=1}^N \frac{\lambda^2(1+r) \left\{ \left(\frac{\lambda_i^n}{1+r} - 1\right)\phi(x_i^n) + \lambda \right\} \frac{d^2\phi(x_i^n)}{d(x_i^n)^2}}{\left(\frac{\lambda_i^n}{1+r} - 1\right)^2 (\phi(x_i^n))^3 \frac{d\phi(x_i^n)}{dx_i^n}} (y_i^{n+1})^2 \quad (\text{II-123})$$

$$\text{但し、} \quad y_i^n = \frac{-\lambda}{\left(\frac{\lambda_i^n}{1+r} - 1\right)\phi(x_i^n)} y_i^{n-1} + \delta_{n\nu} \frac{-\lambda}{(1+r)\left(\frac{\lambda_i^\nu}{1+r} - 1\right)} \quad (\text{II-124})$$

### 数値計算

実際の数値計算にあたっては 10 段からなる十字流多段抽出プロセスをとりあげ、平衡関係は Fig II-11 に示してあるが、数値計算に便利なように L. S. Lee が次のような関数の形になおしているのをそれを用いた。

$$\phi(x_i^n) = 0.00099 + 1.791x_i^n + 35.196(x_i^n)^2 - 633.84(x_i^n)^3 \\ + 3371.3(x_i^n)^4 - 5916.0(x_i^n)^5 \quad (\text{II-125})$$

又、その他の定数については

$$\lambda = 0.05, \quad a(x_i^+) = 0.2$$

とし

$$r = R/2 = 1/6$$

なる Feed back 量をもつものとして 計算を行なった結果が Fig II-15 ~ 17 である。

各段の Raffinate 中の solute の最適な濃度分布を図示したものが Fig II-13 であり、最適操作量を示すのが Fig II-14 である。

また各段の最適操作量の small perturbation が評価関数(ここで考えている場合は  $\Sigma_2^N$ 、即ち全段からえられる利益)に及ぼす影響の大きさを図示したものが Fig II-15 である。又これらの図中、点線で示されているのが  $r=0$  即ち Feed back 量を持たない場合である。これらの図より明

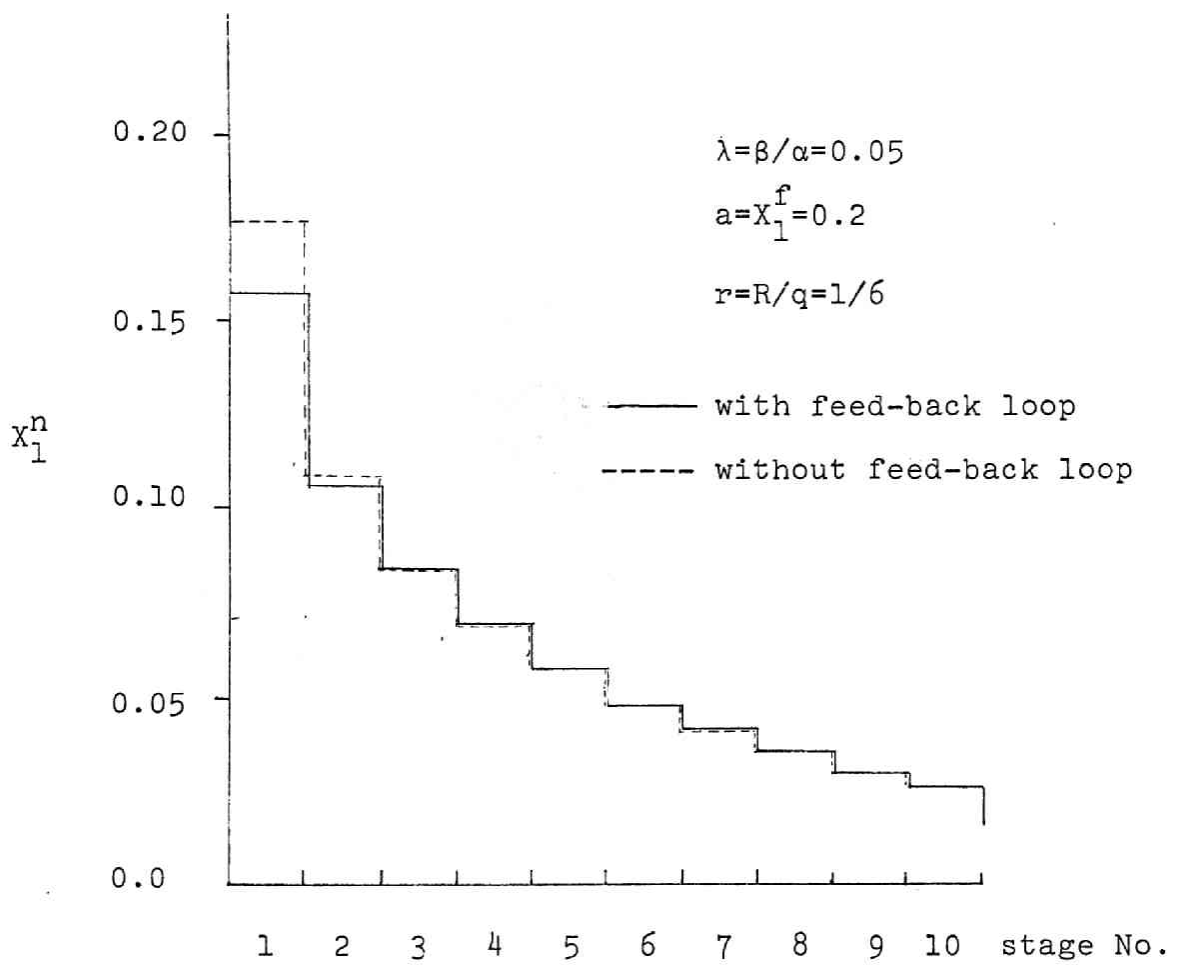


Fig. II-13 Concentration of a component in raffinate

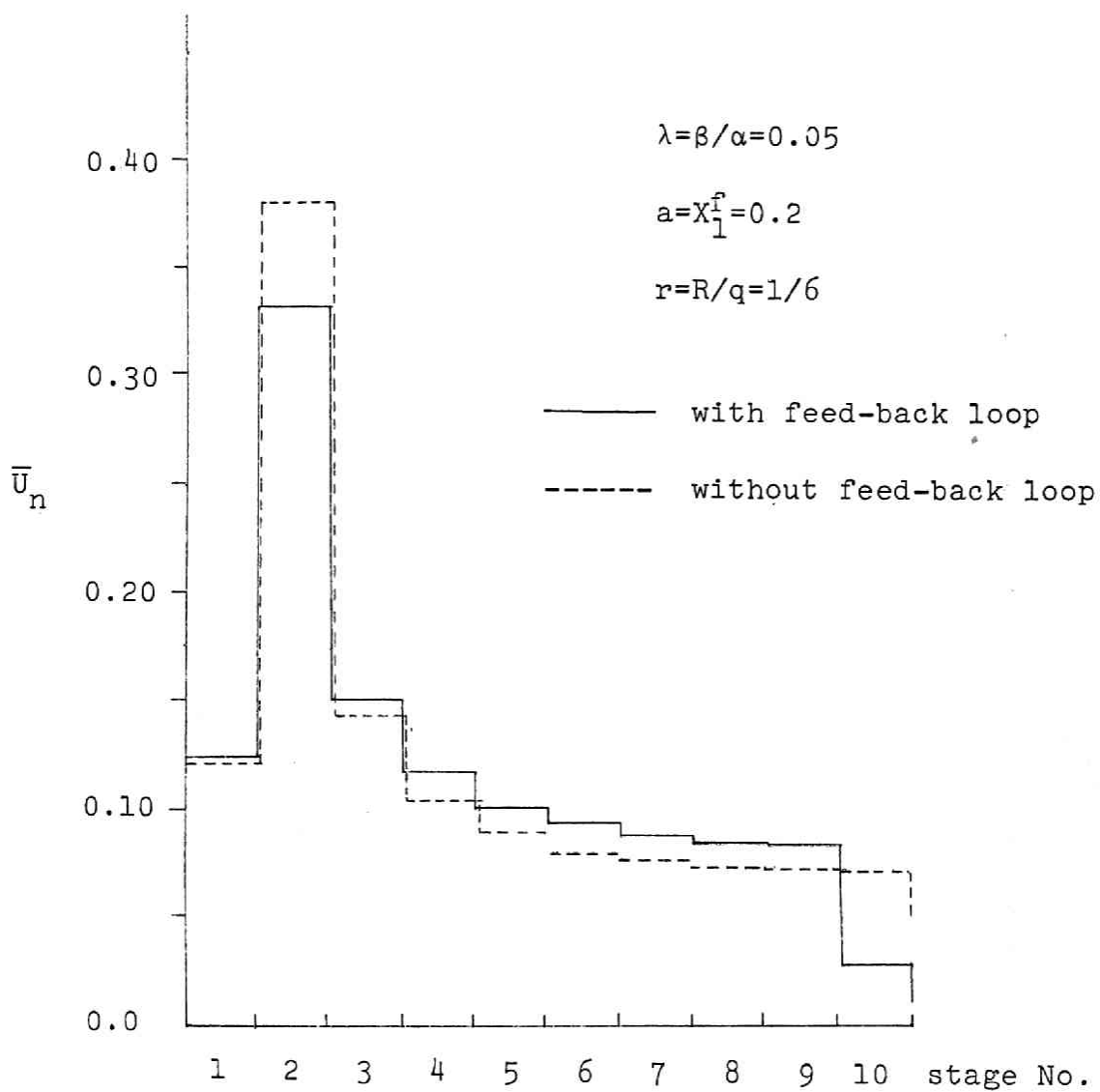


Fig. II-14 Optimum value of flow rate of solvent

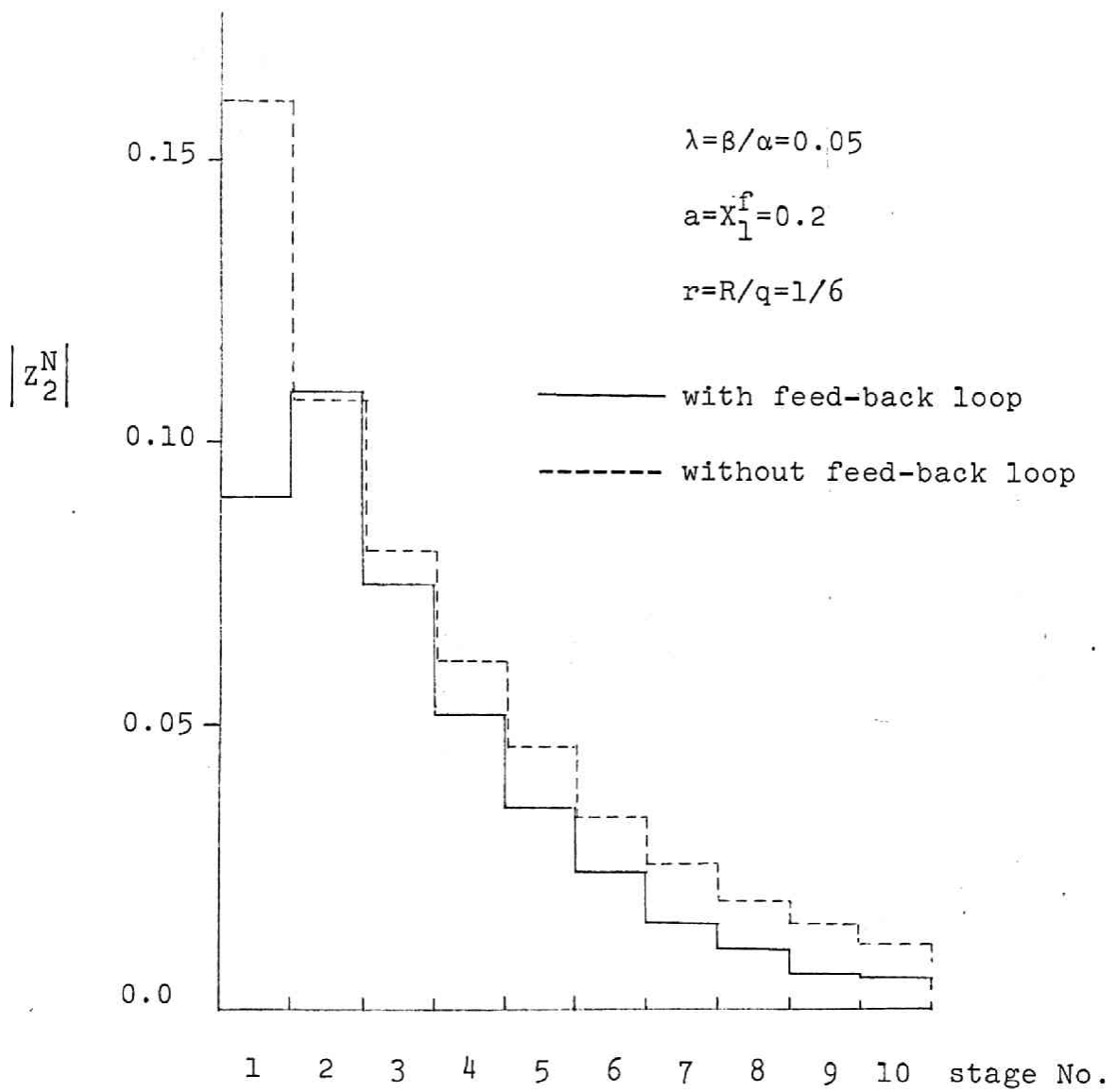


Fig. II-15 Sensitivity coefficient



らかなように *Feed back* を持つ場合には一般に各段の最適操作量の感度は全段にわたって *Feed back* のない場合よりも小さくなり、評価関数に対して最も大きい影響を与える操作量の位置もずれてくることがわかる。従って *Feed back Loop* があるということは そのプロセスの最適操作量の評価関数に対する感度を小さくする、即ち操作量の変動に対して *insensitive* なシステムになるということを示している。

## § 2-5 結論

プロセスシステムの定常最適化問題において 数学的に最適解を求めるだけでなく 最適化問題を数式的に設定した際に含まれてくる種々のパラメータの変動や不確かさが 最適解にどのような影響を与えるのかを知る、いわゆる感度解析を行なうことが、求めた最適解を、実際的な見地からより有効なものにするためには 是非必要であることを示した。一定にしておきたいシステム出力や 評価関数に パラメータ変動が どのような影響を与えるかを知るための一つの方法として *adjoint system* が利用できることを示し 特に プロセスシステムの最適化問題において、しばしば操作量と考えねばならない流量のような変数に対しては 操作量そのものの変動が システムの最適解にどのような影響を与えるかを知る、感度解析も必要であることを述べ、これにも最適化問題を解く際に導入された *adjoint system* が利用できることを示した。

ここでは *adjoint system* の利用に主眼をおいてきたが この他、後述する常微分方程式系で表わされるシステムの感度解析に利用される感度係数と同一のものを導入して、定常最適化問題における感度解析が行なえるが、これについてはふれない。(Fan, L.T. et al)

(II-2) 参考文献

- 1) 高松武一郎  
プロセスシステム工学における感度解析の役割. 化学工学,  
Vol. 31, No. 4, p 331 (1967)
- 2) 高松武一郎 橋本伊織  
プロセスシステムの最適化と感度解析 制御工学 Vol. 14  
No. 5, Vol. 14, No. 6 (1970)
- 3) 高松武一郎 橋本伊織  
プロセスシステムの最適化と感度解析 計測と制御, Vol. 9,  
No. 6, p 426 (1970)
- 4) Takamatsu, T., I. Hashimoto and H. Ohno;  
Optimal design of a large complex system from the view-  
point of sensitivity analysis; I.E.C. Process Design and  
Development, Vol. 9, p368 (1970)
- 5) Denn, M.M. and R. Aris;  
Green's function and optimal systems; I.E.C. Fundamental,  
Vol. 4, No. 1 (1965)
- 6) Denn, M.M. and R. Aris;  
Green's function and optimal systems; I.E.C. Fundamental,  
Vol. 4, No. 2 (1965)
- 7) Denn, M.M. and R. Aris;  
Green's function and optimal systems; I.E.C. Fundamental,  
Vol. 4, No. 3 (1965)
- 8) 橋本伊織  
多段結合系プロセスの定常最適化 京都大学修士論文  
(1965)
- 9) Takamatsu, T., E. Nakanishi and I. Hashimoto;  
Optimal control and its sensitivity for a multi-stage  
process; 3rd I.F.A.C. Congress at London, paper 19-F (1966)

- 10) Aris, R., D.F. Rudd and N.R. Amundson;  
On optimum cross-current extraction; C.E.S., Vol. 12,  
p88 (1960)
- 11) Zahradnik, R.L. and D.H. Archer;  
Application of the discrete maximum principle to cross-  
current extraction; I.E.C. Fundamentals, Vol. 2, p238  
(1963)
- 12) Wang, C.S. and L.T. Fan;  
Optimization of some multistage chemical process;  
I.E.C. Fundamentals, Vol. 3, p38 (1964)
- 13) Lee, E.S.;  
Optimization by a gradient technique; I.E.C. Fundamentals,  
Vol. 3, p373 (1964)
- 14) Rudd, D.F. and E.D. Blum;  
Optimum cross-current extraction with product recycle;  
C.E.S., Vol. 17, p277 (1962)
- 15) Chen, M.S.K., L.E. Erickson and L.T. Fan;  
Consideration of sensitivity and parameter uncertainty  
in optimal process design; private communication (1970)
- 16) Chen, M.S.K., L.E. Erickson and L.T. Fan;  
Sensitivity analysis and optimal design strategy with  
parameter uncertainty of the activated sludge system;  
private communication (1970)

## II-3 感度解析の設計問題への応用

### § 3-1 緒論

II-2. では プロセス最適化を考えてゆく際に 対象とするプロセスシステムの数式表現の不確かさの影響を知ることがより実際的な観点から是非必要であり、いわゆる感度解析を行なうことによって プロセスシステムの最適化問題に対して有益な情報を与えることを論じてきた。

本節では、プロセスシステムの数式表現中に含まれる不確定な要素の影響を設計問題においてどのように考え、又、その情報をどのように利用することによって、よりむだの少ないプロセスシステムを設計しうるかという問題について考察を加える。

本来 プロセスシステムにたずさわる技術者は 対象に対してある程度不完全な情報しかえられなくても、即ち 対象とするプロセスの種々のパラメータの規準値 (nominal value) と、そのパラメータ値のある信頼域 ないしは変動範囲のみが与えられるような場合でも、なおかつ より合理的かつむだの少ないシステムの設計を行なうことが課せられている。従来、多くの工学系のシステム設計においては、種々のパラメータ ないしは 外乱に対する正確な情報の不足を考慮にいれるという意味で、一旦 精密な計算をして、設計変数を算出しておいたあとで、実際の設計変数に 計算値の何%かの安全率を見込むことが広く行なわれており、工学系の設計に共通な考え方といえる。しかし、この安全率という型で設計変数に余裕を見込むことによって、種々のパラメータに対する Identification 時での誤差、あるいは、実際のプラントの運転時での変化、種々の外乱の影響を全て吸収させてしまう、という考え方に対して、十分な定量的考察が加えられてきたとはいえないであろう。

特に、プロセスシステムはますます大型化し、各 part, part を各専門家が別々に設計するとき、むろん過去の経験と実績とからある程度目安は出来ているにしても、それぞれの part で 不明確な安全率を見込む、ということは、システム全体としてみたとき、本当にそれだけの量の安全率を見込む必要があるのか、又、どのようなパラメータ変動、あるいは外乱に対して、どの部分の安全率が有効に働いているのか、という点については、はなはだ不

明瞭といわざるをえない。

プロセスシステム工学に関連する分野においても 最近 パラメーターに不確定な要素が含まれてくる場合の設計法についての研究がなされるようになってきた。例えば Ray and Aris<sup>1,2)</sup> (1966) は一般的な均一反応系において反応速度が最大値に及ぼす 反応速度定数の誤差の影響について研究しており、反応速度を最大値の周りの ある一定範囲に保つためには、温度制御をどの程度の精度で行なうべきか、また反応速度定数の *identification* をどの程度の精度で行なうべきかについて検討している。

また Wen and Chang<sup>3)</sup> (1968) は Rohrer and Sobrel<sup>4)</sup> (1965) が導入した *relative sensitivity* の概念を用いて、パラメーターが不正確にしか知られない場合の設計法について検討している。また Takamatsu, Hashimoto 等<sup>5,6)</sup> (1968, 1970) はパラメーター変動があってもそれがシステムに悪影響を与えないように設計変数に余裕量をみる際の決定法について、感度方程式を利用して考察している。

本節では、プラントプロセスに含まれるパラメーターの正確な値は未知であり、単にその規準値とそれの変動域のみが既知であるとき そのようなパラメーター値の不正確さを設計の段階で考慮にいれて、パラメーター値に対して不十分な情報しかえられていなくとも、その不正確さが設計されたシステムに出来るだけ悪影響を与えないようにするためには、どのような考察を加えるべきか、又その時には、どのような方法によって設計を行なうべきか、という問題について 決定論的な (*deterministic*) 立場から論じる。

パラメーターのその規準値からの変動が、一定にしておきたいシステムの出かに与える影響の大きさを知る一つの方法が II-2 でのべた感度係数を用いる方法であるが、この感度係数を利用することによって 上にのべた問題に対して かなり有効な設計法が考えられることを示そう。

### § 3-2 感度を考慮したいくつかの設計法

感度を考慮することによって、パラメーター変動の影響をうけにくい言いかえれば、より *insensitive* なシステムの設計法としてどのようなものがあるか示そう。

今説明を簡単化するために 次のような単純な例をとって考えてみる。

〈プロセス方程式〉

$$\begin{cases} X_{i+1} = F_i(X_i, M_i, P_i) \\ Y_N = X_{N+1} \end{cases} \quad i=1, 2, \dots, N \quad (\text{II-126})$$

〈初期条件〉

$$X_1 = \text{given value} \quad (\text{II-127})$$

〈評価関数〉

$$\text{P.I.} = J = \sum_{i=1}^N f_i(X_i, M_i) \rightarrow \text{Min.} \quad (\text{II-128})$$

このときシステムの出カ  $Y_N$  を与えられた値にし、かつ(II-128)式を最小にする設計変数  $M_i$  ( $i=1 \dots N$ ) を求めることが最適化問題であるが、ここで問題にしているのはシステムパラメータ  $P_i$  ( $i=1 \dots N$ ) の規準値とその変動域だけわかっていて、正確な値が把握できない場合の設計法について考察するわけである。

(II-126)式をパラメータ  $P_j$  ( $j=1 \dots N$ ) について微分することによって、次のような感度方程式がえられる。

$$\frac{\partial X_{i+1}}{\partial P_j} = \frac{\partial F_i}{\partial X_i} \frac{\partial X_i}{\partial P_j} + \frac{\partial F_i}{\partial P_j} \quad i=1, 2, \dots, N \quad (\text{II-129})$$

$$\frac{\partial Y_N}{\partial P_j} = \frac{\partial X_{N+1}}{\partial P_j} \quad (\text{II-130})$$

これらの基礎式を用いて 次のようないくつかの設計法が考えられる。

### (1) Limited Sensitivity Method

パラメータが変動したときに、目的値に一致させたいシステムの出カがどの程度変動するかを示す一つの指標である感度係数  $\frac{\partial Y_N}{\partial P_j}$  をある一定値内に保ち、かつ(II-128)式の評価関数を出来るだけ小さくするように設計変数を選ぶ方法である。

すなわち

$$\left| \text{each component of } \frac{\partial Y_N}{\partial P_j} \right| \leq S_{P_j} \quad (\text{II-131})$$

：  $S_{P_j}$  は許容値として与えられているものとする。

及び(II-126, 127)式を束縛条件とし、評価関数を

$$J = \sum_{i=1}^N f_i(X_i, M_i) \rightarrow \text{Min.}$$

にする設計変数  $M_i$  を選ぶ設計法である。

## (2) Modified Objective Function Method

これは(II-128)式の評価関数に パラメータ変動による影響を附加するという意味から、次のような修正された評価関数の下で最適設計を行なう方法である。

即ち、束縛条件(II-126)(II-127)(II-129)(II-130)式の下で

$$\text{Modified P.I.} : \sum_{i=1}^N f_i(X_i, M_i) + \sum_j w_{j1} \frac{\partial Y_N}{\partial P_j} w_{j2} \rightarrow \text{Min} \quad (\text{II-132})$$

とする設計変数  $M_i$  を求める方法である。

## (3) Min-Max Method

この方法は パラメータ  $P_j$  の、システムの出カに対する感度  $\frac{\partial Y_N}{\partial P_j}$  の最大のを最少にするように 設計変数  $M_i$  を決定する方法である。

即ち、(II-126)(II-127)(II-129)(II-130)式を束縛条件とし、かつ評価関数値をその許容量以下にし

$$\text{Min}_{\{M_i\}} \left\{ \text{Max}_{\{P_j\}} \frac{\partial Y_N}{\partial P_j} \right\} \quad (\text{II-133})$$

とする設計変数  $M_i$  を決定する方法である。

Rohrel and Sobrel による方法もこの範疇にはいるが、それは次のような目的関数  $J(p, M)$  を normalize した、 $S(p, M)$  として定義される relative sensitivity を用いる方法である。

即ち

$$S(p, M) = \frac{J(p, M) - J(p, \bar{M})}{J(p, \bar{M})} \quad (\text{II-134})$$

ここに

$P$ : パラメータ

$\bar{M}$ : パラメータ値が  $P$  のときの設計変数の最適値

そしてこの(II-134)式の relative sensitivity を用いて optimal decision  $M^*$  を次のようにしてうる方法である。

$$S(M^*) = \text{Min}_{\{M\}} \left\{ \text{Max}_{\{P\}} S(p, M) \right\} \quad (\text{II-135})$$

この設計法は、パラメータの変動範囲上における、目的関数の最適値からの相対的な偏異を最少にするような方法である。即ちこれは over design を

最小にするという概念にたっている。

#### (4) Minimum Sensitivity Method

パラメーターの規準値に対する評価関数値に一定の許容値を与え、その範囲内に評価関数の値がはいる。かつ重要なシステム出力のパラメーター変動に対する感度が最も小さくなるように設計変数を決定しなおす方法である。即ち (II-126) (II-127) (II-129) (II-130) 式及び

$$\sum_i \{ f_i(X_i, M_i) - f_i(\bar{X}_i, \bar{M}_i) \} \leq \Delta J \quad (\text{II-136})$$

$\Delta J$  : 評価関数の許容値  
を束縛条件とし、かつ

$$\text{Min}_{\{M_i\}} \left\{ \frac{\partial Y_N}{\partial P_j} \right\} \quad (\text{II-137})$$

となるように設計変数を決定する方法である。

以上、パラメーターの値が正確にはわからず、唯、その規準値と変動域のみが既知のとき、感度という概念を利用することによって、パラメーター変動の影響を受けない、いわゆる *insensitive* なシステムを設計するためのいくつかの方法が考えられることを示してきた。

一方このようにパラメーター値がある範囲内にあるという情報しかえられていない、即ち、パラメーター値がある不確かさを含んでいる場合とか、種々の外乱が起こると考えられるような場合に備えて、設計変数に一定の余裕 (*design margin*) をみるという考え方が、従来から通常行なわれている。

しかし、従来の設計変数に余裕をみるという設計法においては、パラメーターの規準値に対する設計において、パラメーター変動の影響を、できるだけ小さくするためには、どの設計変数に、どの程度の *design margin* を見込むことが最も合理的であるかという点について、十分な検討がされていたとは、いえない。Takamatsu, Hashimoto<sup>6)</sup> は設計変数とパラメーターの規準値において評価された感度係数を利用し、さらに最適化計算において導入された *adjoint variable* を利用する方法として、次のような設計法を提案している。



(5) adjoint variable を利用する方法

ここでもまず (II-126)~(II-128) 式で示される簡単な最適問題について説明する。この方法の一般的なシステムへの拡張は次節に示す。

(II-126)~(II-128) 式で示される最適化問題において、いったんパラメーターの規準値に対して設計変数が決定されたとき、このプロセスのパラメーター  $P_i$  に  $\delta P_i$  なる変動があり、それに対して、設計変数に  $\delta M_i$  なる余裕を与えたとすると、状態変数は  $\delta X_i$  だけ変動し、かつこれらの変数の間には次式が成立する。

$$\delta X_{i+1} = \frac{\partial F_i}{\partial X_i} \delta X_i + \frac{\partial F_i}{\partial M_i} \delta M_i + \frac{\partial F_i}{\partial P_i} \delta P_i \quad (\text{II-138})$$

$$\delta Y_N = \delta X_{N+1} \quad (\text{II-139})$$

ここで次式をみたす adjoint variable を導入する。

$$\alpha'_{i-1} = \alpha'_i \frac{\partial F_i}{\partial X_i} \quad (\text{II-140})$$

$$\alpha_N = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \vdots \\ 0 & & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II-141})$$

この adjoint variable を (II-138)~(II-139) 式に作用させて整理すると、目標値に一致させたいシステムの出力の変動は次式で表わされることがわかる。

$$\delta Y_N = \sum_{i=1}^N \alpha'_i \left( \frac{\partial F_i}{\partial M_i} \delta M_i + \frac{\partial F_i}{\partial P_i} \delta P_i \right) \quad (\text{II-142})$$

ここで全ての derivative はパラメーターの設計変数の規準値に対して評価されている。

ここでパラメーターに  $\delta P_i$  なる変動が予想されるとき、設計変数にとりだけの余裕を持たせよいかは、次のようにして求められる。

即ちシステムの出力  $Y_N$  に対する許容変動域  $C_f$  が与えられれば

(II-142) 式、及び次式を束縛条件とし

$$|\delta Y_N^j| < C_j \quad j = 1, 2, \dots, m_N \quad (\text{II-143})$$

$$\sum_i w_i f(\delta M_i) \rightarrow \text{Min} \quad (\text{II-144})$$

を解けばよい。

そして最終的な設計値としては、パラメータの規準値に対して既にえられている設計値  $\bar{M}$  に、今えられた余裕量  $\delta M$  を加えたものをとればよいことになる。

この方法は (1) ~ (4) の方法と異なり、感度係数や *adjoint variable* は全てパラメータや設計変数の規準値に対して評価されており、かつ束縛条件が (II-142) 式のような線型関数であることなどのために計算が非常に容易である。

以上の方法において、パラメータは全てその変動域全体にわたって考えられているが、パラメータが変動する際の分布が既知の場合には、その分布関数を用いた評価関数の期待値を最大最小にするように、設計変数や操作変数を決定する方法もあるが (Kiterel & Watson<sup>7)</sup>, Rudd & Watson<sup>8)</sup>) それらについてはここではふれない。

### § 3-3 設計余裕量の決定における定量的考察

— *adjoint variable* を利用する方法の拡張 —

前節では パラメーターの値が正確には知りえず、その規準値と変動域のみが既知、という条件下で、システム設計を行なう際に、そのパラメーターの不確かさが悪影響を与えないようにするには、どのような考察を加えて行かねばならないか、という問題を、感度という概念を利用することによって論じてきた。

ここでは従来から種々の情報の不確かさを補うという意味で、設計の段階で見込まれる安全率、または設計変数に対する余裕量を、より定量的に決定する際に、一つの指針を与えてくれる、§ 3-2 の 4) *adjoint variable* を利用する方法を、より一般的なシステムの設計問題に拡張しておく。

すでに § II-1-2 で定式化した一般的なシステムの定常最適化において (II-1) ~ (II-3) 式で表わされるシステムの設計が、パラメーター  $P_i, Q_i$  の規準値に対して、既に行なわれているとする。このとき、パラメーター  $P_i, Q_i$  に  $\delta P_i, \delta Q_i$  なる変動があり、その影響がシステム出力  $Y^n$  に出来るだけ及ばないようにするには、どの設計変数に、どの程度の余裕量を見込むのが最も合理的になるか、という問題を、II-2 で述べた感度解析の方法を利用することによって考察する。

§ II-2-2 で述べたように、システムパラメーターの変動量  $\delta P_i, \delta Q_i$ 、設計変数の余裕量  $\delta M_i$ 、及び一定にしておきたいシステム出力の変動量  $\delta Y^n$  との関係は、*adjoint variable* を利用することによって、次のようにえられる。(II-27)式において

$$(M_i)_n = (B_i)_n \frac{\partial G_i}{\partial M_i} + (A_i)_n \frac{\partial F_i}{\partial M_i} \quad (\text{II-145})$$

$$(P_i)_n = (A_i)_n \frac{\partial F_i}{\partial P_i} \quad (\text{II-146})$$

$$(Q_i)_n = (B_i)_n \frac{\partial G_i}{\partial Q_i} \quad (\text{II-147})$$

とおくと、一定にしておきたいシステム出力の変動は、結局、次式で表わされることになる。

$$\delta Y_n = \sum_{i=1}^N (M_i)_n \delta M_i + \sum_{i=1}^N \{ (P_i)_n \delta P_i + (Q_i)_n \delta Q_i \} \quad (\text{II-148})$$

一方一定にしておきたいシステム出力に、次のような許容範囲が与えられているとすると

$$\text{即ち} \quad a_n \leq \delta Y_n \leq b_n \quad (\text{II-149})$$

$n = 1, 2, \dots, N$

ここに  $a_n, b_n$  は許容範囲の上限 下限である。

システム出力の変動を上式の許容範囲内におさめ、さらにそのために必要となる設計変数の余裕量  $\delta M_i$  の総和を最小にするには、どの設計変数にどれ程の余裕量を見込むのが最も合理的であるかという問題は次のような線型計画法の問題として定式化出来る。

即ち (II-148) (II-149) 式 及び

$$\delta M_i \geq 0 \quad (\text{II-150})$$

の束縛条件の下で

$$\sum_{i=1}^N w_i \delta M_i \rightarrow \text{Min.} \quad (\text{II-151})$$

但し  $w_i$  は  $r_i$  次元の重み係数

となる  $\delta M_i$  を見出すことにより、パラメータ変動のシステム出力に及ぼす影響を吸収する際に、余裕量を見込まねばならない設計変数と、その余裕量の大きさを知ることが出来る。

### § 3-4 熱交換器システムへの応用

本節では 具体的な例として 熱交換器システムをとりあげ、このシステムの最適設計を *Multi-level Technique* を用いて解き について各熱交換器に対する伝熱面積の余裕量を より合理的に決定することを、§ 3-3 でのべた L.P. の問題に帰着させる方法によって考察する。<sup>6)</sup>

#### 問題の定式化

化学プロセスシステムにおいて あるプロセスの一部で発生する熱を有効に他の部分で利用するためには、一般に熱交換器のネットワークが用いられる。特に 石油化学プロセスや 他の化学プロセスにおいて、このような熱の有効な回収は そのプロセスシステムの経済的な観点から是非必要な問題であり、その熱交換器の大きさや *flow network* のとり方は直接、建設費や運転操作費に影響を与えている。

ここではまず次のような問題を考えることにする。

与えられた *configuration* をもつ熱交換器システムにおいて、次の束縛条件をみたすように 高温流体流量と 各熱交換器の伝熱面積とを決定せよ

但し (1) 各低温流体の流量及び入口、出口温度は規定されている。

(2) 各高温流体の入口温度は与えられているが、出口温度には制限なし。<sup>8)</sup>

この種の最適化問題は 熱交換を表わす式が非線型であり、又、変数の数も多く、沢山の熱交換器が複雑に連結されていることなどのために大変難しい問題となっている。しかしこの問題も *Multi level Technique*<sup>9-16)</sup> を用いて、もとの問題を多くのより次元の低いサブ問題に分解することによって、それぞれの低次元のサブ問題は普通の最適化手法によって解くことができるようになる。ここでは複雑さをさけるために、いずれの高温流体も、いくつかに分岐せず、又、いくつかの高温流体が一つに合一することがないと仮定しておく。そうすると全体のシステムは高温流体にぞって、いくつかのサブシステムに分解することができる。

例えば Fig II-16 に示すような熱交換システムにおいて、全システムは高温流体の数によって Fig II-17 のように、4つのサブシステムに分解することができる。

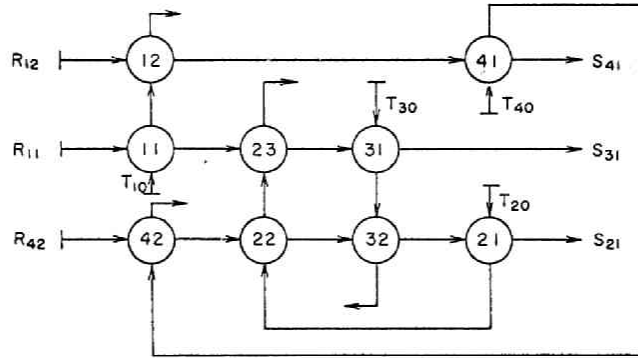


Fig. II-16 Network of heat exchanger system

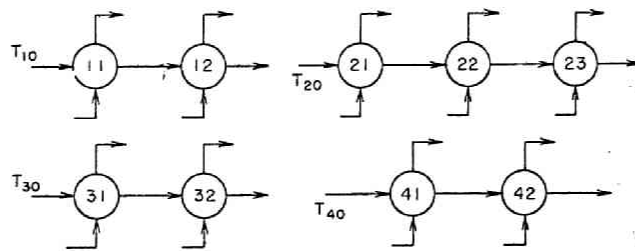


Fig. II-17 Four subsystems

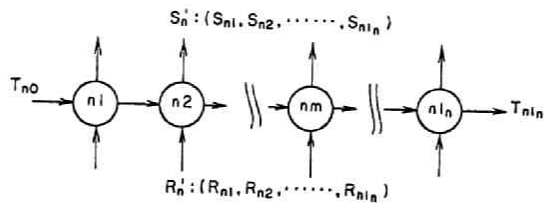


Fig. II-18 n-th subsystem

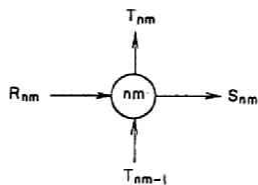


Fig. II-19 (n-m)-th element of n-th subsystem

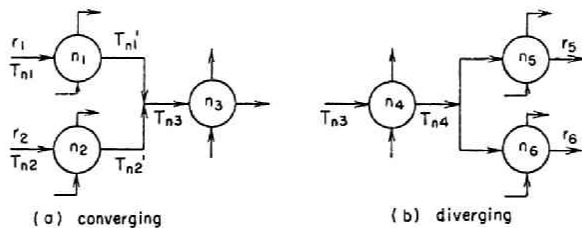


Fig. II-20 Converging and diverging streams

即ち一般に高温流体の数が  $N$  ならば 全システムはいくつかの熱交換器を含む  $N$  個のサブシステムに分解することができる。

例えば  $n$  番目のサブシステムは Fig I-18 に示すように  $l_n$  個の熱交換器を含んでおり  $n$  番目のサブシステムの  $m$  番目の要素 即ち  $(n-m)$  番目の熱交換器は Fig. I-19 のように示される。

さて Fig I-19 のように示される各熱交換器に対して。

(1) 伝熱速度式

(2) 高温・低温流体間熱収支

の2つの方程式がえられ  $(n-m)$  番目の熱交換器に対して

<伝熱速度式>

$$q_{nm} = A_{nm} h_{nm} (S_{nm}, R_{nm}, T_{nm}, T_{n-m-1}, P_{nm}) \quad (\text{I-152})$$

$$n = 1, 2, \dots, N; \quad m = 1, 2, \dots, l_n.$$

ここに  $q_{nm}$  :  $(n-m)$  番目の熱交換器における交換熱量 [Btu/hr, あるいは kcal/hr]

$A_{nm}$  : 伝熱面積 [sq-ft あるいは  $m^2$ ]

$S_{nm}$  : 低温側流体出口温度 [ $^{\circ}\text{F}$  あるいは  $^{\circ}\text{C}$ ]

$R_{nm}$  : 低温側流体入口温度 [ $^{\circ}\text{F}$  あるいは  $^{\circ}\text{C}$ ]

$T_{nm}$  : 高温側流体出口温度 [ $^{\circ}\text{F}$  あるいは  $^{\circ}\text{C}$ ]

$T_{n-m-1}$  : 高温側流体入口温度 [ $^{\circ}\text{F}$  あるいは  $^{\circ}\text{C}$ ]

$P_{nm}$  : 総括伝熱係数のようなプラントパラメータ

$h_{nm}$  : 推進力の定義によって決まってくる関数を意味する。

理想的な向流形の熱交換器では  $h_{nm}$  は次式で示される。

$$h_{nm} = \frac{U_{nm} \{ (T_{n-m-1} - S_{nm}) - (T_{nm} - R_{nm}) \}}{\ln \{ (T_{n-m-1} - S_{nm}) / (T_{nm} - R_{nm}) \}}$$

ここで  $U_{nm}$  : 総括伝熱係数 [Btu/hr.  $^{\circ}\text{F}$ . sq-ft あるいは kcal/hr.  $^{\circ}\text{C}$ .  $m^2$ ]

<両流体間の熱収支>

$$q_{nm} = (WC_p)_{nm} (S_{nm} - R_{nm}) \quad (\text{I-153})$$

$$= (WC_p)_{nm} (T_{n-m-1} - T_{nm})$$



ここに  $(WC_p)_{nm}$  及び  $(WC_p)_{nl}$  はそれぞれ  $(n-m)$  番目の熱交換器における低温流体、高温流体の熱流量であり、前者は前もって与えられており、後者は、いずれの高温流体も分岐も合も無いという仮定から、次の関係式をみだす。

$$(WC_p)_{n1} = (WC_p)_{n2} = \dots = (WC_p)_{nl} \quad (II-154)$$

$n=1, 2, \dots, N$

さらに (II-152) (II-153) は次のように整理できる。

$$A_{nm} = f_{nm}(T_{nm}, T_{nm-1}, S_{nm}, R_{nm}, P_{nm}) \quad n=1, 2, \dots, N \quad (II-155)$$

$$r_n = g_{nm}(T_{nm}, T_{nm-1}, S_{nm}, R_{nm}) \quad m=1, 2, \dots, l_n \quad (II-156)$$

ここに

$$f_{nm} = \frac{(WC_p)_{nm}(S_{nm} - R_{nm})}{h_{nm}(T_{nm}, T_{nm-1}, S_{nm}, R_{nm}, P_{nm})}$$

$$g_{nm} = \frac{(WC_p)_{nm}(S_{nm} - R_{nm})}{T_{nm-1} - T_{nm}}$$

$$r_n = (WC_p)_{n1} = (WC_p)_{n2} = \dots = (WC_p)_{nl}$$

また熱交換器の建設費は、通常、大きさの関数であり、又、操作費は流量の関数であるから、低温流体の熱流量、及び入口、出口温度が与えられているという仮定から、全費用は次のような式によって表わされる。

$$F = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^{l_n} F_{nm}(A_{nm}, r_n) \quad (II-157)$$

したがって、この設計問題のシステム方程式は結局 (II-155) (II-156) (II-157) 式から次のように与えられる。

$$M_n = f_n(T_n, R_n, S_n) \quad n=1, 2, \dots, N \quad (II-158)$$

$$F = \sum_{n=1}^N F_n(M_n) \quad (II-159)$$

ただし

$$T_n = (T_{n0}, T_{n1}, T_{n2}, \dots, T_{nl_n})' : \quad l_n + 1 \text{ 次元ベクトル}$$

$$S_n = (S_{n1}, S_{n2}, \dots, S_{nl_n})' : \quad l_n \text{ 次元ベクトル}$$

$$R_n = (R_{n1}, R_{n2}, \dots, R_{nl_n})' : \quad l_n \text{ 次元ベクトル}$$

$$M_n = (A_{n1}, A_{n2}, \dots, A_{nl_n}, r_{n1}, \dots, r_{nl_n})' : \quad 2l_n \text{ 次元ベクトル}$$

$$f_n = (f_{n1}, f_{n2}, \dots, f_{nl_n}, g_{n1}, \dots, g_{nl_n})' : \quad 2l_n \text{ 次元ベクトル}$$

$$F_n(M_n) = \sum_{m=1}^{l_n} F_{nm}$$

ここに  $T_{n0}$  ( $n=1, \dots, N$ ) は ある値に与えられている高温流体の入口温度である。低温流体のいくつかの出口温度は、希望値が与えられており、いくつかの入口温度も前もって与えられているとする。また各サブシステム間の結合状態を表わす次式を 全システム方程式(II-159) の一つとして加えねばならない。

$$R_n = \sum_{k=1}^N [C_{nk}] S_k + R_n^0 \quad (\text{II-160})$$

ここに  $[C_{nk}]$  は  $l_n \times l_k$  マトリックスであり  $k$  番目のサブシステムの いずれの出力が  $n$  番目のサブシステムの入力になっているかを示すマトリックスである。また  $R_n^0$  は  $l_n$  次元のベクトルであり その要素は 他のサブシステムの出力から与えられず、固定された入口温度として与えられている所を除いて全てゼロである。

そうすると 上にのべてきた最適化問題は 次のように定式化することができる。  
“(II-158)(II-160) 式を束縛条件として  $F$  を最少にする  $\{M_n\}$  の列を決定せよ。”

### サブ問題の構成

上で定式化した最適化問題に対する ラグランジアン  $L$  は次式で与えられる。

$$L = \sum_{n=1}^N \left\{ F_n + \pi_n' (f_n - M_n) + \gamma_n' \left( \sum_{k=1}^N [C_{nk}] S_k + R_n^0 - R_n \right) \right\} \quad (\text{II-161})$$

ここに  $\pi_n'$  ( $2l_n$  次元),  $\gamma_n'$  ( $l_n$  次元) は (II-158), (II-160) 式に対するラグランジュ乗数である。束縛条件 (II-158)(II-160) の下で  $F$  を極値にするための必要条件は、全ての  $n$  に対して (II-161) 式を  $T_{n0}$  及び希望値に固定されている  $S_n$  のいくつかを除く全ての変数  $T_n, S_n, R_n, M_n, \pi_n, \gamma_n$  について停留値にすることである。これらの条件は次のように与えられる。

$$\frac{\partial L}{\partial M_n} = \frac{\partial F_n}{\partial M_n} - \pi_n' = 0 \quad (\text{II-162})$$

$$\frac{\partial L}{\partial T_n} = \pi_n' \frac{\partial f_n}{\partial T_n} = 0 \quad (\text{II-163})$$

$$\frac{\partial L}{\partial R_n} = \pi_n' \frac{\partial f_n}{\partial R_n} - \gamma_n' = 0 \quad (\text{II-164})$$

$$\frac{\partial L}{\partial \pi_n} = f_n - M_n = 0 \quad (\text{II-165})$$

$$\frac{\partial L}{\partial r_n} = \sum_{k=1}^N [C_{nk}] S_k + R_n^{\circ} - R_n = 0 \quad (\text{II-166})$$

$$\frac{\partial L}{\partial S_n} = \pi_n' \frac{\partial f_n}{\partial S_n} + \sum_{k=1}^N r_k' [C_{kn}] = 0 \quad (\text{II-167})$$

もしここで全ての  $S_n$  が与えられているとすると、(II-162)~(II-166)の関係式の中にはある  $n$  に対して Fig. II-18 に示されるような  $n$  番目のサブシステムに關係する変数のみしか含まれていないことは明らかである。このことはまた全システムが高温流体によっていくつかのサブシステムに分解可能であることを示しているのである。事実(II-162)~(II-166)の関係式は 次の束縛条件の下でサブ評価関数  $F_n$  に  $T_n, R_n$  及び  $M_n$  について極値をもたせるための必要条件にもなっている。

$$M_n = f_n(T_n, R_n, S_n^{\circ}) \quad (\text{II-168})$$

$$R_n = \sum_{k=1}^N [C_{nk}] S_k^{\circ} + R_n^{\circ} \quad (\text{II-169})$$

ここに  $S_n^{\circ}$  は  $S_n$  に対する仮定値であり、以下では可変パラメーターと考える。

従って各サブシステムに対してサブ問題は次のように定義される。

即ち“(II-168, 169)式を束縛条件として  $F_n$  を最少にするような  $M_n$  を見い出せ”

ところが(II-169)式によつて  $R_n$  は容易に消去できて  $n$  番目のサブ問題は変数として  $M_n$  と  $T_n$  のみしか含まない。このことからサブ問題の次元はもとの問題の次元よりもかなり低いものになることがわかる。またこのような分解にもかかわらず  $M_n, T_n, R_n, S_n$  の全ての変数は常にシステム方程式(II-158)~(II-160)を満足しているからサブ問題の解は任意に仮定された  $S_n^{\circ}$  に対して常に feasible であるといえる。この点からも feasible method<sup>1)</sup> が最適解以外では non-feasible になっている pricing method よりも実際に計算する点からするとより有効であることが容易にわかる。さらにこのサブ問題の解は、全てパラメーター  $S_n^{\circ}$  の値に依存していることは明らかであり、この  $S_n^{\circ}$  が最適値即ち(II-177)式をみたすようにとられたとき、そのときのサブ問題の解がまたもとの全システムの解になることは容易にわかる。

しかし、一般に任意に仮定された  $S_n^{\circ}$  に対しては(II-167)式の関係式が満足されないの

で  $S_n^0$  の仮定値を全システムにおける最適値の方向に改変してゆくための *coordination algorithm* が実際には必要となってくる。次節においては、この点についてのべよう。

しかしまず第一には、仮定された  $S_n^0$  の値をもとにして、*first level* でサブ問題を解くことが必要になる。しかしこのサブ問題は、もとの問題に比して次元数は著しく低くなっており、またそのサブシステム内での結合関係は簡単なものになっているから、通常の最適化手法を用いれば容易に解くことができる。また特に設計変数が  $A_{n \times n}$  のみであるとき、即ち全ての熱流量  $WC_p, wC_p$  が与えられているときには、サブ問題はもはや最適化問題とはならず、初期条件  $T_{n0}$  と(II-158)式を用いて容易に解くことができる。

またこれでは、いずれの高温流体も、分岐も合一もないと仮定してきたが、もし Fig II-20 のように分岐、合一のある場合には、次のような条件を付け加えることによって同様に扱うことができる。

即ち Fig II-20(a) に対して  $r_1' + r_2' = r_3$  (II-170)

$$r_1' T_{n1} + r_2' T_{n2} = r_3 T_{n3} \quad (\text{II-171})$$

Fig II-20(b) に対して  $r_4 = r_5' + r_6'$  (II-172)

ここに

$$r_1' = r_1 \frac{(WC_p)_{n1}}{(WC_p)_{n3}}$$

$$r_2' = r_2 \frac{(WC_p)_{n2}}{(WC_p)_{n3}}$$

$$r_5' = r_5 \frac{(WC_p)_{n5}}{(WC_p)_{n4}}$$

$$r_6' = r_6 \frac{(WC_p)_{n6}}{(WC_p)_{n4}}$$

### Coordination algorithm と計算手順

*feasible method* によれば、全システムを分解してもシステムを記述している関係を満足している、即ち、いつも *feasible* な範囲で問題を考えている、ということから、次のような効果的な *second level* での *algorithm* が考えられる。即ちもし  $S_n^0$  にある仮定値を与えることによって、他の変数はその仮定値に依存した形で、*first level* での計算によって容易に求められる。従って  $S_n^0$  に小さな *perturbation* を与えると、サブ問題の解はその *suboptimal* な状態からわずかに変動し、その変動量は *first order* の範囲では(II-158)(II-160)式から、

次のように容易に求まる.

$$\delta M_n = \frac{\partial f_n}{\partial T_n} \delta T_n + \frac{\partial f_n}{\partial R_n} \delta R_n + \frac{\partial f_n}{\partial S_n} \delta S_n \quad (\text{II-173})$$

$$\delta R_n = \sum_{k=1}^N [C_{nk}] \delta S_k \quad (\text{II-174})$$

また 目的関数  $F$  の変動量は次式で与えられる.

$$\delta F = \sum_{n=1}^N \frac{\partial F}{\partial M_n} \delta M_n \quad (\text{II-175})$$

ここで 全ての偏微係数は  $S_n^0$  によってきまる *suboptimal* な状態において評価されている.

ここで(II-173, 174)式にそれぞれ  $\pi_n, r_n$  を乗じ、 $n$  について加え合わせることによって次式がえられる.

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N \pi_n' \delta M_n &= \sum_{n=1}^N \left[ \pi_n' \frac{\partial f_n}{\partial T_n} \delta T_n + (\pi_n' \frac{\partial f_n}{\partial R_n} - r_n') \delta R_n \right. \\ &\quad \left. + (\pi_n' \frac{\partial f_n}{\partial S_n} + \sum_{k=1}^N r_k' [C_{kn}]) \delta S_n \right] \end{aligned} \quad (\text{II-176})$$

また *suboptimal* な解は(II-162)~(II-164)の関係式をみたすことから(II-176)式はさらに次のようになる.

$$\sum_{n=1}^N \frac{\partial F}{\partial M_n} \delta M_n = \sum_{n=1}^N \left( \pi_n' \frac{\partial f_n}{\partial S_n} + \sum_{k=1}^N r_k' [C_{kn}] \right) \delta S_n \quad (\text{II-177})$$

従って 目的関数の変動というのは  $S_n^0$  の仮定値の変動量と次のように関係づけられる.

$$\delta F = \sum_{n=1}^N \left( \frac{\partial L}{\partial S_n} \right) \delta S_n \quad (\text{II-178})$$

i.e.

$$\frac{\partial F}{\partial S_n} = \frac{\partial L}{\partial S_n} \quad (\text{II-179})$$

ここに  $\frac{\partial F}{\partial S_n}$  は調整パラメータ  $S_n$  についての  $F$  の gradient である. このことから *coordination algorithm* として *gradient type* のものをとればよいことがわかる. 通常の *gradient method* でもよいが, ここでは収束速度を速めるために Fletcher, R and C. M. Reeves<sup>17)</sup> による *conjugate gradient method* を用いる. 即ち

(I)  $S^0$ :  $S_n$  の仮定値

$$(II) \quad \eta^0 = \frac{\partial L}{\partial S^0} \quad , \quad \theta^0 = -\eta^0$$

$$(III) \quad \eta^k = \frac{\partial L}{\partial S^k}$$

$$(IV) \quad \lambda^{k-1} = \eta^{k-1} \eta^k / \eta^{k-1} \eta^{k-1}$$

$$(V) \quad \theta^k = -\eta^k + \lambda^{k-1} \theta^{k-1}$$

$$(VI) \quad S^{k+1} = S^k + \kappa^k \cdot \theta^k$$

ここに  $S^{k+1} = (S_1^k, \dots, S_n^k)$ ,  $k$ : 計算のくり返し回数

$\kappa^{k-1}$ :  $S^{k-1}$  を通る  $\theta^{k-1}$  方向の上で  $F(S^k)$  を最小にするような定数

この方法は  $n$  変数の任意の二次関数の最小値を高々  $n$  回のくり返しで探し出すことができる。しかし二次関数でない関数については、 $n$  回よりも多くのくり返しを要するといわれている。

この conjugate gradient method を 2nd level の conjugation algorithm に利用することになると 全体のシステムの最適化を 2nd level の feasible method によって解くのは次のような手順になる。(Fig. II-21, 参照)。

(1)  $S_n$  に対する最初の仮定値  $S_n^0$  を選び first level に送る。

(2) first level で  $S_n^0$  を用いて サブ問題を解き  $M_n^0, R_n^0, T_n^0, \pi_n^0$  及び  $\eta_n^0$  を計算する。

(3) これらのサブ問題の解を second-level に送る

(4) サブ問題の解を用いて  $\frac{\partial L}{\partial S_n}$  を計算し、 $\frac{\partial L}{\partial S_n} = 0$  となるかどうかを判定する。一般には、 $\frac{\partial L}{\partial S_n} \neq 0$

(5)  $S_n$  の新しい仮定値  $S_n^{k+1}$  ( $k=0, 1, 2, \dots$ ) を、上の (I)~(VI) の手順によって計算し これらの値を first-level に送る。

(6) (2) にもどり  $\frac{\partial L}{\partial S_n} = 0$  が満足されるまで 計算をくり返す。

### 数値計算例

Fig. II-16 に示したような configuration をもつ 熱交換器システムについて考察する。

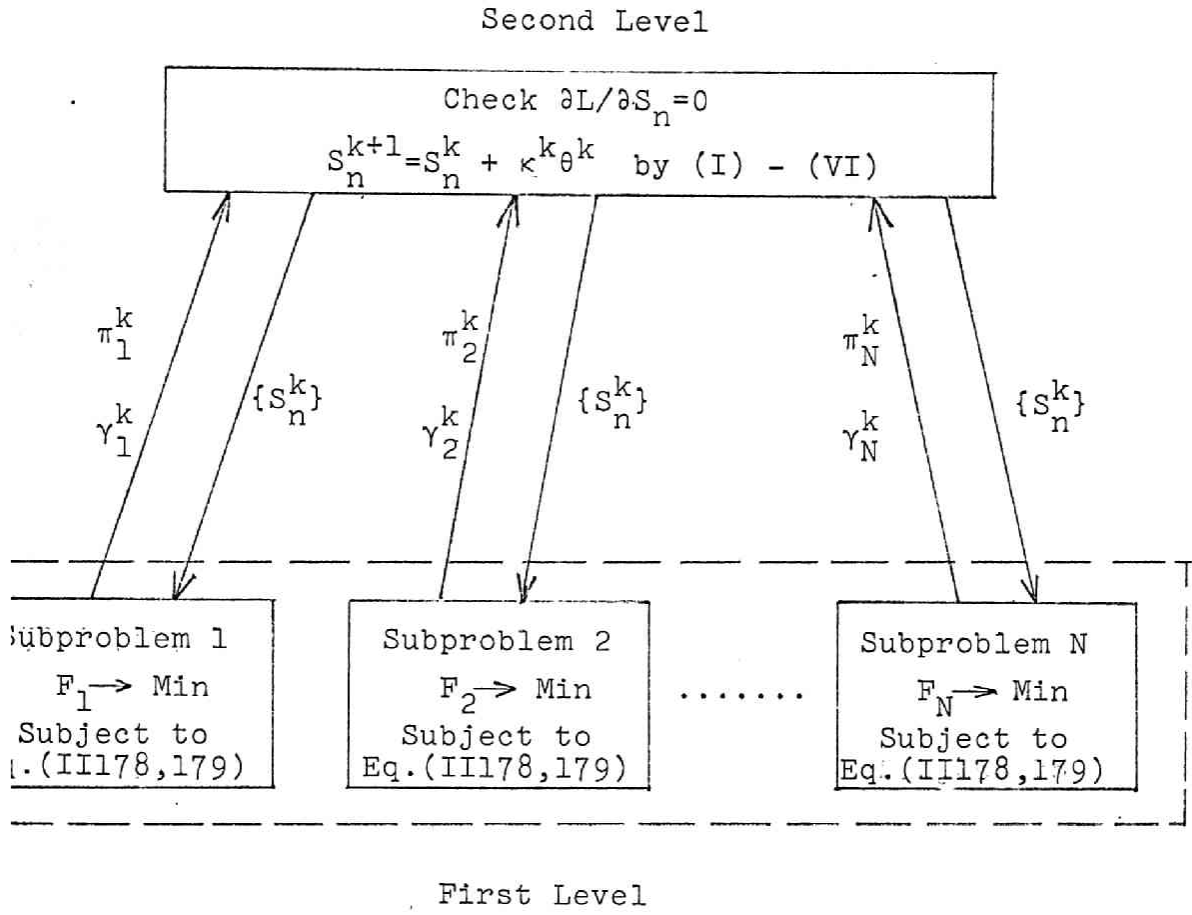


Fig.II-21 Schematic diagram of two level algorithm

このシステムの全ての熱交換器が tube-shell type であるとする (II-155), (II-156) 式の伝熱速度式及び熱収支式は次のようになる。

$$A_{nm} = \frac{\Gamma_n}{U_{nm} G_{nm} (1 - \Gamma_n / (WCp)_{nm})} \ln \frac{T_{nm-1} - S_{nm}}{T_{nm} - R_{nm}} \quad (\text{II-180})$$

$$\Gamma_n = (WCp)_{nm} \frac{S_{nm} - R_{nm}}{T_{nm-1} - T_{nm}} \quad (\text{II-181})$$

ここに  $U_{nm}$  : 総括伝熱係数 [Btu/hr $\cdot$ °F $\cdot$ sq ft あるいは Kcal/hr $\cdot$ °C $\cdot$ m $^2$ ]

$G_{nm}$  : 幾何学的補正係数

$n = 1, 2, 3, 4$

$m = 1, 2, (n = 1, 3, 4 \text{ に対して}); m = 1, 2, 3 (n = 2 \text{ に対して})$

Fig II-16に示すシステムを高温流体の流れに沿って、4つのサブシステムに分解することになると、次のようなサブシステム間の結びつきを表わす関係式がえられる。

$$\left. \begin{array}{lll} S_{12} = R_{41} & S_{23} = R_{31} & S_{22} = R_{32} \\ S_{11} = R_{23} & S_{42} = R_{22} & S_{32} = R_{21} \\ R_{11}^{\circ} = R_{11} & R_{12}^{\circ} = R_{12} & R_{42}^{\circ} = R_{42} \end{array} \right\} \quad (\text{II-182})$$

このように表現されるシステムにおいて次のような最適設計問題を考える。

即ち 全ての熱流量  $\Gamma_n = (WCp)_{nm}$  及び  $(WCp)_{nm}$  が与えられ、さらに低温流体、高温流体の入口温度  $R_{11}, R_{12}, R_{42}$  及び  $T_{n0} (n=1, 2, 3, 4)$  が与えられており、低温流体の出口温度  $S_{21}, S_{31}, S_{41}$  を希望値 (super script  $^{\circ}$  で示される) にたかめたいとき 総伝熱面積

$$F = \sum_{n=1}^4 \sum_{m=1}^{l_n} A_{nm}, \quad l_1 = l_3 = l_4 = 2, l_2 = 3. \quad (\text{II-183})$$

を最小にするには 各熱交換器の伝熱面積  $A_{nm}$  をどのようにすればよいか。

この問題を前述した方法に従って解くことにすると まず各サブシステムに対するサブ問題は 次のように定式化される。

“サブ問題は  $n (n=1, 2, 3, 4)$ ”

束縛条件



$$A_{nm} = \frac{\gamma_n}{U_{nm} G_{nm} (1 - \gamma_n / (wC_p)_{nm})} \ln \frac{T_{nm-1} - S_{nm}^{\circ}}{T_{nm} - R_{nm}} \quad (\text{II-184})$$

$$\gamma_n = (wC_p)_{nm} \frac{S_{nm}^{\circ} - R_{nm}}{T_{nm-1} - T_{nm}} \quad (\text{II-185})$$

の下で 次式で表わされる  $F_n$  を最小にする  $A_{nm}$  ( $m=1, 2, \dots, l_n$ ) を見い出せ."

$$F_n = \sum_{m=1}^{l_n} A_{nm} \quad (\text{II-186})$$

ここに  $S_n^{\circ}$  ( $n=1, 2, 3, 4$ ;  $m=1, \dots, l_n$ ) は 2nd level で与えられる  
可変パラメーターの値である。また  $R_{nm}$  は 結びつきを表わす関係式 (II-182)  
からえられる。従ってこの  $n$ -番目の サブ問題 に対する必要条件は (II-184)  
(II-185) 式と、次の式によってえられる。

$$\frac{\partial L_n}{\partial A_{nm}} = 1 - \mu_{nm} = 0 \quad m=1, 2, \dots, l_n \quad (\text{II-187})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_n}{\partial T_{nm-1}} = & \frac{E_{nm} \mu_{nm}}{T_{nm-1} - S_{nm}^{\circ}} - \frac{E_{nm-1} \mu_{nm-1}}{T_{nm-1} - R_{nm-1}} - \frac{\nu_{nm} (wC_p)_{nm} (S_{nm}^{\circ} - R_{nm})}{(T_{nm-1} - T_{nm})^2} \\ & + \frac{\nu_{nm-1} (wC_p)_{nm-1} (S_{nm-1}^{\circ} - R_{nm-1})}{(T_{nm-2} - T_{nm-1})^2} = 0 \quad (\text{II-188}) \\ & m=2, \dots, l_n \end{aligned}$$

$$\frac{\partial L_n}{\partial T_{nl_n}} = - \frac{E_{nl_n} \mu_{nl_n}}{T_{nl_n} - R_{nl_n}} + \frac{\nu_{nl_n} (wC_p)_{nl_n} (S_{nl_n}^{\circ} - R_{nl_n})}{T_{nl_n-1} - T_{nl_n}} = 0 \quad (\text{II-189})$$

$$\frac{\partial L_n}{\partial R_{nm}} = \frac{E_{nm} \mu_{nm}}{T_{nm} - R_{nm}} - \frac{\nu_{nm} (wC_p)_{nm}}{T_{nm-1} - T_{nm}} - \gamma_n = 0 \quad (\text{II-190})$$

$m=1, 2, \dots, l_n$

ここに

$$E_{nm} = \frac{\gamma_n}{U_{nm} G_{nm} (1 - \gamma_n / (wC_p)_{nm})} \quad (\text{II-191})$$

$$\begin{aligned} L_n = & \sum_{m=1}^{l_n} \left[ A_{nm} + \mu_{nm} \left\{ E_{nm} \ln \frac{T_{nm-1} - S_{nm}^{\circ}}{T_{nm} - R_{nm}} - A_{nm} \right\} + \nu_{nm} \left\{ (wC_p)_{nm} \frac{S_{nm}^{\circ} - R_{nm}}{T_{nm-1} - T_{nm}} - \gamma_n \right\} \right. \\ & + \left. \begin{cases} \delta_{11} (R_{11}^{\circ} - R_{11}) + \delta_{12} (R_{12}^{\circ} - R_{12}) & (n=1 \text{ の } \delta) \\ \delta_{21} (S_{32}^{\circ} - R_{21}) + \delta_{22} (S_{42}^{\circ} - R_{22}) + \delta_{23} (S_{11}^{\circ} - R_{23}) & (n=2 \text{ "}) \\ \delta_{31} (S_{23}^{\circ} - R_{31}) + \delta_{32} (S_{32}^{\circ} - R_{32}) & (n=3 \text{ "}) \\ \delta_{41} (S_{12}^{\circ} - R_{41}) + \delta_{42} (R_{42}^{\circ} - R_{42}) & (n=4 \text{ "}) \end{cases} \right] \quad (\text{II-192}) \end{aligned}$$

$\mu_{nm}$ ,  $\nu_{nm}$ ,  $\gamma_{nm}$  ( $m=1, 2, \dots, l_n$ ) は それぞれ (II-184) (II-185) (II-182) 式に対する ラグランジュ  
乗数である。

しかしこの $n$ -番目のサブ問題はもはや最適化問題とはならず、 $T_{nm}$ ,  $A_{nm}$  ( $n=1, \dots, 2n$ ) については (II-184), (II-185) 式をとくことにより、また  $\mu_{nm}$ ,  $V_{nm}$ ,  $r_{nm}$  については (II-187, 188, 189) 式をとくことにより、くり返し計算を繰り返して解をうる事が出来る。

そして、これらの 1st level の解を 2nd level に送る。2nd level では新しい  $S_{nm}$  の値を前述した (I) ~ (VI) の手順によって求め、この新しい  $S_{nm}$  の値を 1st level に送り返し、1st level でまた (II-174) ~ (II-196) 式で示されるサブ問題を解きなおすことになる。このくり返しは 2nd level において、次の関係式が満足されるまで続き、次の条件が満たされれば、そのときの 1st level の解が全体のシステムに対する最適解となる。

$$\frac{\partial L}{\partial S_{11}} = -\frac{\mu_{11} E_{11}}{T_{10} - S_{11}} + \frac{v_{11} (WQ)_{11}}{T_{10} - T_{11}} + r_{23} = 0 \quad (\text{II-193})$$

$$\frac{\partial L}{\partial S_{12}} = -\frac{\mu_{12} E_{12}}{T_{11} - S_{12}} + \frac{v_{12} (WQ)_{12}}{T_{11} - T_{12}} + r_{41} = 0 \quad (\text{II-194})$$

$$\frac{\partial L}{\partial S_{22}} = -\frac{\mu_{22} E_{22}}{T_{21} - S_{22}} + \frac{v_{22} (WQ)_{22}}{T_{21} - T_{22}} + r_{32} = 0 \quad (\text{II-195})$$

$$\frac{\partial L}{\partial S_{23}} = -\frac{\mu_{23} E_{23}}{T_{22} - S_{23}} + \frac{v_{23} (WQ)_{23}}{T_{22} - T_{23}} + r_{21} = 0 \quad (\text{II-196})$$

$$\frac{\partial L}{\partial S_{32}} = -\frac{\mu_{32} E_{32}}{T_{31} - S_{32}} + \frac{v_{32} (WQ)_{32}}{T_{31} - T_{32}} + r_{21} = 0 \quad (\text{II-197})$$

$$\frac{\partial L}{\partial S_{42}} = -\frac{\mu_{42} E_{42}}{T_{41} - S_{42}} + \frac{v_{42} (WQ)_{42}}{T_{41} - T_{42}} + r_{22} = 0 \quad (\text{II-198})$$

∴  

$$L = \sum_{n=1}^4 L_n$$

Table II-1 に示す数値を用いて計算した結果を示すのが Fig. II-22 である。

$nm$	$(WC_p)_{nm}$ $\times 10^4$	$(wc_p)_{nm}$ $\times 10^4$	$U_{cm}G_{nm}$	$T_{n0}$	$R_{nm}$	$S_{nm}$
11	150.0	100.0	100.0		180.0	
12	150.0	100.0	100.0	400.0	130.0	
21	150.0	135.0	135.0			500.0
22	150.0	135.0	135.0	530.0		
23	150.0	100.0	100.0			
31	150.0	100.0	100.0	600.0		450.0
32	150.0	135.0	135.0			
41	150.0	100.0	100.0	500.0		400.0
42	150.0	135.0	135.0		150.0	

Table II-1 Numerical values used in computation

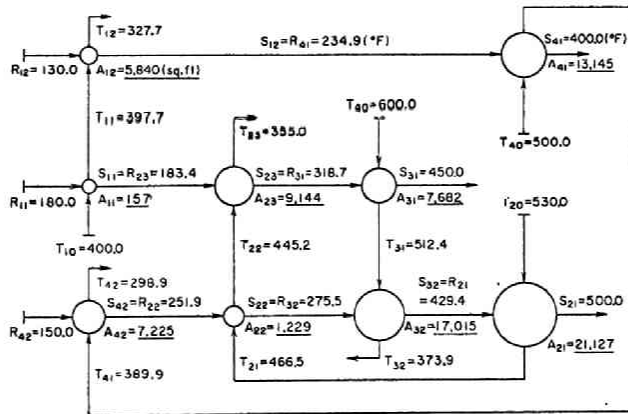


Fig. II-22 Result of optimal design

前節にのべた熱交換器システムの最適設計問題において基礎になっている方程式は

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta t \quad (\text{II-199})$$

という伝熱速度式であるが、この式の中に含まれている総括伝熱係数 $U$ も有効温度差 $\Delta t$ も、正確にわかっているとして最適問題を考えてきた。しかし、 $U$ は熱交換器の設計において2つの境界における熱交換係数と tube wall の熱抵抗を結びつけることが便利であるということから、熱交換器の中では一定であるとして実験的に求められている。また2流体の平均有効温度差 $\Delta t$ も通常熱交換器の幾何学的な形状や流体の流下様式に依存するものである。理想的な並流及び向流型の熱交換器では通常熱交換器の両端での2流体間の温度差の比の対数をとった対数平均温度差がとられている。しかし実際の熱交換器では複雑な向流タイプのものがあり単純な対数平均温度差では不十分であるために、補正係数が考慮にいれられている。このようなことから(II-209式の数学的モデル中に含まれているパラメータは推定する時に当然誤差も含まれているし、又時間とともにかなり変化すると考えるのが自然であろう。

そのために実際の設計においてはシステムパラメータの推定時の誤差の影響や種々の外乱に対しても設計するシステムが悪影響をうけないようにするために、熱交換器の伝熱面積には安全率が考慮されている。むしろこの安全率は現在、過去の経験の蓄積から見積もられているのであるが、熱交換器システムが大規模かつ複雑になればなる程適確に安全率を見積もることはますます困難になってくる。しかもその見積もり方の不適切さのもつ影響はますます大きなものになることは容易にわかる。

即ち、パラメータの推定時の誤差の影響はどのパラメータのものが評価関数にもっとも高感度に影響しているのかまたそれらの悪影響のために希望値に一定にしておきたい低温側流体の出口温度がどの程度変動してくるかということを知ることが必要なのである。さらにその影響を明確に知るだけでなく、そのような悪影響をうけないようにするためには、どの熱交換

器にどの程度の安全率を見込むのが、システム全体としてより合理的であるのかを解決しなければならない。

この問題は (II-3) にのべた方法により容易に解決できる。

即ち (II-158)(II-160) 式の 変分方程式は 次のようにえられ

$$\delta M_n = \frac{\partial f_n}{\partial T_n} \delta T_n + \frac{\partial f_n}{\partial R_n} \delta R_n + \frac{\partial f_n}{\partial S_n} \delta S_n + \frac{\partial f_n}{\partial P_n} \delta P_n \quad (\text{II-200})$$

$$\delta R_n = \sum_{j=2}^N [C_{nj}] \delta S_j \quad (\text{II-201})$$

II-201) 式を (II-200) 式に 代入することによって

$$\delta M_n = \frac{\partial f_n}{\partial T_n} \delta T_n + \frac{\partial f_n}{\partial R_n} \sum_{j=1}^N [C_{nj}] \delta S_j + \frac{\partial f_n}{\partial S_n} \delta S_n + \frac{\partial f_n}{\partial P_n} \delta P_n \quad (\text{II-202})$$

ここで 次の関係をみたす adjoint variable  $\pi_n$  を導入すると

$$\pi_n' \frac{\partial f_n}{\partial T_n} = 0 \quad n=1, 2, \dots, N \quad (\text{II-203})$$

$$\pi_n' \frac{\partial f_n}{\partial S_n} + \sum_{j=1}^N \pi_j' \frac{\partial f_j}{\partial R_j} [C_{jn}] = 0 \quad n \neq k \quad (\text{II-204})$$

$$\pi_k' \frac{\partial f_k}{\partial S_k} + \sum_{j=1}^N \pi_j' \frac{\partial f_j}{\partial R_j} [C_{jk}] = (0, \dots, 0, \overset{k}{1}, 0, \dots, 0) \quad (\text{II-205})$$

ここで 偏微係数  $\frac{\partial f_n}{\partial T_n}$   $\frac{\partial f_n}{\partial S_n}$  及び  $\frac{\partial f_n}{\partial R_n}$  は全て  $T_{n0}$  をのぞいて  $T_n$ ,  $S_n$ ,  $R_n$  の 全ての要素の optimal point で評価されている。 adjoint variable  $\pi_n$  を用いることによって 今希望値に固定しておきたい低温側流体の出口温度の変動量  $\delta S_n$  と パラメータの変動量  $\delta P_n$  及び伝熱面積の余裕量  $\delta M_n$  との間 は 次のように関係づけられることがわかる。

$$\delta S_{k1} = \sum_{n=1}^N \pi_n' \delta M_n - \sum_{n=1}^N \pi_n' \frac{\partial f_n}{\partial P_n} \delta P_n \quad (\text{II-206})$$

従って パラメータ変動があるとき 低温側流体出口温度を希望値からできるだけ変動させないように 各熱交換器の伝熱面積に余裕をみつゑるとき 全体のシステムとして最も合理的にみつゑる問題は 次のように定式化できる。

$$|\delta S_{k1}| \leq a_{k1} \quad (\text{II-207})$$

$$\delta M_n \geq 0 \quad (\text{II-208})$$

の条件の下で  $\sum_{n=1}^N \omega_n \delta M_n \rightarrow \text{Min}$  (II-209)

とする  $\delta M_n$  を求めよ。

ここに  $a_{R1}$  は  $S_{R1}$  の変動の許容値である。

この問題はパラメーターの変動域が既知であるとする と 容易に線型計画の問題として解くことができる。

### 数値計算例

最適設計の問題と同一の configuration 及びパラメーター値をもつシステムについて考える。(Fig II-16) このシステムでは(II-199)式に対応するシステム方程式は次のようにえられる。

$$\delta_{nm} = A_{nm} U_{nm} G_{nm} \frac{(T_{nm-1} - S_{nm}) - (T_{nm} - R_{nm})}{\ln \left\{ \frac{(T_{nm-1} - S_{nm})}{(T_{nm} - R_{nm})} \right\}} \quad (\text{II-210})$$

従って システムの出力  $S_{21}, S_{31}, S_{41}$  の変動量、パラメーター  $U_{nm}, G_{nm}$  の変化量 及び各熱交換器の伝熱面積の余裕量  $\delta A_{nm}$  との間には (II-200) 式から次のような関係があることがわかる。

$$\delta S_{i1} = \sum_{n,m} \mu_{nm}^i A \left( \frac{\delta A_{nm}}{A_{nm}} \right) - \sum_{n,m} \mu_{nm}^i A_{nm} \frac{\delta(U_{nm} G_{nm})}{U_{nm} G_{nm}} \quad i=2,3,4 \quad (\text{II-211})$$

ここに  $\mu_{nm}^i$  は 方程式 (II-188)(II-189) 及び (II-193)-(II-198) の次の境界条件に対する解である。

$$\frac{\partial L}{\partial S_{j1}} = - \frac{\mu_{j1} E_{j1}}{(T_{j0} - S_{j1})} + \frac{\nu_{j1} (\omega C_p)_{j1}}{(T_{j0} - T_{j1})} = \begin{cases} 1 & j=i \\ 0 & j \neq i \end{cases} \quad (\text{II-212})$$

Fig II-23 は  $A_{nm}, U_{nm}, G_{nm}$  のパラメーター変化に対する感度係数  $\mu_{nm}^i A_{nm}$  の数値計算結果を示している。この図はパラメーター変動  $\delta(U_{nm} G_{nm})$  及び伝熱面積の余裕量  $\delta A_{nm}$  の両者がシステムの出口に与える影響の一つの指標を与えている。

例えばパラメーター  $U_{31}, G_{31}$  の値が 10% 減少すると 希望値に一定にしておきたいシステムの出カ  $S_{21}$  は  $0.038^\circ\text{F}$  上昇し  $S_{31}$  は  $4.06^\circ\text{F}$  低下し  $S_{41}$  は影響をうけないことがわかる。

また Fig II-23 によって システムの出カは、その出口に最も近い熱交換器中の

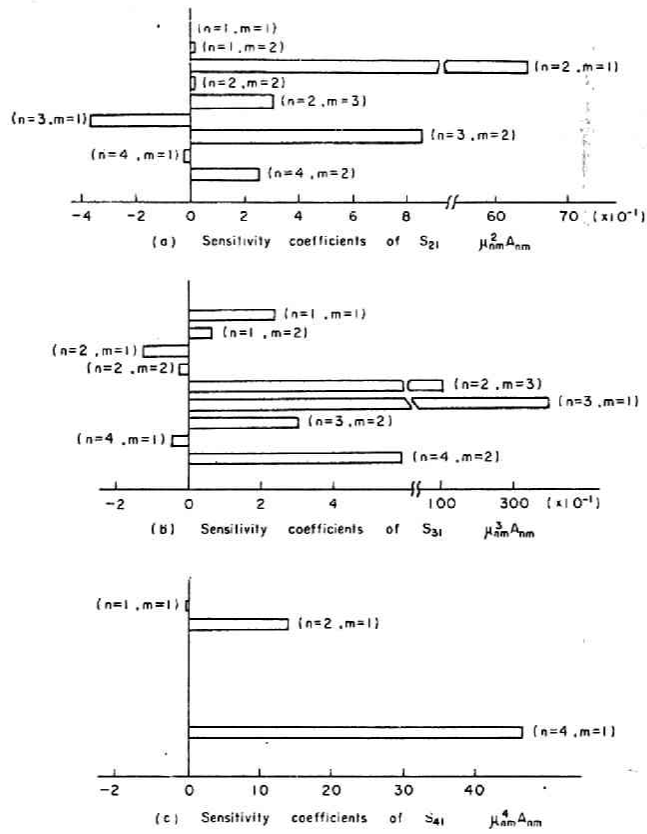


Fig. II-23 Sensitivity coefficients

パラメーター変動の影響を最も強くうけることがわかる。即ち  $S_{21}$ ,  $S_{31}$ ,  $S_{41}$  はそれぞれパラメーター  $U_{21}$ ,  $G_{21}$ ,  $U_{31}$ ,  $G_{31}$ ,  $U_{41}$ ,  $G_{41}$  の変動の影響を最も受けやすいことを示している。また  $A_{21}$ ,  $A_{31}$ ,  $A_{41}$  に対する伝熱面積の余裕量がそれぞれ  $S_{21}$ ,  $S_{31}$ ,  $S_{41}$  に対する悪影響を補うのに最も効果的に働いていることがわかる。また  $S_{21}$  の変動量は他のシステムの出カに比してかなり小さいが、これはその中に *feed back loop* がはいつていることによる。このシステムの中の *feed back loop* はシステムの出カがパラメーター変動によってうける影響をかなり小さくするのに大いに役立っていることを示している。次に、この感度係数を用いて、システムの出カのうける変動量を十分予想できるかどうかを知るために Fig. II-24 には、システムの出カ  $S_{21}$ ,  $S_{31}$ ,  $S_{41}$  の変動量を直接計算して求めたものと感度係数を用いて求めたものとを比較している。この図からも明らかなように、この熱交換器システムの設計においては感度係数を用いて十分パラメーター変動の影響を解析できることがわかる。またシステムの出カ  $S_{21}$ ,  $S_{31}$ ,  $S_{41}$  に次のような許容範囲が与えられるとしたとき

$$|\delta S_{i1}| \leq a_{i1} \quad (i=2, 3, 4) \quad (\text{II-213})$$

全システムで必要となる伝熱面積の余裕量を最少にする最も効果的な余裕量の見積もり方は前節の議論のように、線型計画の問題を解くことによつて容易にえられる。

計算に用いた  $a_{i1}$  の値とパラメーター変動の値とそのときの結果を Table II-2 に示してある。この計算結果から必ずしも全熱交換器に伝熱面積を見積もることが最適とはいえず、9ヶの熱交換器中 2つにのみ伝熱面積の余裕を見積もることによつて、システムパラメーター変動の悪影響を十分打ち消すことができることを示している。

もしシステムの出カの変動を許容範囲内におさえるために、各熱交換器に同じパーセントだけの余裕量を見込むことにすると、必要な量は Table II-3 に示すようになり、上にのべた合理的な見積もり方をする場合よりも約3倍の量を必要とすることがわかる。



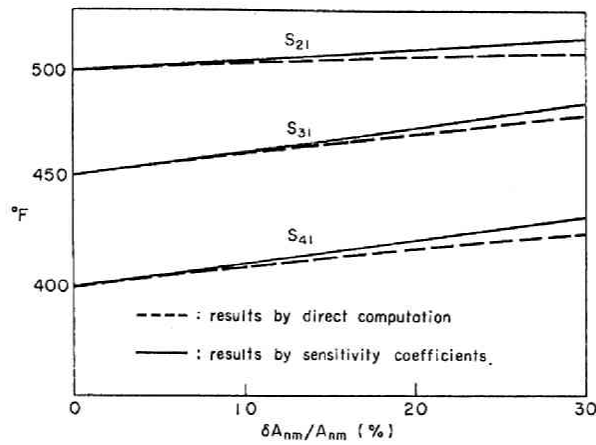


Fig. II-24 Perturbation of output temperatures by equal perturbation of  $A_{nm}$

$a_{i1} = 10.0 (°F)$

$nm$	Perturbation of $U_{nm}G_{nm}$	
	-30%	-50%
11	0.0%	0.0%
12	0.0	0.0
21	0.0	0.0
22	0.0	0.0
23	0.0	0.0
31	14.1	40.0
32	0.0	0.0
41	17.4	43.3
42	0.0	0.0
$\Sigma \delta A_{nm}$	3371.8 sq ft	9443.3 sq ft

Table II-2

Values of design margin for each heat exchanger area

$a_{i1} = 10.0 (°F)$

$nm$	Perturbation of $U_{nm}G_{nm}$	
	-30%	-50%
11		
12		
21		
22		
23	13.7%	33.7%
31		
32		
41		
42		
$\Sigma \delta A_{nm}$	11336.0 sq ft	27885.7 sq ft

Table II-3

### § 3-5 結 論

プロセスシステムを設計する際に必要となる情報には 不確かさが含まれてくるが、それにもかかわらず与えられた目的に最も適したシステムを設計することが工学設計者に課せられている。すなわち一つの目的を達するシステムとしてより無駄ない、より経済的なものが要求されているのである。この情報の不確かさがシステム設計に与える影響を定量的に把握する方法と考えられる感度解析という概念を積極的にシステムのシミュレーションに利用するにはどのようにすればよいかについて考察してきた。特にプロセスシステムの設計において種々の情報の不確かさの影響を吸収させるために従来から経験的に見積もられていた設計変数に対する余裕量 (Design margin) をより定量的に取扱う一つの方法として感度解析が利用できることを示した。

しかしプロセスシステムの安定性、あるいは操作のしやすさ (operability) というものを含めた設計には制御システムを含んで考えねばならないが、この点についてはまだ十分な研究が進んでいるとはいえない。感度という概念がこの点においても有力な武器となると思われるが今後の研究が一層望まれている分野である。

(II-3) 参考文献

- 1) Ray, W.H. and R. Aris;  
Rationale for optimal reactor design; I.E.C. Fundamentals,  
Vol. 5, No. 4, p478 (1966)
- 2) Aris, R.;  
Is sophistication really necessary ?; I.E.C., Vol. 58,  
No. 9, p32 (1966)
- 3) Wen, C.Y. and M. Chang;  
Optimal design of systems involving parameter uncertainty;  
I.E.C. Process Design & Development, Vol. 7, p49 (1968)
- 4) Rohrel, R.A. and M. Sobral, Jr.;  
Sensitivity considerations in optimal system design;  
I.E.E.E. Trans. on AC-10, No. 1, p43 (1965)
- 5) Takamatsu, T. and I. Hashimoto;  
Optimal design and operation of chemical process from the  
point of view of sensitivity analysis; 2nd I.F.A.C. Symp.  
on System Sensitivity and Adaptivity, Yugoslavia,  
paper C-40 (1968)
- 6) Takamatsu, T., I. Hashimoto and H. Ohno;  
Optimal design of a large complex system from the view-  
point of sensitivity analysis; I.E.C. Process Design and  
Development, Vol. 9, p368 (1970)
- 7) Kittrel, J.R. and C.C. Watson;  
Don't overdesign process equipment; C.E.P., Vol. 62,  
p79 (1966)
- 8) Rudd, D.F. and C.C. Watson;  
Strategy of Process Engineering; McGraw-Hill (1968)
- 9) Lasdon, L.S., et al.;  
A multi-level technique for optimization; Proc. of 6th

- J.A.C.C., p85 (1965)
- 10) Brosilow, C.B., et al.;  
A two level optimization technique for recycle processes;  
Proc. of A.I.Ch.E.-I.E.C. Joint Meeting, London, p67 (1965)
  - 11) Brosilow, C.B., et al.;  
Feasible optimization methods for interconnected systems;  
Proc. of J.A.C.C., p79 (1965)
  - 12) Pearson, J.D.;  
Duality and a decomposition technique; J. SIAM Control,  
Vol. 4, p164 (1966)
  - 13) Mesarovic, M.D., et al.;  
A multi-level structure for a class of linear dynamic  
optimization problem; Proc. of 6th J.A.C.C., p93 (1965)
  - 14) Pearson, J.D. and S. Reich;  
Decomposition of large optimal-control problems; I.E.E.,  
Vol. 114, p845 (1967)
  - 15) Brosilow, C.B. and E. Nunez;  
Multi-level optimization applied to a catalytic cracking  
plant; Canadian J. of C.E., Vol. 46, p205 (1968)
  - 16) Lasdon, L.S. and J.D. Schoeffler;  
Decentralized plant control; ISA J., Vol. 5, P175 (1966)
  - 17) Fletcher, R.C. and C.M. Reeves;  
Function minimization by conjugate gradients; British  
Comp. J., Vol. 7, p149 (1964)
  - 18) Denn, M.M. and R. Aris;  
Green's functions and optimal systems; I.E.C. Fundamentals,  
Vol. 4, No. 1, No. 2, No. 3 (1965)

### Ⅲ 分布定数系の定常最適化と感度解析

#### Ⅲ-1 常微分方程式系で表わされるプロセスシステムの最適化

##### § 1-1 緒論

分布定数系の定常最適化問題は、対象とするプロセスが常微分方程式で表現され、評価関数が汎関数で与えられる場合のいわゆる変分問題であり、これはまた集中定数系の動的最適化問題と数理上ではまったく同一の問題として取扱うことができる。そして集中定数系の動的最適化問題は制御工学の分野では、いわゆる最適制御問題として広く研究されている問題でもある。この種の問題に対する研究は 1950年代後半に Bellman<sup>1)</sup>によって開発された Dynamic Programming, 及び Pontryagin<sup>2)</sup>等による最大原理 (Maximum Principle) というような最適化手法の開発が大いに作用して、以後活発に研究されている。その後プロセスシステムに関係する分野にもこれらの手法が取り入れられ 1960年代以後、プロセスシステムの最適設計、制御の問題が広く研究されるようになって来た。

ここでは対象とするプロセスシステムが常微分方程式で表現され、評価関数が汎関数で表わされる場合の変分問題を取扱う数理的な手法として最も広く利用されている最大原理を、変分法から出発して導き、さらに数値計算上、広く使用されている最大傾斜法との関連について簡単にふれておく。

##### § 1-2. 最適化の数理的な手法

この問題は一般に次のように定式化できる。

〈プロセス方程式〉

$$\frac{dx}{dt} = f(x, u) \quad (Ⅲ-1)$$

〈初期条件〉

$$x(t_0) = a \quad (Ⅲ-2)$$

$$x(t_f) = b, \quad \text{あるいは } x(t_f) = \text{free}. \quad (Ⅲ-3)$$

ここに  $x = (x_1, \dots, x_n)^T$  は  $n$ 次元の状態変数ベクトル、 $u = (u_1, \dots, u_r)^T$  は  $r$ 次元の決定変数 (操作変数) ベクトル、 $a, b$  は  $n$ 次元定数ベクトルである。また  $f = (f_1, \dots, f_n)^T$  は、 $x, u$  に関して連続かつ十分な回数微分可能な関数と

しておく。このように表現されているプロセスにおいて 次の評価関数

$$J = \int_{t_0}^{t_f} f_0(x, u) dt \longrightarrow \text{Min. or Max.} \quad (\text{III-4})$$

を最小(あるいは最大)にし さらにプロセスを(III-2)式の状態から(III-3)式の状態に移す決定変数(操作変数)  $u$  を求める問題となる。(以下  $u$  を操作量と総称する) この問題は いわゆる変分問題であるが どのような方法で取扱われているかを次に示しておく。

### 変分法<sup>2.3.4</sup>

(III-1)~(III-4)で定式化される問題は 変分法を用いることによって次のように取扱うる。

すなわち Lagrange 乗数  $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)^T$  を導入すると(III-1)~(III-4)を満たす最適な操作量  $u$  は 次の汎関数を最適にする  $u$  として求められる。

$$\hat{J} = \int_{t_0}^{t_f} f_0(x, u) dt + \int_{t_0}^{t_f} \lambda^T \{f(x, u) - \dot{x}\} dt \quad (\text{III-5})$$

(III-5)式の第一変分は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \delta \hat{J} &= \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \frac{\partial f_0}{\partial x} \delta x + \frac{\partial f_0}{\partial u} \delta u + \lambda^T \left( \frac{\partial f}{\partial x} \delta x + \frac{\partial f}{\partial u} \delta u - \delta \dot{x} \right) \right\} dt \\ &= \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \left( \frac{\partial f_0}{\partial x} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial x} + \dot{\lambda}^T \right) \delta x + \left( \frac{\partial f_0}{\partial u} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial u} \right) \delta u \right\} dt \\ &\quad - \left[ \lambda^T \delta x \right]_{t_0}^{t_f} \end{aligned} \quad (\text{III-6})$$

従って (III-4)式の汎関数に極値を与えるための  $u$  の必要条件は次式で示される。

$$\dot{\lambda}^T = -\lambda^T \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial f_0}{\partial x} \quad (\text{III-7})$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial u} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial u} = 0 \quad (\text{III-8})$$

$$\dot{x} = f(x, u) \quad (\text{III-9})$$

(境界条件)  $x(t_f)$  が free の場合  $\lambda(t_f) = 0$  (III-10)

$x(t_f)$  が固定されている場合  $\lambda(t_f) = \text{free}$  (III-11)

(Ⅲ-7) ~ (Ⅲ-11) 式で与えられる必要条件を解く手順は

- (1)  $t_f - t_0$  の時間を  $N$  等分し、 $\Delta t = \frac{t_f - t_0}{N}$  の微小時間間隔に対しては各状態変数、操作量は一定と考える。
- (2) Lagrange 乗数  $\lambda_i(t)$  の時刻  $t = t_0$  における値を仮定する。
- (3) 次に (Ⅲ-8) 式を用いてその時点での決定変数(操作変数)を決定する。
- (4) (3) で決定した操作量  $u_i(t \Delta t)$  を用いて (Ⅲ-9), (Ⅲ-7) 式から  $x[(t+1)\Delta t]$  および  $\lambda[(t+1)\Delta t]$  を決定する。
- (5) (3) の step にもどり、順次  $x, \lambda, u$  を  $t = t_0$  から  $t = t_f$  まで  $\Delta t$  の時間間隔で解いて行く
- (6) 最後に  $\lambda(t_f)$  が (Ⅲ-10) 式 あるいは  $x(t_f)$  が (Ⅲ-3) 式に一致すれば (Ⅲ-1) ~ (Ⅲ-4) 式の最適化問題は解かれたわけである。  
しかし一般には (2) で仮定した  $\lambda(t_0)$  の値では  $\lambda(t_f) = 0$ 、あるいは  $x(t_f)$  が与えられた値に一致しないので満たされない場合には  $\lambda(t_0)$  の仮定をやりなおし (Ⅲ-3, Ⅲ-10) 式の条件が満たされるまで (2) ~ (6) の計算を繰り返し行なう必要がある。

このように Lagrange 乗数を用いる計算法は必ず2点境界値問題を解かねばならず、これが実用上の問題点となっている。

次にはこの2点境界値問題をうまく避ける一つの方法として開発された最大傾斜法に簡単にふれておく。

6.7.2

### 最大傾斜法

すでに述べたように (Ⅲ-1) ~ (Ⅲ-4) 式の最適化問題の解が満たす必要条件是、(Ⅲ-5) 式で表わされる汎関数  $J$  の変分がゼロになることであった。いま  $J$  の変分を考えると Fig. Ⅲ-1 に示されるように操作量  $u_i(t)$  が  $u_i^*(t)$  というある規準値から少し偏誤した

$$u_i(t) = u_i^*(t) + \delta u_i(t) \quad (\text{Ⅲ-12})$$

$\delta u_i(t) : \text{small}$

なる値をとったとすると  $J$  の値は  $u_i^*(t)$  のときに比べて、どの程度変動するかを考えてみよう。

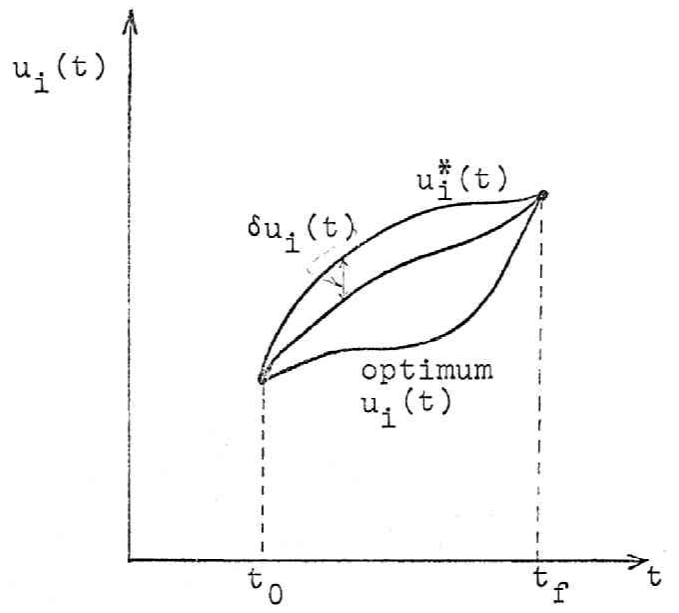


Fig. III-1



操作量が規準値  $u^*(t)$  をとるときの状態変数を  $x^*(t)$ , 操作量が  $u(t)$  のときの状態変数を  $x(t)$  で表わし

$$\delta x(t) = x(t) - x^*(t) \quad (\text{III-13})$$

$$\delta x(t_0) = 0 \quad (\text{III-14})$$

と表わすと  $J$  の変動量  $\delta J$  は一次近似として

$$\begin{aligned} \delta J &= J(x(t), u(t)) - J(x^*(t), u^*(t)) \\ &= \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \frac{\partial f_0^*}{\partial x} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial x} + \dot{\lambda}^T \right\} \delta x(t) dt \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \frac{\partial f_0^*}{\partial u} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial u} \right\} \delta u(t) dt \\ &\quad - \lambda^T(t_f) \delta x(t_f) \end{aligned} \quad (\text{III-15})$$

と表わされる。  $\frac{\partial f^*}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial f^*}{\partial u}$  は  $x(t) = x^*(t)$ ,  $u(t) = u^*(t)$  において評価されていることを示す。

$$\text{ここで} \quad \dot{\lambda}^T = -\lambda^T \frac{\partial f^*}{\partial x} - \frac{\partial f_0^*}{\partial x} \quad (\text{III-16})$$

$$\begin{aligned} \lambda(t_f) &= 0 \quad (x(t_f) : \text{free の場合}) \\ &= \text{free} \quad (x(t_f) : \text{fixed の場合}) \end{aligned} \quad (\text{III-17})$$

により  $\lambda(t)$  を定めることにすると (III-15) 式は次のようになる。

$$\delta J = \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \frac{\partial f_0^*}{\partial u} + \lambda^T \frac{\partial f}{\partial u} \right\} \delta u(t) dt \quad (\text{III-18})$$

となり 操作量  $u(t)$  が規準値  $u^*(t)$  から少し変動すると  $J$  の値がどのように変動するかを表わすことになる。問題は  $\delta u(t)$  を適当に与えることによって最適な操作量  $u(t)$  <sup>optimum</sup> により近づくような操作量  $u(t) = u^*(t) + \delta u(t)$  を求めること。言い換えれば 規準の操作量  $u^*(t)$  の改善量  $\delta u(t)$  を求めることなのである。

しかし (III-18) 式が成立するためには  $\delta u(t)$  は余り大きな値をとることはできないので

$$\int_{t_0}^{t_f} \delta u^T \cdot \delta u \, dt = c \quad (\text{III-19})$$

$c$ : small positive constant

なる条件を考慮しておかねばならない。

そうすると (III-19) 式の条件下で (III-18) 式に最も大きい影響を与える操作量の改普量  $\delta u(t)$  言いかえれば 最も早く最適操作量  $u(t)^{\text{optimum}}$  に近づくためには規準の操作量  $u(t)$  に どのような  $\delta u(t)$  を付け加えるのが最も合理的であるかを見い出せばよい。そのためには新しく Lagrange 乗数  $\mu$  を導入して

$$\begin{aligned} \Phi &= \delta J + \mu \left\{ c - \int_{t_0}^{t_f} \delta u^T \cdot \delta u \, dt \right\} \\ &= \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \frac{\partial f_0^*}{\partial u} + \lambda^T \frac{\partial f^*}{\partial u} \right\} \delta u(t) \, dt + \mu \left\{ c - \int_{t_0}^{t_f} \delta u^T \cdot \delta u \, dt \right\} \quad (\text{III-20}) \end{aligned}$$

$\Phi$  の  $\delta u(t)$  に対する勾配が最大になる  $\delta u(t)$  を求めればよい。

すなわち

$$\delta \Phi = \int_{t_0}^{t_f} \left\{ \left( \frac{\partial f_0^*}{\partial u} + \lambda^T \frac{\partial f^*}{\partial u} \right) - 2\mu \delta u \right\} \delta(\delta u) \, dt = 0 \quad (\text{III-21})$$

となる  $\delta u$  が求めるものである。すなわち

$$\delta u = \frac{1}{2\mu} \left\{ \frac{\partial f_0^*}{\partial u} + \lambda^T \frac{\partial f^*}{\partial u} \right\} \quad (\text{III-22})$$

となり 操作量を規準の値  $u^*(t)$  に (III-22) 式で与えられる値だけ加えたもの

$$u(t) = u^*(t) + \delta u(t) \quad (\text{III-23})$$

とすることによって より最適操作量  $u(t)^{\text{optimum}}$  に近づけることがわかる。そしてこの新しい  $u(t)$  を規準の操作量と考えて 順次  $u(t)$  を求めて行けば  $\delta J \approx 0$  とする最適操作量  $u(t)^{\text{optimum}}$  が得られることがわかる。

また (III-22) 式中の新しい Lagrange 乗数は (III-19) 式から

$$\mu = \pm \frac{1}{2} \left\{ \frac{\int_{t_0}^{t_f} \sum_{k=1}^r \left( \sum_{i=0}^n \lambda_i \frac{\partial f_i^*}{\partial u_k} \right)^2 dt}{c} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (\text{III-24})$$

と求まる。

したがってデジタル計算機を用いてこの方法で問題を解く場合には、次のような

手順を繰り返せば変分法によるときのような 2点境界値問題にはならず解を求めることができる。

- (1) 操作量  $u(t)$  に対して 規準の値  $u^*(t)$  を仮定する。
- (2) (1) の仮定した操作量  $u^*(t)$  を用いて (III-1), (III-2) 式を  $t_0$  から  $t_f$  に向かって解くことにより  $x(t)$ , ( $t_0 \leq t \leq t_f$ ) を求める。
- (3) 次に同じく仮定した規準の操作量  $u^*(t)$  と (2) で求めた  $x(t)$  を用いて (III-16)(III-17) 式を  $t_f$  から  $t_0$  の方向に解いて  $\lambda(t)$ , ( $t_0 \leq t \leq t_f$ ) を求める。
- (4) (III-24) 式から  $\mu$  を計算する。
- (5) (III-22) 式から 規準の操作量  $u^*(t)$  に加えるべき  $\delta u(t)$  を求める。
- (6)  $\delta J$  がゼロに十分近ければ そのときの操作量が求める最適操作量であるし、もし  $\delta J$  が小さくなれば

$$u(t) = u^*(t) + \delta u(t)$$

を新しい規準の操作量として (2) の step にもどり  $\delta J = 0$  に近づくまでこの計算手順を繰り返す。

## 最大原理<sup>9~14)</sup>

これまで簡単に説明してきた変分法や最大傾斜法は いずれも汎関数の極値を求める方法であった。しかしここで述べる最大原理は (III-1) ~ (III-4) 式で定式化される最適化問題において 操作量  $u(t)$  に上限 下限が与えられているとき すなわち

$$\alpha \leq u \leq \beta \quad (\text{III-25})$$

なるとき (III-4) 式に厳密な意味での最大 最小を与える最適操作量  $u(t)$  の満たすべき必要条件を与えるものであり、その証明も Pontryagin らによって完全になされている。ここでは数学的な厳密さはあまり問題にせず、変分法と関連させた形でごく簡単に最大原理について述べる。

まず評価関数を最小にする最適操作量ベクトル  $u(t)$  が求まっているとする。もし操作量がその最適値から  $\delta u(t)$  だけ変動したとすると 当然 (III-1) ~ (III-3) 式で表わされているプロセスは最適状態から偏異する。これによって評価関数かどのような影響を受けるかを明確にし、ついで最適操作量はどのような条件を満たすことが必要であるかを導いてみる。

いま最適操作量を  $\bar{u}(t)$ , そのときの状態変数を  $\bar{x}(t)$  と表わすことにする。  
時刻  $t = t_1$  において 状態量  $x(t_1)$  を次のように偏異させる。 すなわち

$$\begin{aligned} x(t_1) &= \bar{x}(t_1) + \delta x(t_1) & t_1 < t_1 < t_f \\ |\delta x(t_1)| &\leq \varepsilon \end{aligned} \quad (\text{III-26})$$

そして  $t_1 \leq t \leq t_f$  において 操作量を最適操作量  $\bar{u}(t)$  に保つと  $\delta u = 0$  であるから 状態変数  $x(t)$  に対しては 次式が成立する。

$$\dot{x}_i = f_i(x, u) = f_i(\bar{x}, \bar{u}) + \sum_{j=0}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \delta x_j + o(\varepsilon) \quad (\text{III-27})$$

$$\text{i.e. } \delta \dot{x}_i = \sum_{j=0}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \delta x_j + o(\varepsilon) \quad i = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (\text{III-28})$$

(従って(III-4)式の評価関係  $J$  は  $x_0(t_f)$  の値で表わされている)

ここで新しく次の関係式を満たす補助変数  $\psi = (\psi_0, \dots, \psi_n)$  を導入する。

$$\frac{d\psi_i}{dt} = - \sum_{j=0}^n \psi_j \frac{\partial f_j}{\partial x_i} = - \frac{\partial H}{\partial x_i} \quad (\text{III-29})$$

$$\psi_i(t_f) = -\delta_{i0} \quad i = 0, 1, 2, \dots, n \quad (\text{III-30})$$

ただし  $H$  は

$$H = \sum_{j=0}^n \psi_j f_j \quad (\text{III-31})$$

によって定義され ハミルト=アンと呼ばれる関数である。

この補助変数  $\psi_j$  を(III-28)式の両辺に乘じ  $i$  についてそれぞれ加え合わせると次式が得られる。

$$\sum_{i=0}^n \psi_i \frac{d\delta x_i}{dt} = \sum_{i=0}^n \psi_i \sum_{j=0}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \delta x_j + o(\varepsilon) \quad (\text{III-32})$$

さらに(III-32)式の両辺を  $t_1$  から  $t_f$  まで積分すると

$$\int_{t_1}^{t_f} \sum_{i=0}^n \psi_i \frac{d\delta x_i}{dt} dt = \int_{t_1}^{t_f} \sum_{i=0}^n \psi_i \sum_{j=0}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \delta x_j dt + o(\varepsilon) \quad (\text{III-33})$$

とえられる。ところが

$$\frac{d}{dt} \left( \sum_{i=0}^n \psi_i \delta x_i \right) = \sum_{i=0}^n \left( \frac{d\psi_i}{dt} \delta x_i + \psi_i \frac{d\delta x_i}{dt} \right) \quad (\text{III-34})$$

あるから (III-34) 式の両辺を  $t_1$  から  $t_f$  までそれぞれ積分すると

$$\left[ \sum_{i=0}^n \psi_i \delta x_i \right]_{t_1}^{t_f} = \int_{t_1}^{t_f} \sum_{i=0}^n \left( \frac{d\psi_i}{dt} \delta x_i + \psi_i \frac{d\delta x_i}{dt} \right) dt \quad (\text{III-35})$$

$$\therefore \int_{t_1}^{t_f} \sum_{i=0}^n \psi_i \frac{d\delta x_i}{dt} dt = \left[ \sum_{i=0}^n \psi_i \delta x_i \right]_{t_1}^{t_f} - \int_{t_1}^{t_f} \sum_{i=0}^n \frac{d\psi_i}{dt} \delta x_i dt \quad (\text{III-36})$$

したがって (III-33) 式は次のようになる。

$$\left[ \sum_{i=0}^n \psi_i \delta x_i \right]_{t_1}^{t_f} = \int_{t_1}^{t_f} \sum_{i=0}^n \left\{ \psi_i \sum_{j=0}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} + \frac{d\psi_i}{dt} \right\} \delta x_j dt + o(\varepsilon) \quad (\text{III-37})$$

ここで (III-29) 式の関係を用いれば 結局 (III-37) 式は 次のように表わせる。

$$\sum_{i=1}^n \psi_i(t_f) \delta x_i(t_f) = \sum_{i=1}^n \psi_i(t_1) \delta x_i(t_1) + o(\varepsilon) \quad (\text{III-38})$$

一方 時刻  $t_1 - \Delta$  よりも前では どんな変化も与えないとすると、次式が成立する。

$$x(t_1 - \Delta) = \bar{x}(t_1 - \Delta) \quad (\text{III-39})$$

$$\therefore \delta x(t_1 - \Delta) = 0 \quad (\text{III-40})$$

また  $t_1 - \Delta < t < t_1$  においては 操作量  $u(t)$  を次のように与えるとする

$$u(t) = \bar{u}(t) + \delta u \quad t_1 - \Delta < t < t_1 \quad (\text{III-41})$$

$|\delta u|$  : 有限値

状態変数  $x(t)$  は (III-1) 式を直接積分することによって 次のように求まる。

$$x_i(t) = \bar{x}_i(t_1 - \Delta) + \int_{t_1 - \Delta}^t f_i(x, \bar{u} + \delta u) dt \quad (\text{III-42})$$

$i = 0, 1, 2, \dots, n$

また 状態変数の最適値  $\bar{x}(t)$  は次式で与えられる。

$$\bar{x}_i(t) = \bar{x}_i(t_1 - \Delta) + \int_{t_1 - \Delta}^t f_i(\bar{x}, \bar{u}) dt \quad (\text{III-43})$$

したがって 状態変数の変動量  $\delta x_i(t)$  は

$$\delta x_i(t) = x_i(t) - \bar{x}_i(t) = \int_{t_1-\Delta}^t [f_i(x, \bar{u} + \delta u) - f_i(\bar{x}, \bar{u})] dt \quad (\text{III-44})$$

$t_1 - \Delta \leq t \leq t_1$

となり さらにその大きさは次のように評価できる。

$$|\delta x_i(t)| \leq \text{Max}_{t_1-\Delta \leq t \leq t_1} |f_i(x, \bar{u} + \delta u) - f_i(\bar{x}, \bar{u})| (t - t_1 + \Delta) \quad (\text{III-45})$$

$t_1 - \Delta \leq t \leq t_1$

さて次にこれらの関係を用いて 操作量  $u(t)$  の有限な変化  $\delta u$  によって評価関数がどのように変化するかを調べてみよう。

Taylor 展開を用いると

$$f_i(x, \bar{u} + \delta u) = f_i(x, \bar{u}) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \delta x_j \quad (\text{III-46})$$

なる関係が成立する。ここで偏微係数は  $x$  と  $\bar{x}$  の間で評価されている。

(III-45)式から  $\delta x$  は  $\Delta$  と same order であることがわかるから、 $\delta x$  の区間  $\Delta$  上の積分値は  $\Delta^2$  と same order となる。したがって(III-46)式の最後の項の積分値は  $\Delta$  よりも higher order となる。

すなわち

$$\int_{t_1-\Delta}^{t_1} \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \delta x_j dt = o(\Delta) \quad (\text{III-47})$$

従って(III-46)(III-47)式を用いると 時刻  $t = t_1$  における状態変数の変動量  $\delta x_i(t_1)$  は次のように評価できる。

$$\delta x_i(t_1) = \int_{t_1-\Delta}^{t_1} [f_i(\bar{x}, \bar{u} + \delta u) - f_i(\bar{x}, \bar{u})] dt + o(\Delta) \quad (\text{III-48})$$

さらに区間  $t_1 - \Delta < t < t_1$  に  $u$  の不連続点は存在しないとすると(III-48)式の被積分関数は連続となり 次式が成立する。

$$\delta x_i(t_1) = [f_i(\bar{x}, \bar{u} + \delta u) - f_i(\bar{x}, \bar{u})] \Delta + o(\Delta) \quad (\text{III-49})$$

従って(III-38)式に(III-49)式を適用すると 次の関係が成立することがわかる

$$\sum_{i=0}^n \psi_i(t_1) \delta x_i(t_1) = \sum_{i=0}^n \left[ \psi_i f_i(\bar{x}, \bar{u} + \delta u) - \psi_i f_i(\bar{x}, \bar{u}) \right] \Big|_{t=t_1} \Delta + o(\Delta) \quad (\text{III-50})$$

1-50)式において補助変数  $\psi_i(t)$  の境界条件 (III-30) 式を考慮すると

$$\delta x_0(t_f) = - \sum_{i=0}^n \left[ \psi_i f_i(\bar{x}, \bar{u} + \delta u) - \psi_i f_i(\bar{x}, \bar{u}) \right] \Big|_{t=t_1} \Delta + o(\Delta) \quad (\text{III-51})$$

この式は 操作量  $u$  の有限な変動が 評価関数  $x_0(t_f)$  にどのような変化を与えるかを示している。  $x_0(t_f)$  は 操作量が  $u = \bar{u}$  のとき 最小になっているのであるから 評価関数  $x_0(t_f)$  の変動は

$$\delta x_0(t_f) > 0 \quad (\text{III-52})$$

でなければならない。

したがって (III-51) 式より 次式が成立する。

$$\Delta \sum_{i=0}^n \psi_i f_i(\bar{x}, \bar{u} + \delta u) + o(\Delta) < \Delta \sum_{i=0}^n \psi_i f_i(\bar{x}, \bar{u}) \quad t=t_1 \quad (\text{III-53})$$

III-53) 式の両辺を  $\Delta$  で割り  $\Delta \rightarrow 0$  にすると

$$\sum_{i=0}^n \psi_i f_i(\bar{x}, \bar{u} + \delta u) < \sum_{i=0}^n \psi_i f_i(\bar{x}, \bar{u}) \quad (\text{III-54})$$

が成立する。ここに  $t_1$  は最適操作量  $\bar{u}(t)$  の任意の連続点である。

言い換えれば 最適操作量  $\bar{u}(t)$  は  $t_0 \leq t \leq t_f$  に対して Hamiltonian

$$H = \sum_{i=0}^n \psi_i f_i \rightarrow \text{Max} \quad (\text{III-55})$$

を最大にすることが必要であることを示している。

要約すると、

「(III-1) ~ (III-4) 式で 定式化される最適化(最小値)問題において (III-25) 式をみたら 最適操作量は、次の条件を満足することが必要である。ただし (III-1) 式において  $f_i (i=0, \dots, n)$  は  $x$  および  $z$  に関して連続であり、かつ  $x$  について連続微分可能であるとする。

$$H = \sum_{i=0}^n \psi_i f_i \quad (\text{III-56})$$

$$\dot{\psi}_i = - \frac{\partial H}{\partial x_i} \quad i=0, 1, 2, \dots, n \quad (\text{III-57})$$

なる補助変数を導入したとき  $u(t)$  および  $z(t)$  が最適であるためには その  $u(t)$ ,

$x(t)$ に対して 次のような条件を満たすゼロでない連続なベクトル関数  $\psi(t) = (\psi_0(t), \dots, \psi_n(t))$  が存在することが必要である.

- 1°  $t_0 \leq t \leq t_f$  なるすべての  $t$  に対して、ハミルト=アンHは  $u = u(t)$  のとき最大値をとる.
- 2° 時刻  $t_f$  においては
 
$$\psi(t_f) = (-1, 0, 0, \dots, 0)$$

また最大原理を用いて計算するときの手順は次のようになる.

- (1)  $\psi(t_0)$  の値を仮定する.
- (2) (Ⅲ-55) 式の条件 すなわち各時刻において 操作量の値を ハミルト=アンH を  $u$  について (Ⅲ-25) 式の制限条件下で最大にする という条件から求めながら (Ⅲ-1), (Ⅲ-2) 式 から  $x(t)$  を また (Ⅲ-29) 式 と (1) の仮定値から  $\psi(t)$  を  $t_0 \sim t_f$  に対して計算する.
- (3)  $t = t_f$  における  $\psi(t_f)$  の値が (Ⅲ-30) 式の条件を満たせば、そのときの  $u(t)$  が求める最適操作量であり  $x_0(t_f)$  が評価関数の最小値である. もし  $\psi(t_f)$  の値が (Ⅲ-30) 式に一致しない場合は  $\psi(t_0)$  の値を仮定しなおして、step(2)にもどる.

また もう一つの方法は 時間について逆の方向に解く方法である.

- (1)  $x(t_f)$  の値を仮定する.
- (2) (Ⅲ-1) 式 および (Ⅲ-29) 式を (1) の仮定値および (Ⅲ-2) 式とそれぞれ初期値とし、操作量  $u(t)$  を ハミルト=アンH を  $u$  について最大にするという条件から決定しながら、時刻  $t_f$  から  $t_0$  の方向に解いていく.
- (3)  $t = t_0$  において  $x(t_0)$  が与えられた初期値 (Ⅲ-2) 式に一致すれば、そのときの  $u(t)$  が求める最適値である. もし一致しない場合は  $x(t_f)$  の値を仮定しなおして step(2)にもどる. しかし  $x(t_0)$  が与えられた初期値に一致しない場合でも そのときの解は 初期値が計算から出てきた値に与えられている場合の最適解であることには 変わりはない.

しかし 最大原理を用いる際には 必ず2点境界値問題を解かねばならないことが欠点となっている.



### 1-3 結論

ここでは対象とするプロセスが常微分方程式系で表現され、評価関数が汎関数で表わされる場合の最適化問題の解法として、広く利用されている基本的な手法である変分法、最大傾斜法、最大原理について簡単に述べ、それらの関連を明らかにした。ここでは以下の議論に必要な最小限度の理論を示すのみであるが、現行、多くの応用数学者によって最適化手法が改良発展せられている。しかし実際の衛生工学的あるいは化学工学的なプロセスのどのような最適化問題もこの方法で取扱えばうまく解決できる、というような手法はなく、各々のプロセスの最適化問題において工夫しなければならず新しい手法そのものの出現が期待されている。

(Ⅲ-1) 参考文献

- 1) Bellman, R.;  
Dynamic Programming; Princeton Univ. Press (1957)
- 2) Elsgolc, L.E.;  
Calculus of Variations; Pergamon Press (1962)
- 3) Gelfand, I.M. and S.V. Fomin;  
Calculus of Variations; Prentice-Hall Inc. (1963)
- 4) Bliss, G.A.;  
Lectures on the Calculus of Variations; Univ. of Chicago Press. (1946)
- 5) Hestenes, M.R.;  
Calculus of Variations and Optimal Control Theory;  
John Wiley & Sons Inc. (1966)
- 6) Kelley, H.J.;  
Optimization Techniques with Applications to Aero-Space Systems; G. Leitman ed. Academic Press (1962)
- 7) Bryson, A.E. and W.F. Denham;  
A steepest ascent method for solving optimum programming problems; J. Appl. Mech. Vol. 29 p. 247 (1962)
- 8) 佐山隼敏  
最大傾斜法による化学プロセスの最適化に関する研究 京都大学  
学位論文 (1967)
- 9) Pontryagin, L.S., V.G. Boltyanskii, R.V. Gamkrelidze and E.F. Mishchenko;  
The Mathematical Theory of Optimal Processes;  
Interscience Publishing (1962)
- 10) Fan, L.T.;  
The Continuous Maximum Principle; John Wiley & Sons (1966)

- 11) Lapidus, L. and R. Luus;  
Optimal Control of Engineering Processes;  
Blaisdell Publishing Co. (1967)
- 12) Lee, E. B. and L. Markus;  
Foundation of Optimal Control Theory;  
John Wiley & Sons (1967)
- 13) Athans, M. and P. L. Falb;  
Optimal Control; McGraw Hill (1966)
- 14) Denn, M. M.;  
Optimization by Variational Methods;  
McGraw Hill (1969)

## Ⅲ-2 常微分方程式系で表わされるプロセスシステムの感度解析

### § 2-1 緒論

常微分方程式系が、プロセスシステムの挙動を表わすモデル表示として用いられるのは、集中定数系の動的挙動あるいは分布定数系の定常状態を表わすときであるが、一般に常微分方程式系に対する感度解析というのは、制御工学の分野では制御系に Feed back の概念が導入されると同時に起っていると見える。しかしこの分野でも制御系の良し悪しを評価する基準が過去のステップあるいはランプ入力に対する出力の形状によって決定するというやり方から、新しく与えられた評価関数の値の大小によって判定する基準に変わってきた。すなわち最適制御理論の導入である。これにともなって制御系のパラメータ変動が、評価関数あるいは系に課せられた拘束条件にどのような影響を及ぼすかを解析する、いわゆる最適問題との関連における感度解析が、1950年代後半の最適制御理論の発展と相俟って、1960年代以後急速に研究されてきた。

プロセスシステムの最適設計、操作制御においては、特にその数式モデルと実際の系との差異が大きく種々の不確定な要素が含まれてくることが広く認識されているにもかかわらず、その不確定さが、プロセスシステムの最適設計、操作制御にどのような影響を与えているのか、またそれを克服するにはどのようにしなければならないのか、という感度解析的な考察は、ごく最近になってようやく注目されてきたにすぎない。ここでは常微分方程式系の感度解析の数学的な基礎になっているいくつかの概念について述べ、次に最適化問題との関連における感度解析について述べる。さらにプロセスシステムの具体的な例として、いくつかの化学反応プロセスをとり上げ、それらの最適設計、操作の問題と、その際に付随して考えなければならない感度解析的な問題を検討する。

## § 2-2 システムパラメーター変動の分類と感度方程式

常微分方程式で表現されるシステムについて §2-1 で述べたような種々の感度解析に関連する問題を考察していく際の基礎になるのは、システムパラメーターの変動によって、そのシステムの状態変数がいかなる変動をうけるか(いわゆる構造安定)を知ることにある。

例えば 逆混合を考えた管式反応器内でのプロセス方程式は

$$E \frac{d^2x}{dl^2} - v \frac{dx}{dl} - r(x, T, \theta) = 0 \quad (\text{III-58})$$

$E$ : 逆混合係数

$v$ : 流速

$r$ : 反応速度

$l$ : 反応器内の任意の位置

$x$ : 濃度

$\theta$ : 反応速度に関係するパラメーター

で表わされる。このプロセスの状態変数である濃度  $x$  が、例えば反応速度パラメーター  $\theta$  の変化によってどのように変動するかを知る際に、いちいち(III-58)式を解きなおすのではなく、パラメーター変化に対して状態変数のうける変動の程度を表わす一つの指標を入れて考えていこうとするわけである。その一つの指標として Tomović<sup>1)</sup> が次のような感度係数を定義している。

今、考えているプロセスシステムの方程式がパラメーターの規準値  $\theta_0$  に対して

$$F(\ddot{x}, \dot{x}, x, t, \theta_0) = 0 \quad (\text{III-59})$$

と表わされているとする。ここに  $x$  はシステムの状態変数であり、 $\theta_0$  はスカラーのパラメーターである。このパラメーターが変化すれば  $x$  の値も変化するので、(III-59)式の解を  $x(t, \theta_0)$  と表わすことにする。(III-59)式で表わされるシステムのパラメーター  $\theta_0$  に何らかの原因で  $\Delta\theta$  の変化が起ったとするとそのときの解は、

$$F(\ddot{x}, \dot{x}, x, t, \theta_0 + \Delta\theta) = 0 \quad (\text{III-60})$$

を解きなおすことによつてえられるが、この2つの式の解  $x(t, \theta_0 + \Delta\theta)$ ,  $x(t, \theta_0)$  の差の  $\Delta\theta$  に対する比

$$\Delta u = \frac{x(t, \theta_0 + \Delta\theta) - x(t, \theta_0)}{\Delta\theta} \quad (\text{III-61})$$

はパラメーターが変化したときにうける影響の程度(即ち感度)を表わす一つの指標と考えられる。

ここでさらに  $\Delta q \rightarrow 0$  とすると

$$\lim_{\Delta q \rightarrow 0} \frac{x(t, q_0 + \Delta q) - x(t, q_0)}{\Delta q} = \frac{\partial x(t, q_0)}{\partial q_0} = u(t, q_0) \quad (\text{III-62})$$

となる。この  $u(t, q_0)$  を常微分方程式で表わされるシステムの感度係数と呼んでいる。(III-62)式で定義される感度係数のみたす方程式は(III-59)式からわかるように

$$\frac{\partial F}{\partial \ddot{x}} \frac{\partial \ddot{x}}{\partial q_0} + \frac{\partial F}{\partial \dot{x}} \frac{\partial \dot{x}}{\partial q_0} + \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial q_0} + \frac{\partial F}{\partial q_0} = 0 \quad (\text{III-63})$$

となる。さらに

$$\frac{\partial \dot{x}}{\partial q_0} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial q_0} = \dot{u} \quad (\text{III-64})$$

$$\frac{\partial \ddot{x}}{\partial q_0} = \frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{\partial x}{\partial q_0} = \ddot{u} \quad (\text{III-65})$$

なる関係を用いることによって (III-63)式は

$$\frac{\partial F}{\partial \ddot{x}} \ddot{u} + \frac{\partial F}{\partial \dot{x}} \dot{u} + \frac{\partial F}{\partial x} u = - \frac{\partial F}{\partial q_0} \quad (\text{III-66})$$

となる。この(III-66)式を感度方程式と呼んでいるのである。

またこの方程式の初期条件はもとのシステム方程式(III-59)式の初期条件がパラメータ変動の影響を受けないとすると

$$u(0) = 0 \quad (\text{III-67})$$

$$\dot{u}(0) = 0 \quad (\text{III-68})$$

とえられる。

常微分方程式系で表わされるシステムの感度解析に関する研究は上述したような感度係数、感度方程式を基礎にしているのであるが、パラメータ変動といっても大別すると次のような3種類に分類される。<sup>2)</sup>

i)  $\alpha$ -変動 : システムモデルの order を変えないようなパラメータ変動

ii)  $\beta$ -変動 : システムモデルの初期条件の変動

iii)  $\lambda$ -変動 : システムモデルの order を変えるようなパラメータ変動

以下ではそれぞれのパラメータ変動に対応する感度係数、及びそれらがみたす感度方程式を一般的な  $n$ 元連立常微分方程式系で表わされるシステムにつ

いて拡張しておこう。

i)  $\alpha$ -変動に対する感度方程式

上述した議論をより一般的な  $n$  元連立常微分方程式系で表わされるシステムについて考察してみよう。今対象としているシステムがあるパラメータの規準値に対して次のような常微分方程式で表わされているとする。

$$\dot{x} = f(x, t, \varphi) \tag{III-69}$$

$$\text{or} \quad \dot{x}_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n; t; \varphi_1, \dots, \varphi_m) \quad i=1, 2, \dots, n$$

ここに  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)'$  は  $n$  次元の状態量ベクトルであり  $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m)'$  は  $m$  次元のシステムパラメータベクトルである。またこのシステムの初期条件は

$$x(0) = \beta \tag{III-70}$$

$$\text{or} \quad x_i(0) = \beta_i \quad i=1, 2, \dots, n$$

で与えられているとする。このときこのシステムパラメータが  $\Delta\varphi$  だけ微小変動したときシステムの状態量  $x$  がどのように変化するかを考えよう。すなわちシステムパラメータに微小変動があれば、そのときのシステムの状態量  $\tilde{x}$  は次の式で表わされることになる。

$$\dot{\tilde{x}} = f(\tilde{x}; t; \varphi + \Delta\varphi) \tag{III-71}$$

$$\text{or} \quad \dot{\tilde{x}}_i = f_i(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n; t; \varphi_1 + \Delta\varphi_1, \dots, \varphi_m + \Delta\varphi_m)$$

従ってシステムパラメータ  $\varphi$  が  $\Delta\varphi$  だけ変動したときに生じるシステムの状態量  $x$  の変動量  $\Delta x = (\Delta x_1, \dots, \Delta x_n)'$  は次式で定義され、

$$\Delta x = \tilde{x}(t) - x(t) \tag{III-72}$$

$$\text{or} \quad \Delta x_i = \tilde{x}_i(t) - x_i(t) \quad i=1, 2, \dots, n.$$

この変動量  $\Delta x$  は  $\Delta\varphi$  について Taylor 展開することによって

$$\Delta x(t, \Delta\varphi) = \frac{\partial x}{\partial \varphi} \Delta\varphi + \frac{1}{2} \Delta\varphi' \frac{\partial^2 x}{\partial \varphi^2} \Delta\varphi + \dots \tag{III-73}$$

ただし

$$\frac{\partial x}{\partial \varphi} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \varphi_1} & \frac{\partial x_1}{\partial \varphi_2} & \dots & \frac{\partial x_1}{\partial \varphi_m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial x_n}{\partial \theta_1} & \frac{\partial x_n}{\partial \theta_2} & \dots & \frac{\partial x_n}{\partial \theta_m} \\ \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

で与えられ、 $\Delta \theta$  が十分小さいとすれば変動量  $\Delta x$  は上式の第1項までで十分近似できる。このとき第  $i$  番目の状態変数  $x_i$  の第  $j$  番目のパラメータ  $\theta_j$  に対する感度係数  $y_{ij}$  は次式で定義され

$$y_{ij} = \left. \frac{\partial x_i}{\partial \theta_j} \right|_{\Delta \theta = 0} \quad \begin{matrix} i = 1, 2, \dots, n \\ j = 1, 2, \dots, m \end{matrix} \quad (\text{III-74})$$

この感度係数のみたす方程式 すなわち  $\alpha$ -感度方程式およびこの方程式に対する初期条件は次式で与えられる。

$$\dot{y}_{ij} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_k} y_{kj} + \frac{\partial f_i}{\partial \theta_j} \quad (\text{III-75})$$

$$y_{ij}(0) = 0 \quad \begin{matrix} i = 1, 2, \dots, n \\ j = 1, 2, \dots, m \end{matrix} \quad (\text{III-76})$$

すなわち  $\alpha$ -感度方程式は  $\frac{\partial f_i}{\partial x_k}$  を係数にもつ線型非斉次方程式系となる。

## ii) $\beta$ -変動に対する感度方程式

次に初期値の変動によるシステム方程式の解の影響について考えてみよう。対象とするシステムが(III-69)で表わされ、そのシステムに対する初期条件が(III-70)式で与えられているとき、この初期値が与えられた値  $\beta$  から少し変動したとき(III-69)式の解がどの程度変化するかは  $\alpha$ -変動に対する場合と同様の考察から次のように第1近似として与えられる。すなわち  $\beta$ -感度係数

$$z_{ij}(t) = \left. \frac{\partial x_i(t)}{\partial \beta_j} \right|_{\Delta \beta = 0} \quad \begin{matrix} i = 1, 2, \dots, n \\ j = 1, 2, \dots, n \end{matrix} \quad (\text{III-77})$$

と定義すると この  $\beta$ -感度係数のみたす  $\beta$  感度方程式およびこの方程式に対する初期条件は次式で与えられる。



$$z_{ij} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_k} z_{kj} \quad (\text{III-78})$$

$$z_{ij}(0) = \delta_{ij} \quad \begin{array}{l} i=1, 2, \dots, n \\ j=1, 2, \dots, n \end{array} \quad (\text{III-79})$$

(III-75, 76)式と(III-78, 79)式とを比較すれば明らかなように、 $\alpha$ -感度方程式と $\beta$ -感度方程式は初期条件は異なるが、その方程式の斉次系は一致している。またこの感度方程式の一般的な性質について簡単にふれておこう。

(III-72)式からわかるように、システムパラメータの微小変動による状態変数の変動量  $\Delta x$  は感度係数を用いなくても(III-69, 71)式を直接積分し、その差をとることによっても求められる。しかし、それぞれでは  $\Delta q$  が小さければ  $\Delta x$  も小さくなることから、積分過程における計算誤差の影響を直接うけることなどのために、信頼性が乏しい。しかし感度係数は、(III-75, 78)式から求めるのであり、この微分方程式の係数は全て  $\Delta q = 0$  で評価されることから、 $\Delta q$  がいくら小さくても(III-69)式を計算するのと同じ精度で求められる。そして  $\Delta x$  はこの感度係数とパラメータの変動量との積の形で求めることができるのである。しかもこの感度方程式はもとのシステム方程式が非線型であっても常に線型の方程式となっている。

### iii) $\lambda$ -変動に対する感度方程式<sup>10)</sup>

システム方程式の order を変化させるようなパラメータ変動による状態変数の変動の程度を知ることはモデルアイデンティフィケーションにおける何階の微分方程式のモデルを作成するかというモデルの order の近似の問題を解決するためにも大切である。

しかしこの問題は Tomovic<sup>3)</sup>、Chang<sup>2)</sup>、Kokotovic<sup>4)</sup> 等によってもその研究の必要性が強調されているが、まだ十分な研究がみられない。しかし振動理論の立場から Andronov, Vitt and Khaikin<sup>5)</sup> が  $\lambda$ -変動についての研究を行なっている。また Tikhonov<sup>6)</sup>、Vasileva<sup>7)</sup>、Nagumo<sup>8)</sup>、Pontryagin<sup>9)</sup> 等の数学者も、微分方程式の理論的研究の一環として  $\lambda$ -変動に関係する研究を行なっている。

しかし、いずれにしてもそれらの成果が工学系に十分応用されているとはいえない。

特にプロセスシステム分野においては、モデルアイデンティフィケーションの問題と深い関連

があり、非常に重要であるにもかかわらず、ほとんど研究が進んでいないのが現状である。ここではその研究成果のいくつかを整理しておく。

最もよく研究されているのは、次のようなシステムについてである。

$$\begin{cases} \dot{\tilde{x}}_i = f_i(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_n, \tilde{x}_{n+1}; u; t) & (III-80)-1 \\ \lambda \dot{\tilde{x}}_{n+1} = g(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_n, \tilde{x}_{n+1}; u; t) & i=1, 2, \dots, n \quad (III-80)-2 \end{cases}$$

$x_i$  : 状態変数  
 $u$  : スカラーの制御変数あるいは決定変数  
 $\lambda$  : 微小な正の定数パラメーター

ここで  $f_i (i=1, 2, \dots, n)$  及び  $g$  は それらの argument に関して 2階まで連続微分可能と仮定する。

(III-80)式において、 $\lambda=0$ とすると、次のように退化した系をうる。

$$\begin{cases} \dot{x}_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}, u, t) & (III-81)-1 \\ 0 = g(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}, u, t) & (III-81)-2 \end{cases}$$

この(III-81)を(III-80)の簡単化されたモデルシステムと呼ぶ。  
 このとき(III-80)の解と(III-81)の解の間には、どのような関係があるだろうか。  
 いいかえれば(III-80)の解  $\tilde{x}_i(t, \lambda)$  は  $\lambda$ を0に *tend*したとき(III-81)式の解  $x_i(t)$ に近づくだろうか。

この問題にふれるためには、Tikhonovによって導入された安定根とその安定領域の概念を必要とする。

いま(III-81)-2式が  $x_{n+1}$ について次のように解けたとする。

$$x_{n+1} = h(x_1, x_2, \dots, x_n; u; t) \quad (III-82)$$

これを(III-81)-2式の根 (root) と呼ぶ。ここで簡単化のために  $h$ は全ての argument に関して連続かつ有界な2階微係数をもつものとする。そして次のような条件がみたされるとき(III-82)式は(III-81)-2式の安定根と呼ぶ。

すなわち 閉領域 (closed domain)  $D(x_1, x_2, \dots, x_n, t)$  の部分集合  $D'$  の任意の点  $(x_1, \dots, x_n, t)$  に対して 点  $(x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, t)$  が

$$g(x_1, x_2, \dots, x_n, x_{n+1}; u(t), t) \{ x_{n+1} - h(x_1, x_2, \dots, x_n, u(t), t) \} < 0 \quad (III-83)$$

を満足する。そのような任意の点  $(x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, t)$  に対して

不等式

$$r = |x_{n+1} - h(x_1, x_2, \dots, x_n; u(t), t)| < \varepsilon \quad (\text{III-84})$$

が成立するような  $\varepsilon > 0$  が存在するとき、(III-82)式を(III-81)-2式の安定根と呼ぶのである。

そして時刻  $t'$  における  $x_i(t')$  を  $x_i'$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) と表わし、 $x_{n+1}(t)$  を次式の解とする。

$$\frac{d x_{n+1}}{d t} = g(x_1', x_2', \dots, x_n', x_{n+1}, u(t'), t') \quad (\text{III-85})$$

$$x_{n+1}(t) \Big|_{t=0} = x_{n+1}' \quad (\text{III-86})$$

もし  $t \rightarrow \infty$  のとき  $x_{n+1}(t)$  が  $h(x_1, \dots, x_n, u(t), t')$  に *tend* するならば  $(x_1', x_2', \dots, x_n', x_{n+1}', t')$  を  $t'$  を安定根の影響領域 (influence domain) と呼ぶ。これらの概念を用いることにより、Inoue 等は、次のような定理を Tikhov の定理の拡張としてえている。

(定理-1 連続性)

「(III-82)式で表わされる根  $x_{n+1}$  が安定根であり、その初期値 (III-70)式が安定根の影響領域内にあれば、次のようになる。

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \tilde{x}_i(t, \lambda) = x_i(t) \quad \begin{array}{l} i=1, 2, \dots, n \\ 0 \leq t \leq T \end{array} \quad (\text{III-87})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \tilde{x}_{n+1}(t, \lambda) = x_{n+1}(t) = h(x_1, \dots, x_n, u, t) \quad \begin{array}{l} 0 \leq t \leq T \end{array} \quad (\text{III-88})$$

(III-87)の右辺の関数  $x_i(t)$ , ( $i=1, 2, \dots, n$ ) は無論  $x_i(0) = \tilde{x}_i^0$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) を初期値とする(III-81)式の解である。

また  $f_n, x_{n+1}(t)$  は一般に  $t=0$  において不連続性をもつことは注意すべきである。従って、根  $x_{n+1}$  が安定根であり、初期値がその根の影響領域にあるときには、次の微分方程式系

$$\dot{x}_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n; h(x_1, \dots, x_n, u(t), t), u(t), t) \quad (\text{III-89})$$

$$x_i(0) = \tilde{x}_i^0 \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (\text{III-90})$$

の解を  $\lambda$  が十分小さいときに(III-80)式の解の近似解とみなせることがわかる。以下の理論では(III-80)式の根は安定であり、(III-81)式の初期値は安定根

の影響領域にあるものとする。

以上の仮定のもとでは 近似的に

$$\tilde{x}_i - x_i \cong \left. \frac{\partial \tilde{x}_i}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=0} \lambda \quad i=1, 2, \dots, n+1. \quad (\text{III-91})$$

とえられる。ここで  $\tilde{w}_i(t, \lambda)$  を次のように定義する。

$$\tilde{w}_i(t, \lambda) = \frac{\partial \tilde{x}_i(t, \lambda)}{\partial \lambda} \quad i=1, 2, \dots, n+1. \quad (\text{III-92})$$

(III-80) 式を  $\lambda$  について微分し (III-92) 式を用いると、次式がえられる。

$$\begin{cases} \dot{\tilde{w}}_i = \sum_{j=1}^{n+1} \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \tilde{w}_j & i=1, 2, \dots, n \end{cases} \quad (\text{III-93})-1$$

$$\begin{cases} \lambda \dot{\tilde{w}}_{n+1} = \sum_{j=1}^{n+1} \frac{\partial g}{\partial x_j} \tilde{w}_j - \dot{x}_{n+1} \end{cases} \quad (\text{III-93})-2$$

<初期条件>

$$\tilde{w}_i(0) = 0 \quad i=1, 2, \dots, n+1. \quad (\text{III-94})$$

さて次に  $\lambda \rightarrow 0$  にしたときの関数  $\tilde{w}_i(t, \lambda)$  ( $i=1, \dots, n+1$ ) の性質を調べねばならない。

(III-93) 式において  $\lambda=0$  とし その解を  $w_i(t)$  と表わすことにすると次式がえられる。

$$\begin{cases} \dot{w}_i = \sum_{j=1}^{n+1} \frac{\partial f_i}{\partial x_j} w_j & i=1, 2, \dots, n \end{cases} \quad (\text{III-95})-1$$

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{n+1} \frac{\partial g}{\partial x_j} w_j - \dot{x}_{n+1} = 0 \end{cases} \quad (\text{III-95})-2$$

さてここで  $\tilde{x}_i(t, \lambda)$  は  $\lambda \rightarrow 0$  のとき  $x_i(t)$  に tend することは 定理-1 から保障されているから (III-95) 式において (III-80) 式の代わりに (III-89) 式の解  $x_i(t)$  を用いる。(III-93) 式の解と (III-95) 式の解との間には次のような関係が成立することが Vosil'éva の定理から  $I_{x_{n+1}}$  等によって導かれている。

(定理-2 微分可能性)

(III-80) 式が前の全ての条件をみたすとすると、次のようになる。

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \tilde{w}_i(t, \lambda) = w_i(t) \quad i=1, 2, \dots, n \quad (\text{III-96})$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \tilde{w}_{n+1}(t, \lambda) = w_{n+1}(t) \quad 0 \leq t \leq T \quad (\text{III-97})$$

ここに  $T$  は有限値である。

(III-96) 式の右辺の関数  $w_i(t)$  ( $i=1, \dots, n$ ) は (II-94) 式の代りに次の初期値をもつ (III-95) 式の解である。

$$w_i(0) = \int_{\tilde{x}_{n+1}^0}^{h^0} \frac{f_i(\tilde{x}_1^0, \dots, \tilde{x}_n^0, x_{n+1}, u(0), 0) - f_i(\tilde{x}_1^0, \dots, \tilde{x}_n^0, h^0, u(0), 0)}{g(\tilde{x}_1^0, \dots, \tilde{x}_n^0, x_{n+1}, u(0), 0)} dx_{n+1} \quad (\text{III-98})$$

ここに  $h^0 = h(x_1^0, \dots, x_n^0, u(0), 0)$

また関数  $w_{n+1}(t)$  は (III-95)-2 式から代数的にとける。

この定理において  $w_i(0)$  に関する初期値が代ることに注意しなければならない。この定理によって、初期値 (III-98) 式を持つ (III-95) 式の解が次のようにみなせることが保障される。

$$w_i(t) = \tilde{w}_i(t, \lambda) \Big|_{\lambda \rightarrow 0} = \frac{\tilde{x}_i(t, \lambda) - x_i(t)}{\lambda} \quad 0 \leq t \leq T \quad (\text{III-99})$$

従って  $w_i(t)$  は (III-80) 式の解と (III-89) 式の解 (すなわち (III-90) をもつ (III-81) 式の解) との discrepancy の一つの指標となっている。そしてこの関数  $w_i(t)$  を  $\lambda$ -感度関数と呼んでいる。

(III-95) 式の意味を明確にするために 次のように変形しておこう。

(III-95)-2 式から関数  $w_{n+1}(t)$  は 次のようにえられる。

$$w_{n+1} = \left[ \dot{x}_{n+1} - \sum_{j=1}^n \frac{\partial g}{\partial x_j} w_j \right] / \left( \frac{\partial g}{\partial x_{n+1}} \right) \quad (\text{III-100})$$

ここに一般性をうしなわずに  $\partial g / \partial x_{n+1} \neq 0$  と仮定できる。

この (III-100) 式を (III-95)-1 式に代入することによって次式がえられる。

$$\dot{w}_i = \sum_{j=1}^n \left[ \frac{\partial f_i}{\partial x_j} - F_i \frac{\partial g}{\partial x_j} \right] w_j + F_i \dot{x}_{n+1} \quad (\text{III-101})$$

ここに簡単化のために

$$F_i(x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, u, t) = \frac{(\partial f_i / \partial x_{n+1})}{(\partial g / \partial x_{n+1})} \quad i=1, 2, \dots, n \quad (\text{III-102})$$

とおき (III-82, 87, 88, 102) 式を用いると (III-101) 式は次のようになる。

$$\left\{ \begin{aligned} \dot{w}_i &= \sum_{j=1}^n \left[ \frac{\partial f_i}{\partial x_j} - F_i \frac{\partial g}{\partial x_j} \right] w_j + F_i \left[ \sum_{j=1}^n \frac{\partial h}{\partial x_j} f_j + \frac{\partial h}{\partial u} \dot{u} + \frac{\partial h}{\partial t} \right] & (\text{III-103})-1 \\ w_{n+1} &= \frac{1}{(\partial g / \partial x_{n+1})} \left[ \sum_{j=1}^n \frac{\partial h}{\partial x_j} f_j + \frac{\partial h}{\partial u} \dot{u} + \frac{\partial h}{\partial t} - \sum_{j=1}^n \frac{\partial g}{\partial x_j} w_j \right] & (\text{III-103})-2 \end{aligned} \right.$$

$\lambda$ -感度方程式と呼ばれる(III-103)式を解くことにより、 $\lambda$ -感度関数  $w_i(t)$  がえられる。

### 2-3 最適化問題における感度解析

前節ではプロセスシステムのパラメータ変動が状態変数あるいは出力変数に及ぼす直接の影響を表わす一つの指標としての感度係数及びそれのみたす感度方程式について述べてきた。しかしプロセスシステムの最適化問題では、プロセスシステムのパラメータや操作量の変動が評価関数の値に及ぼす影響を知ることが大切な問題となってくる。というのは、パラメータや操作量の変動によって状態変数が変化しても最終的にそのプロセスシステムの良否を判定している評価関数の値がそれほど変らなければその変動をそれほど重要視する必要はなくなるであろう。またそのときには、パラメータ値は不変として取り扱ってよくその操作量を最適値に高い精度で維持するということを考える必要はないであろう。しかしパラメータや操作量の変動が評価関数の値に大きい影響を与えるならばパラメータ変動につれて操作量を適当に変化させておくことを考えねばならない。ここでは最適化問題と関連した感度解析について述べ、前節の感度係数との関係についても述べよう。対象とするプロセスシステムの挙動が常微分方程式系で表わされるとき最適化問題は一般に次のように定式化される。

〈プロセス方程式〉

$$\dot{x} = f(x, t, u, \theta) \quad (\text{III-104})$$

〈初期条件〉

$$x(0) = x_0 \quad (\text{III-105})$$

$x$ :  $n$ 次元状態ベクトル

$u$ :  $r$ 次元操作量ベクトル

$\theta$ :  $(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)$   $m$ 個のプラントあるいはプロセスのパラメータ

このようにプロセスシステムの挙動が表わされており、評価関数が一般に状態変数、操作量の汎関数として次のように表わされているとき

$$J = \int_0^T P(x, u, t) dt \rightarrow \text{最小(最大)} \quad (\text{III-106})$$

プロセスシステムの最適化問題は(III-106)式を最小あるいは最大にするように操作量すなわち操作変数や設計変数の値を決定することである。この問題の解すなわち最適操作量 $u^*$ はプロセスシステムのパラメータの値が与えられれば、種々の数理的的手法によってパラメータの関数として次のように状態変数を含ん

だ形 (Closed Loop configuration)

$$u^*(t) = u_c(x, t, q) \quad (\text{III-107})$$

あるいは状態変数を含まない形 (Open Loop configuration)

$$u^*(t) = u_o(t, q) \quad (\text{III-108})$$

のいずれかの形で決定される。

しかしこの(III-107/108)式で表わされる最適操作量を決定するときに パラメーター値として 決されていた値が  $q = q_0$  であっても、種々の原因で実際のプロセスシステムのパラメーター値が  $q_0$  と異なった  $q$  なる値になっていたり 正しいパラメーター値  $q_0$  といわれているものが誤差を含んだ不正確なものであったりして、パラメーター値が操作量を決定するときに用いた値とは異なった値になっていることはしばしばある。

このように (III-107, 108) 式の最適操作量を決定するときのパラメーター値  $q_0$  と、実際のプロセスシステムの挙動を決定している (III-104) 式に含まれているパラメーター値  $q$  とが異なっているとき、このプロセスシステムの操作の良否を決定している評価関数 (III-106) 式の値に、どのような影響がでてくるのであろうか。<sup>(11)(12)</sup>これについて考えてみよう。

### プロセスシステムのパラメーター変動に対する評価関数感度

実際のプロセスシステムに含まれているパラメーターの値が  $q$  であるときにその値を  $q_0$  であると誤って同定して この値を基にして最適操作量 (III-107, 108) 式を求めたとする。この操作量を実際のプロセスに適用したとすると、その挙動は次式で表わされる。

$$\dot{x} = f(x, u_c(x(t), t, q_0), t, q) = f_c(x, t, q_0; q) \quad (\text{III-109})$$

また評価関数の値を  $J_c(q_0, q)$  と書くことにすると、プロセスシステムのパラメーターに変動がなかったとき すなわち  $q = q_0$  であったときの評価関数の値  $J(q_0, q_0)$  からの偏差は

$$\Delta J = J_c(q_0; q) - J(q_0; q_0) \quad (\text{III-110})$$

で与えられる。従って  $J_c(q_0, q)$  を  $q = q_0$  の周りで Taylor 展開し、パラメーターの変動量  $\Delta q = q - q_0$  の第一項のみで近似すると (III-110) 式の評価関数の変動量  $\Delta J$  は次式で表わされる。



$$\Delta J = \sum_{i=1}^n \frac{\partial J_c(\bar{z}_0, \bar{z})}{\partial \bar{z}_i} \Big|_{\bar{z}=\bar{z}_0} \Delta \bar{z}_i \quad (\text{III-111})$$

この  $\frac{\partial J_c(\bar{z}_0, \bar{z})}{\partial \bar{z}_i} \Big|_{\bar{z}=\bar{z}_0}$  をパラメータ  $\bar{z}_i$  に関する評価関数感度係数 (Per-

formance Index Sensitivity Coefficient) と呼んでいる。

ここで(III-111)式をもう少し具体的に検討してみよう。評価関数  $J$  が(III-106)式のような形で与えられているとき 操作量として(III-107)式を用いたとすると(III-111)式は

$$J_c(\bar{z}_0, \bar{z}) = \int_0^T P(x, u, t) dt = \int_0^T P_c(x, \bar{z}_0; t) dt \quad (\text{III-112})$$

と表わされる。この  $J_c$  を  $\bar{z}_i$  で偏微分すると

$$\frac{\partial J_c(\bar{z}_0, \bar{z})}{\partial \bar{z}_i} \Big|_{\bar{z}=\bar{z}_0} = \int_0^T \frac{\partial P_c}{\partial x} \Big|_{\bar{z}=\bar{z}_0} \cdot \frac{\partial x}{\partial \bar{z}_i} \Big|_{\bar{z}=\bar{z}_0} dt \quad (\text{III-113})$$

となる。(III-113)式における

$$\frac{\partial x}{\partial \bar{z}_i} \Big|_{\bar{z}=\bar{z}_0} = y_i(t) = (y_{1i}(t), y_{2i}(t), \dots, y_{ni}(t))' \quad (\text{III-114})$$

すなわち

$$\frac{\partial x}{\partial \bar{z}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \bar{z}_1} & \frac{\partial x_1}{\partial \bar{z}_2} & \dots & \frac{\partial x_1}{\partial \bar{z}_m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial x_n}{\partial \bar{z}_1} & \frac{\partial x_n}{\partial \bar{z}_2} & \dots & \frac{\partial x_n}{\partial \bar{z}_n} \end{pmatrix} = (y_1, y_2, \dots, y_n) \quad (\text{III-115})$$

は(III-74)式で定義した感度係数であり、これらはまた(III-75)式と同様な次式の感度方程式の解としてえられる。

$$\dot{y}_i = \frac{\partial f_c}{\partial x} \cdot y_i + \frac{\partial f_c}{\partial \bar{z}_i} \quad (\text{III-116})$$

$$y_i(0) = 0 \quad (\text{III-117})$$

このようにプロセスシステムのパラメータ変動が評価関数に及ぼす影響を示す一つの指標である 評価関数感度係数も先に述べた状態変数の感度係数から計算することができるのである。

## 操作量の変動に対する評価関数感度

次に最適操作量を具体的に実現するための装置のパラメータ変動の問題について考察しよう。

数理的に求められた最適操作量を実際を実現するために多くの要素が用いられるが、それらを  $C = (C_1, C_2, \dots, C_p)$  としよう。この要素は当然パラメータ値が与えられれば最適な操作量  $u^*$  が実現されるように決定されているのであるから、

$$C = g^*(\varphi) \quad (\text{III-118})$$

によってプロセスシステムのパラメータと関係づけられている。従ってプロセスシステムのパラメータ値  $\varphi_0$  に対する最適な操作量  $u^*$  は

$$u^*(t) = u_c(x(t), t, \varphi_0) = \hat{u}_c(x(t), t, C_0) \quad (\text{III-119})$$

$$\text{ただし } C_0 = g^*(\varphi_0)$$

となる。

このとき最適操作量を実現する各要素が、製作上の問題その他の理由から、 $C_0 = g^*(\varphi_0)$  と違った値  $C$  になったとすると、この  $C$  を基にして実現される操作量  $u_c(x, t, C)$  は、もはや与えられたプロセスシステムに対しては最適でなくなる。このとき(III-106)式の評価関数の値を  $J(C, \varphi_0)$  で表わすと、この値は当然評価関数の最小値  $J(C_0, \varphi_0)$  より常に大きくなっている。

$$\Delta J = J(C, \varphi_0) - J(C_0, \varphi_0) > 0 \quad (\text{III-120})$$

上式を  $C_0$  の周りで Taylor 展開することによって

$$\Delta J = \sum_{i=1}^p \left. \frac{\partial J(C, \varphi_0)}{\partial C_i} \right|_{C=C_0} \Delta C_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \left. \frac{\partial^2 J(C, \varphi_0)}{\partial C_i \partial C_j} \right|_{C=C_0} \Delta C_i \Delta C_j \quad (\text{III-121})$$

$$\text{ただし } \Delta C = C - C_0$$

とえられる。さらに評価関数  $J(C, \varphi_0)$  は  $C = C_0$  において最小値をとるのであるから、

$$\left. \frac{\partial J(C, \varphi_0)}{\partial C_i} \right|_{C=C_0} = 0 \quad i=1, 2, \dots, p \quad (\text{III-122})$$

となる。従って最適な操作量を実現する要素の変動が評価関数に及ぼす影響は一次 order の範囲では求められず、次のように二次 order まで考慮する必要

がある。すなわち、操作量に関するパラメータの変動に対する評価関数感度は次式で与えられる。

$$\Delta J = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \left. \frac{\partial^2 J(c, z_0)}{\partial c_i \partial c_j} \right|_{c=c_0} \Delta c_i \Delta c_j \quad (> 0) \quad (\text{III-123})$$

このように常微分方程式系に含まれるパラメータの変動が解軌道に及ぼす影響を表わす一つの指標である感度係数を基礎にして、最適化問題と関連した形での研究が進められている。

この他に線型常微分方程式系で表わされるシステムの二次形式評価関数に対する最適制御系の評価関数感度の解析を Pagurek<sup>13,14,15)</sup> が行ない、システム最適操作量が Open Loop, Closed Loop のいずれで構成されていても評価関数感度係数は一致することを示している。その後、いずれの構成法で最適操作量が構成されていても、評価関数感度係数が一致するという結論は、より広い範囲の制御対象及び評価関数に対しても成立することが Wistenhausen<sup>16)</sup> 及び Youla & Dorato<sup>17)</sup> によって明らかにされている。また  $\beta$ -変動に対する評価関数感度を調べた Clark<sup>18)</sup> の研究、あるいは  $\alpha$ -変動に対する終端束縛条件の変動を調べた Holzman<sup>19)</sup> の研究などがあるが、いずれも制御工学の分野での感度解析的研究の成果であり、常微分方程式系で表わされるプロセスシステムの最適化問題の感度解析の研究はこれからであろう。

## 2-4 化学反応器の最適化と感度解析的考察

ここでは 化学反応器の最適化問題を取りあげ についてそれに付随する感度解析的な問題を考察する。

### 2-4-1 管型反応装置内の最適温度分布と流体混合について

プロセスシステムに関係する分野においても 反応器の最適操作、設計に限らず 種々の単位操作 あるいはそれらのいくつかの結合システム、さらには一つのプロセス、プラント全体の最適化問題を解決しようという試み<sup>20,21,22,23,24</sup>がここ数年来多くみられる。化学反応器の設計についてみるとその初期の頃は 反応熱の処理のために反応器内の等温化に努力が払われてきた。しかしながら 例えば、ある指定された反応原料処理量に対して、反応器容積を最小にする条件（これは反応器容積が固定されたとき、目的生成物の最高収率を与える条件でもある）としては 適当な反応器内温度分布が存在するはずである。このような温度分布の存在は、単一可逆発熱反応の場合に対しては、古くから知られており、このような最適温度分布は実用装置の操作設計に対しても大きな指針となることが強調されてきた。<sup>25,26,27</sup>これは反応器内の任意の位置における組成に対して、反応速度の最大を与える温度であり、単一可逆発熱反応の場合には、指定された原料組成に対してどのような反応の進行状況に対しても、その反応の転化率に対応して一義的に決定されてしまう。しかしながら複合反応や逐次反応の場合には、一定の原料組成に対しても、ある特定成分の同一転化率に対して、そこに至るまでの反応の経路によって全く異なる組成をもつことがあり、対応する最適温度分布も違ってくる。このような反応系については Bilous<sup>28</sup>らの研究に始まり Horn<sup>29</sup>らがより一般的に さらに Aris<sup>30</sup>らが Dynamic Programming を利用して最適温度分布の決定について論じている。しかしこれらの最適温度分布を 連続操作の実用装置において実現するにはどのようにすればいいのか また 近似的に達成するにしてもどの程度の近似で許容されるのか、また、実用装置と上述した理論解を求めるときに用いたモデルとの差異が持つ影響度など、より実際的な観点からの考察ははなはだ少ない。ここでは管型反応器の最適温

度分布というものを、より実際的な観点から再検討してゆくための第一歩として、従来から広く用いられている管内流れはピストン流れという仮定が成立しない場合、すなわち管内に流体混合がある場合に、最適温度分布がいかなる影響を受けるかを検討する。このような流体混合の影響については、Adler, Vortmeyer<sup>30,31)</sup>の一次反応に対する考察があるのみで、従来あまり検討されていないので、ここでは反応系としては二次反応、逐次反応、自触媒反応をとりあげ、管内の軸方向の流体混合によって反応器出口での転化率を最大にする管内最適温度分布がどのような影響を受けるかを調べる。

### 1) 流動モデル

管型反応器内の流動状態を表わすモデルとしては、従来数多くのもものが提案されているが、ここでは一次元拡散モデル<sup>32,33)</sup>と呼ばれるモデルを用いる。この一次元拡散モデルについて、以下簡単にのべる。

装置の断面積を  $S$ 、長さを  $L$  ( $S, L$ -定) とする。着目している流体が装置内で占めるポールドアップは一定であり、流れに垂直な断面では、濃度および速度の勾配はないものとする。また反応による容積流量  $F$  の変化は無視できるとする。以上の仮定から装置内での注目している流体は、一定の見かけ流速  $u = F/S$  をもつ一次元流れと考えられる。Fig. III-2, Fig. III-3 に示すように装置への供給流体の濃度を  $C_i$ 、入口から流れ方向に  $Z$  の距離にある断面における濃度を  $C$ 、また出口  $Z = L$  における濃度を  $C_o$  とする。  $Z, Z + dZ$  間の微小容積に対して物質収支を考えると、流れによって運び込まれる物質量は  $uSC$ 、流出する物質量は  $uS(C + \frac{\partial C}{\partial Z} dZ)$  である。装置内の混合は一定の平均逐混合拡散係数  $\bar{E}$  を仮定した拡散によって表わされるものとする。断面  $Z$  を通して微小要素より持ち去られる量は  $\bar{E}S(\frac{\partial C}{\partial Z})$  であり、同様に下流より混合によって要素内に流入する量は  $\bar{E}S\frac{\partial}{\partial Z}(C + \frac{\partial C}{\partial Z} dZ)$  である。また流体の単位容積あたり、単位時間に反応によって蓄積する物質量を  $\phi(C)$  とすると、微小要素内における速度過程の進行による蓄積量は、濃度の関数である  $\phi(C)$  と、要素内の流体容積  $SdZ$  との積で与えられる。従ってこの

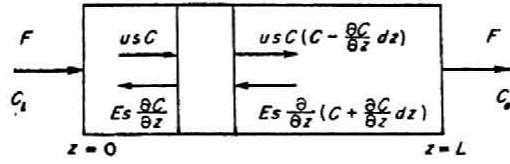


Fig. III-2 Material balance for diffusional model

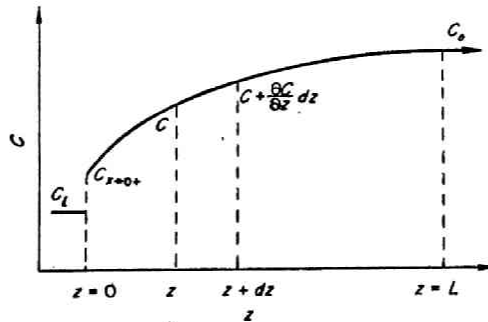


Fig. III-3 Concentration profile

微小要素における着目成分の物質収支をとることによって、要素内の濃度の時間的変化  $\partial C / \partial t$  は次式で示される。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \bar{E} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u \frac{\partial C}{\partial z} + \phi(C) \quad (\text{III-124})$$

また反応が装置内  $0 < z < L$  の間でのみ起ると考え、また一般には装置外における混合は装置内のそれに比して十分小さく無視できると考えると、装置の両端  $z=0$  と  $z=L$  における物質収支をとることにより、(III-124) 式の境界条件は次式で与えられる。

$$z=0 \quad : \quad \bar{E} \left( \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{z=0^+} = u \cdot (C)_{z=0^+} - \frac{F}{S} C_i \quad (\text{III-125})$$

$$z=L \quad : \quad \bar{E} \left( \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{z=L^-} = 0 \quad (\text{III-126})$$

この境界条件は一般に Danckwerts の境界条件と呼ばれており、最も広く利用されている。通常の定常流通操作においては  $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$  であるから、基礎方程式は

$$\bar{E} \frac{d^2 C}{dz^2} - u \frac{dC}{dz} + \phi(C) = 0 \quad (\text{III-127})$$

となる。また  $\bar{E} = \infty$  に対応するのが完全混合で、装置内では濃度は均一になる。 $\bar{E} = 0$  に対応するのがピストン流れである。このように遂混合・拡散の考えによると、ピストン流れから完全混合にいたる全ての混合状態を表わしうる。

## 2) 二次可逆発熱反応

### 反応モデルと基礎式

まず管型反応器内において、次のような二次可逆発熱反応が行なわれる場合を考えてみる。



反応物質 A に対する定常状態における物質収支式は(III-127)式より、

$$\bar{E} \frac{d^2 C_A}{dz^2} - u \frac{dC_A}{dz} - R_A = 0 \quad (\text{III-129})$$

ただし記号は次の通りである。

$\bar{E}$  : 逆混合係数       $C_A$  : 反応物質 A のモル濃度

$L$  : 反応管の全長       $u$  : 流体の線速度

$R_A$  : 反応物質 A の反応速度

(III-128)式で示される 2次可逆発熱反応の反応速度式は 反応物質 A の生成速度に関して(III-130)式のように表わされる。

$$R_A = k_1 C_A^2 - k_2 (C_{A0} - C_A)^2 \quad (\text{III-130})$$

ここで  $k_1$ ,  $k_2$  は (III-131, 132)式によって示される Arrhenius の法則に従う温度に依存する反応速度定数である。

$$k_1 = k_{10} \exp(-E_1/RT) \quad (\text{III-131})$$

$$k_2 = k_{20} \exp(-E_2/RT) \quad (\text{III-132})$$

ただし  $k_{10}$ ,  $k_{20}$  は正逆反応の頻度因子  $E_1$ ,  $E_2$  はそれぞれ活性化エネルギー。さらに初期濃度は等モル反応と仮定すると。

$$(C_A)_0 = (C_B)_0 = C_0 \quad (\text{III-133})$$

ここで全ての式に含まれる変数を無次元化するために次の無次元量を導入する。

$$\text{無次元距離} \quad \zeta = z/L \quad (\text{III-134})$$

$$A \text{ の転化率} \quad X_A = (C_0 - C_A)/C_0 \quad (\text{III-135})$$

$$\text{Damköhler 数} \quad DA = (L k_{10}/u) C_0 \quad (\text{III-136})$$

$$\text{Peclet 数} \quad Pe = uL/\bar{E} \quad (\text{III-137})$$

$$H_1 = k_{10} C_0 \quad (\text{III-138})$$

$$H_2 = k_{20} C_0 \quad (\text{III-139})$$

ここで  $Pe$  数は軸方向拡散の程度を表わし、 $Pe=0$  が完全混合に  $Pe=\infty$  がピストン流れに対応している。また Damköhler 数は化学反応でプロセスを特徴づける無次元数である。さらに (III-131, 132, 136)式を用いて新しい変数  $K_1$ ,  $K_2$  を次のように定義する。

$$K_i = (DA/Pe) \exp(-E_i/RT) \quad (\text{III-140})$$



$$k_2 = (D_A / \rho_e) (k_{20} / k_{10}) \exp(-E_2 / RT) \quad (\text{III-141})$$

またこれらの無次元数を用いると(III-129)の基礎式および(III-125, 126)式の境界条件に対応する式は次のようにえられる。

プロセス方程式

$$\frac{1}{Pe^2} \cdot \frac{d^2 x_A}{dz^2} - \frac{1}{Pe} \cdot \frac{dx_A}{dz} = k_2 x_A^2 - k_1 (1-x_A)^2 \quad (\text{III-142})$$

境界条件

$$\frac{1}{Pe} \cdot \frac{dx_A}{dz} \Big|_{z=0^+} = x_A \Big|_{z=0^+} \quad (\text{III-143})$$

$$\frac{1}{Pe} \cdot \frac{dx_A}{dz} \Big|_{z=1} = 0 \quad (\text{III-144})$$

評価関数

$$x_A \Big|_{z=1} \rightarrow \text{最大} \quad (\text{III-145})$$

まず(III-145)式の評価関数をみたとす。すなわち、反応管出口での転化率を最大にする管内温度分布を求め、それらが流体混合度の指標である  $Pe$  数の変化によってどのような影響をうけるかを考察する。(III-142)~(III-145)式で記述される最適化問題を解く際に、操作量としては、管内反応物質の温度  $T$  ではなく、 $T$  を含んだ関数  $K_1$ 、 $K_2$  を新しい操作量と考えると計算が容易になる。

(III-140, 141)式から  $K_1$ 、 $K_2$  には次の関係式が成立する。

$$k_2 = \alpha K_1^n \quad (\text{III-146})$$

ただし

$$n = E_2 / E_1 \quad (\text{III-147})$$

$$\alpha = (k_{20} / k_{10}) (Pe / DA)^{n-1} \quad (\text{III-148})$$

(III-142)~(III-145)式で示される最適化問題を解く方法としては、変分法、最尤原理、D. P. Gradient 法などいずれの方法によっても解けるが(III-128)式で表わされるような単一反応に対しては、最適温度というのは、各転化率に対して反応速度を最大にする温度であることがわかっているから。

$$r_A = k_2 x_A^2 - k_1 (1-x_A)^2 = \alpha K_1^n x_A^2 - K_1 (1-x_A)^2 \quad (\text{III-149})$$

この(III-149)式を  $T$ 、すなわち  $K_1$  について最大にすることを考えると

$$\frac{\partial r_A}{\partial K_1} = n \alpha K_1^{n-1} x_A^2 - (1-x_A)^2 = 0 \quad (\text{III-150})$$

従って各転化率に対する最適な温度は次式から求められる。

$$K_1 = \left( \frac{(1-x_A)^2}{\alpha x_A^2} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad (\text{III-151})$$

ここでは  $n=2$  の場合のみを考察するので、新しいパラメータ  $\mu$  を次のように定義する。すなわち

$$D_A = \mu \left( \frac{H_2}{H_1} \right) = \mu \left( \frac{k_{20}}{k_{10}} \right) \quad (\text{III-152})$$

(III-152)式を用いると(III-151)は

$$K_1 = \frac{1}{2\alpha} \left( \frac{1-x_A}{x_A} \right)^2 = \frac{\mu}{2Pe} \left( \frac{1-x_A}{x_A} \right)^2 \quad (\text{III-153})$$

となる。従って(III-142)のプロセス方程式は

$$\frac{1}{Pe} \cdot \frac{d^2 x_A}{dz^2} - \frac{dx_A}{dz} = - \frac{\mu}{4} \cdot \frac{(1-x_A)^2}{x_A^2} \quad (\text{III-154})$$

となり、この(III-154)式を境界条件(III-143, 144)式の下で解けば、管内の各位置における転化率が求まり、そのときの出口転化率が最大転化率を与える。

また管内最適温度は(III-131, 140)式より求めることができる。任意の  $Pe$  数に対する解は、数値計算によらざるをえないが、 $Pe=0$  (完全混合)。

$Pe=\infty$  (ピストン流れ)の両極端の場合については次のように解をうることができる。

i)  $Pe=0$  (完全混合)の場合

境界条件(III-143)式を考慮して(III-154)式を解くと

$$\frac{1}{Pe} \cdot \frac{dx_A}{dz} - x_A = - \frac{\mu}{4} \int_0^z \frac{(1-x_A)^2}{x_A^2} dz \quad (\text{III-155})$$

$z=1$ において(III-155)式は境界条件(III-144)式を用いることによって、

$$x_A(1) = \frac{\mu}{4} \int_0^1 \frac{(1-x_A)^2}{x_A^2} dz \quad (\text{III-156})$$

さらに  $Pe=0$ 、すなわち完全混合であることから  $x_A = x_A(1)$  であり、(III-156)式は

$$(x_A(1))^3 = \frac{\mu}{4} (1-x_A(1))^4 \quad (\text{III-157})$$

となって最適転化率が求められる。

ii)  $Pe = \infty$  (ピストン流れ) の場合

(III-154) 式は

$$-\frac{dx_A}{dz} = -\frac{\mu}{4} \cdot \frac{(1-x_A)^4}{x_A^2} \quad (\text{III-158})$$

となり、境界条件(III-143)式を考慮することによって

$$x_A(z) = \frac{1}{1 + \left\{ \left( \frac{3}{4} \mu \right) z \right\}^{-\frac{1}{3}}} \quad (\text{III-159})$$

とえられる。

### 数値計算結果および考察

さて(III-154)式を(III-143, 144)式の境界条件の下で数値計算するのであるが、ここでは  $\pi = 2$ ,  $\mu = 1$ ,  $E_1 = 5000.0$  (cal/gr mol),  $E_2 = 10000.0$  (cal/gr mol),  $k_{20}/k_{10} = 1000.0$ ,  $R = 1.987$  (cal/gr mol °K) とした。各  $Pe$  数の値に対して最適な転化率のプロファイルを示したものが Fig III-4 であり、最適な管内温度分布を示したものが Fig III-5 である。Fig III-4 から明らかなように、ピストン流れ ( $Pe = \infty$ ) の場合に、反応管出口の転化率は最大になり  $Pe$  数が減少するにつれて すなわち完全混合に近づくにつれて 出口転化率も減少してゆく。しかし  $Pe$  数が 20 以上の場合には  $Pe = \infty$  (ピストン流れ) の場合との差異は非常に小さいものになることを示している。Fig III-5 に示されている管内最適温度分布は 混合とは無関係に反応管の入口付近で最も高く 出口方向に向って単調に減少していく。またその減少の傾向は  $Pe$  数が大きい程 すなわちピストン流れに近づくにつれて顕著になり、反応管の入口付近で急激に温度を降下させてやる必要のあることを示している。

### 3) 自触媒反応

#### 反応モデルと基礎式

一般にエステルおよびこれに類似した化合物の酸触媒による加水分解反応や汚水処理における種々の微生物反応などは 生成物質そのものが触媒として働く自触媒反応になっている。そのため反応速度は 反応物質の濃度はもちろんのこと 反応生成物の濃度によっても影響されるため、流れ

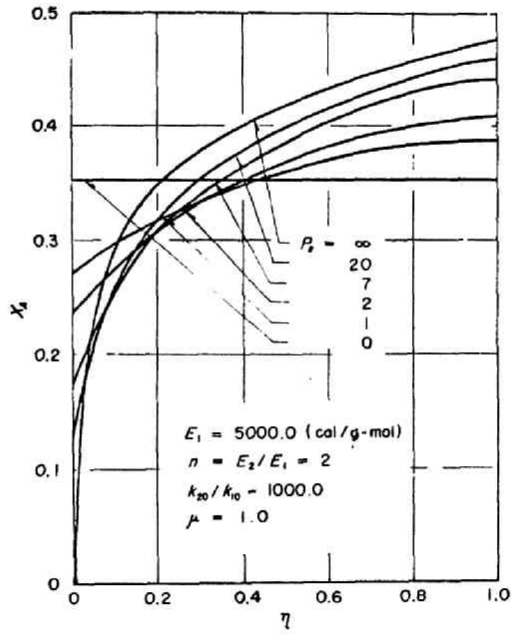


Fig. III-4 Optimum concentration profiles for various  $Pe$

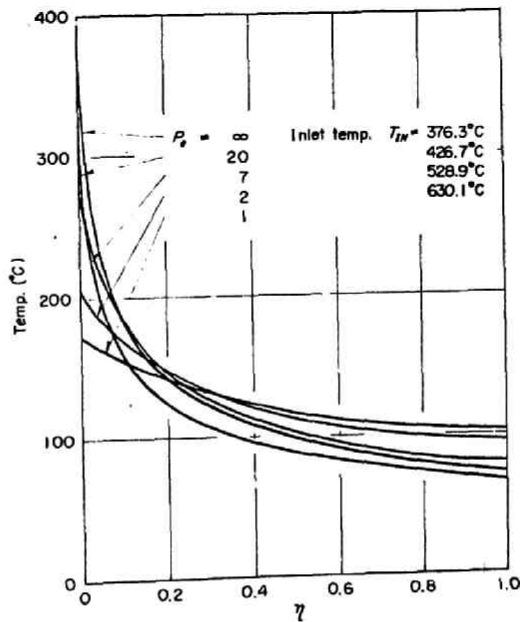


Fig. III-5 Reactant temperature profile

系の反応器を用いて最適操作を行なう場合、その操作も一般の単一反応の最適操作のパターンとはかなり異なった様子を示すものと考えられるので、まず管内最適温度分布がどのようになるかを調べ、さらに自触媒反応の最適温度分布曲線が管内の流体混合によってうける影響について調べる。

L. T. Fan<sup>35)</sup>らはここで取り上げたのと同じ自触媒反応について、管内流れは押し出し流れとし、生成物のリサイクル量の変化による出口転化率の変動について考察している。ここで取り上げる反応系は



で、反応速度式  $R_A$  は次式で与えられるものとする。

$$R_A = k_1 (C_A)^a (C_R)^r - k_2 (C_R)^s \quad (\text{III-161})$$

$C_A$  : 反応物質 A のモル濃度

$C_R$  : 生成物質 R のモル濃度

また、 $a, r, s$  は個々の反応物質および生成物質に関する反応次数であり、 $k_1, k_2$  は (III-131, 132) 式で表わされる Arrhenius の法則に従う温度に依存する反応速度定数である。

反応器内の各点において次の関係が成立する。

$$C_0 = C_{A0} + C_{R0} = C_A + C_R \quad (\text{III-162})$$

$C_{A0}, C_{R0}$  はそれぞれ反応物質 A、および生成物質 R の初期濃度である。

この (III-162) 式を用いると (III-161) 式の反応速度式は次のようになる。

$$R_A = k_1 \left(\frac{C_A}{C_R}\right)^a \left(1 - \frac{C_A}{C_R}\right)^r (C_0)^{a+r} - k_2 \left(1 - \frac{C_A}{C_0}\right)^s (C_0)^s \quad (\text{III-163})$$

この節ではモル分率  $X_A = C_A/C_0$ ,  $X_{A0} = C_{A0}/C_0$  によって濃度を表わすと、(III-160) 式で表わされる自触媒反応を管型反応器で行なわせるときのプロセス方程式 および境界条件は (III-125, 126, 127, 163) 式から次のように表わされる。

<プロセス方程式>

$$\frac{1}{Pe^2} \frac{d^2 X_A}{dz^2} - \frac{1}{Pe} \frac{dX_A}{dz} = K_1 (X_A)^a (1-X_A)^r - K_2 (1-X_A)^s \quad (\text{III-164})$$

<境界条件>

$$z=0, \quad \frac{1}{Pe} \frac{dX_A}{dz} \Big|_{z \rightarrow 0^+} = X_A \Big|_{z \rightarrow 0^+} - X_{A0} \quad (\text{III-165})$$

$$\zeta=1 : X_A = (X_A)_1, \quad \frac{1}{Pe} \cdot \frac{dX_A}{d\zeta} = 0 \quad (\text{III-166})$$

また生成物質 R の収率を最大にする、換言すれば、反応物質 A の出口濃度  $(X_A)_1$  を最小にすることが望ましいわけであるから、評価関数は次式で表わされる。

$$\langle \text{評価関数} \rangle \quad (X_A)_1 \rightarrow \text{最小} \quad (\text{III-167})$$

従って問題は (III-164)~(III-167) 式を満足する最適温度分布が反応管内の流体混合によっていかなる影響をうけるかを調べることである。ここでも操作量は温度 T そのものではなく T を含んだ関数  $K_1, K_2$  を考えることにすると、 $K_1, K_2$  の間には (III-146, 147, 148) 式の関係が成立する。従って最適な  $K_1, K_2$  は前述した場合と同様にして次のように求められる。

$$K_1 = \left\{ \frac{1}{n\alpha} (X_A)^a (1-X_A)^{r-s} \right\}^{\frac{1}{n-1}} \quad (\text{III-168})$$

$$K_2 = \left\{ \frac{1}{n\alpha} (X_A)^a (1-X_A)^{r-s} \right\}^{\frac{n}{n-1}} \quad (\text{III-169})$$

(III-168, 169) 式を (III-164) 式に代入すると

$$\frac{1}{Pe^2} \frac{d^2 X_A}{d\zeta^2} - \frac{1}{Pe} \frac{dX_A}{d\zeta} = \left(1 - \frac{1}{n}\right) \left(\frac{1}{n\alpha}\right)^{\frac{1}{n-1}} (X_A)^{\frac{a}{n-1}} (1-X_A)^{\frac{(nr-s)(n-1)}{n-1}} \quad (\text{III-170})$$

上式を (III-165, 166) 式の境界条件の下で解くことによって、反応器内の最適濃度 (molar fraction) を知ることができる。

(III-162) 式で定義される新しいパラメーター  $\mu$  を用いると (III-168) 式はさらに次式のようになり

$$K_1 = \frac{\mu}{2 \cdot Pe} (X_A)^a (1-X_A)^{r-s} \quad (\text{III-171})$$

これを用いると (III-170) 式はさらに

$$\frac{1}{Pe^2} \frac{d^2 X_A}{d\zeta^2} - \frac{1}{Pe} \frac{dX_A}{d\zeta} = \frac{1}{4\alpha} (X_A)^{2a} (1-X_A)^{(2r-s)} \quad (\text{III-172})$$

ここでも、2) の場合と同様に  $n=2$  のときのみを考察することになると (III-164) 式は次のようになる。

$$\frac{1}{Pe^2} \frac{d^2 X_A}{d\zeta^2} - \frac{1}{Pe} \frac{dX_A}{d\zeta} = \frac{\mu}{4\alpha} (X_A)^{2a} (1-X_A)^{(2r-1)} \quad (\text{III-173})$$

この(III-173)式を(III-165, 166)式の境界条件の下で、種々の  $Pe$  数に対して解くことにより、管内の最適濃度分布がえられ、さらに(III-168, 169)式を用いることにより、管内最適温度分布が流体混合によってうける影響を知ることができる。まず  $Pe = 0$  (完全混合) と  $Pe = \infty$  (ピストン流れ) の両極端の場合に関して考察しておく。

i)  $Pe = 0$  (完全混合) の場合

境界条件(III-165)式の下で(III-173)式を積分すると

$$\frac{1}{Pe} \frac{dX_A}{dz} - (X_A - X_{A0}) = \int_0^z \frac{\mu}{4} (X_A)^{2a} (1 - X_A)^{(2r-s)} dz \quad (\text{III-174})$$

さらに境界条件(III-166)式を考慮すれば

$$X_{A0} - (X_A)_1 = \int_0^1 \frac{\mu}{4} (X_A)^{2a} (1 - X_A)^{(2r-s)} dz \quad (\text{III-175})$$

$Pe = 0$  すなわち完全混合であるから  $X_A = (X_A)_1$  ; 従って反応器出口濃度は次式をみたす濃度として与えられる。

$$(X_A)_1 = X_{A0} - \frac{\mu}{4} (X_A)_1^{2a} (1 - (X_A)_1)^{(2r-s)} \quad (\text{III-176})$$

ii)  $Pe = \infty$  (ピストン流れ) の場合

$Pe = \infty$  の条件下では、(III-173)式は次のようになる。

$$-\frac{dX_A}{dz} = \frac{\mu}{4} (X_A)^{2a} (1 - X_A)^{(2r-s)} \quad (\text{III-177})$$

(A) 正反応が一次 逆反応が二次反応の場合

$$a=r=1, \quad s=2.$$

$$\frac{\mu z}{4} = \left[ -\frac{1}{X_A} \right]_{X_A}^{X_{A0}} \quad (\text{III-178})$$

(B) 正反応が一次 逆反応が0次反応の場合

$$a=r=1, \quad s=0$$

$$\frac{\mu z}{4} = \left[ 2 \cdot \ln \left( \frac{X_A}{1 - X_A} \right) + \frac{2X_A - 1}{X_A(1 - X_A)} \right]_{X_A}^{X_{A0}} \quad (\text{III-179})$$

(C) 正逆ともに一次反応の場合

$$a=r=s=1:$$

$$\frac{\mu\tau}{4} = \left[ -\ln\left(\frac{X_A}{1-X_A}\right) - \frac{1}{X_A} \right]_{X_A}^{X_{A0}} \quad (\text{III-180})$$

いずれの場合も  $\tau=1$  すなわち反応管出口における最適濃度は試行法によって求めることができる。

### 数値計算結果 および考察

数値計算に用いたデータは  $E_1 = 10,000 \text{ cal/g.mol}$ ,  $\alpha = E_2/E_1 = 2$ ,  $k_{20}/k_{10} = 50.0$ ,  $\mu = 70.0$  であり 種々の  $Pe$  数の値に対して境界条件 (III-165, 166) 式の下で方程式 (III-173) 式を解き 管内の最適濃度分布  $X_A(\eta)$  をうる。次にこの  $X_A(\eta)$  を (III-168) 式あるいは (III-169) 式に代入することによって、反応管内の各位置に対する  $K_1, (K_2)$  の最適値が求まる。さらにこの  $K_1, (K_2)$  の値を (III-140) 式 (III-141 式) に代入することによって、管内の各位置における最適温度分布をうることができる。Fig III-6 ~ Fig III-10 は正反応に対しては一次反応、逆反応に対しては 0 次反応の場合、すなわち  $a=r=1$ ,  $s=0$  の場合の数値計算結果を示したものである。Fig III-6 は反応管出口における最大転化率が混合の程度を表わす  $Pe$  数によって、どのように影響されるかを反応物質 A の初期モル分率  $X_{A0}$  をパラメータにとって図示したものである。A の初期モル分率  $X_{A0}$  が大きい場合 ( $X_{A0} > 0.88$ ) には反応管出口の転化率を最大にするようなある最適な  $Pe$  数が存在することがわかる。これは  $X_{A0}$  が大きい場合には、管内の混合を適当な強度で起こさせる方が有利であることを示している。また  $X_{A0}$  の値が小さくなれば ( $X_{A0} < 0.8$ )  $Pe$  数が増加すればする程 すなわち管内流れがピストン流れに近づけば近づく程 出口における転化率は増加するからこのような場合には管内での混合をできるだけ抑制しなければならないことを示している。また管内の混合特性が規定されているような反応装置に対しては、出口における転化率を最大にするようなある最適な  $X_{A0}$  が存在することが明らかである。

Fig III-7, Fig III-8 は反応物質 A の初期モル分率  $X_{A0}$  を  $X_{A0} = 0.92$  にしたとき また Fig III-9, Fig III-10 は  $X_{A0} = 0.74$ , Fig III-11, Fig III-12 は  $X_{A0} = 0.5$



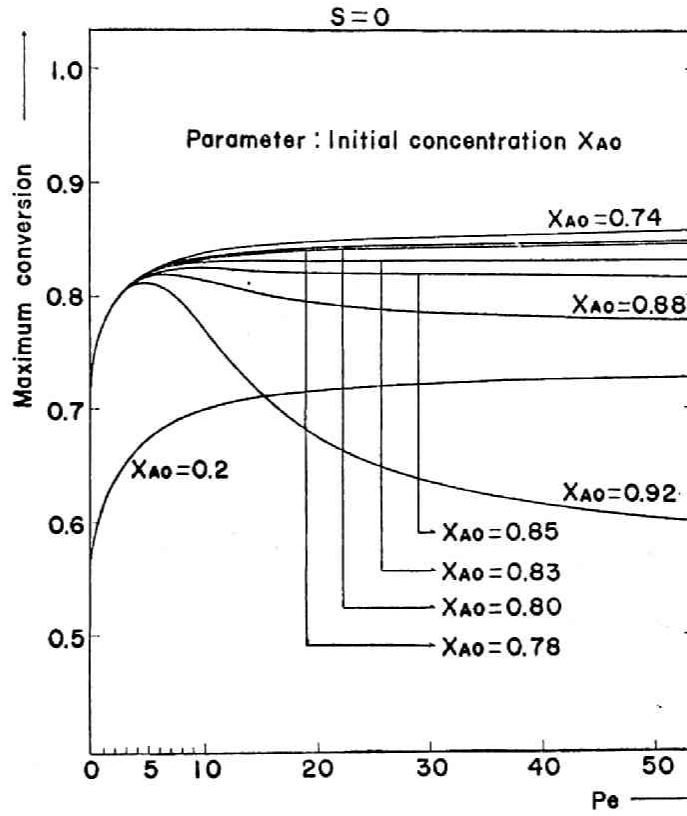


Fig. III-6 Maximum conversion vs.  $Pe$ ; zeroth-order  
 $s=0, a=r=1$

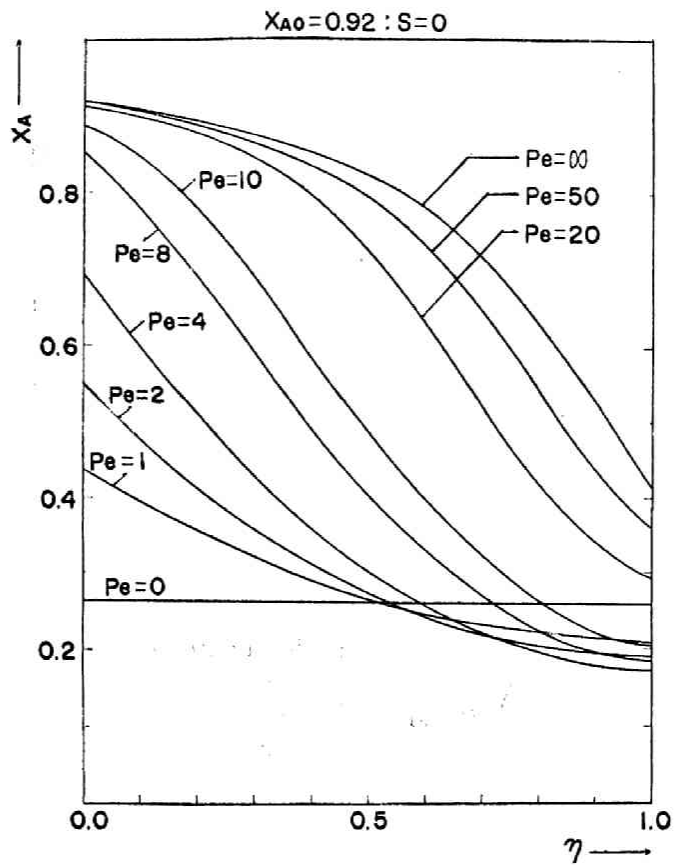


Fig. III-7 Optimal concentration profile  $s=0, a=r=1; X_{A0}=0.92$

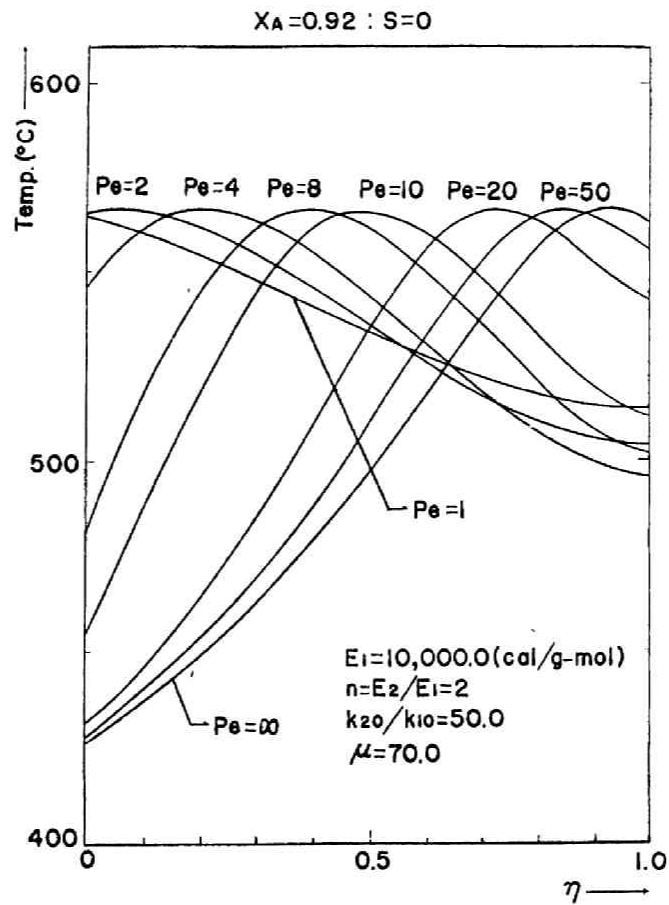


Fig. III-8 Optimal temperature profile  $s=0, a=r=1; X_{A0}=0.92$

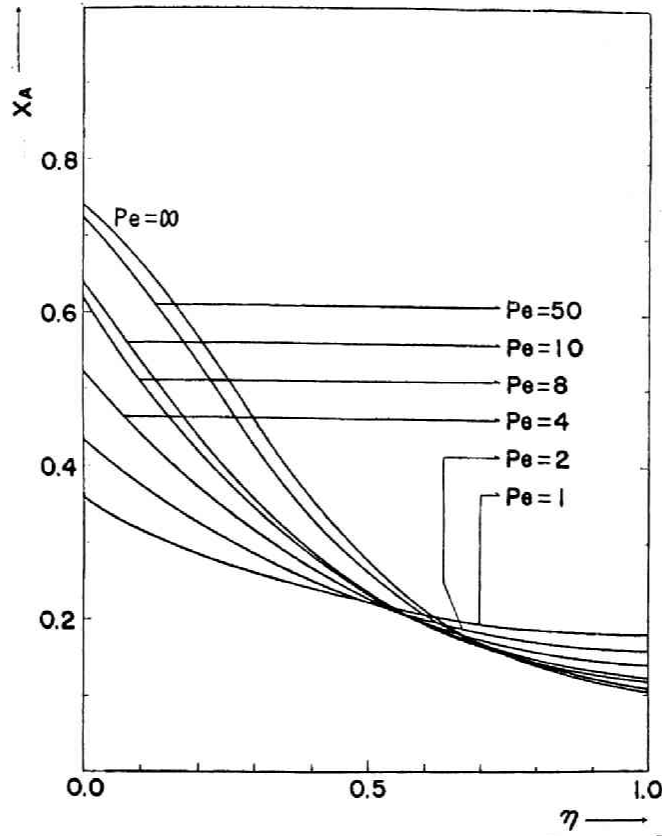


Fig. III-9 Optimal concentration profile  $s=0, a=r=1; X_{A0}=0.74$

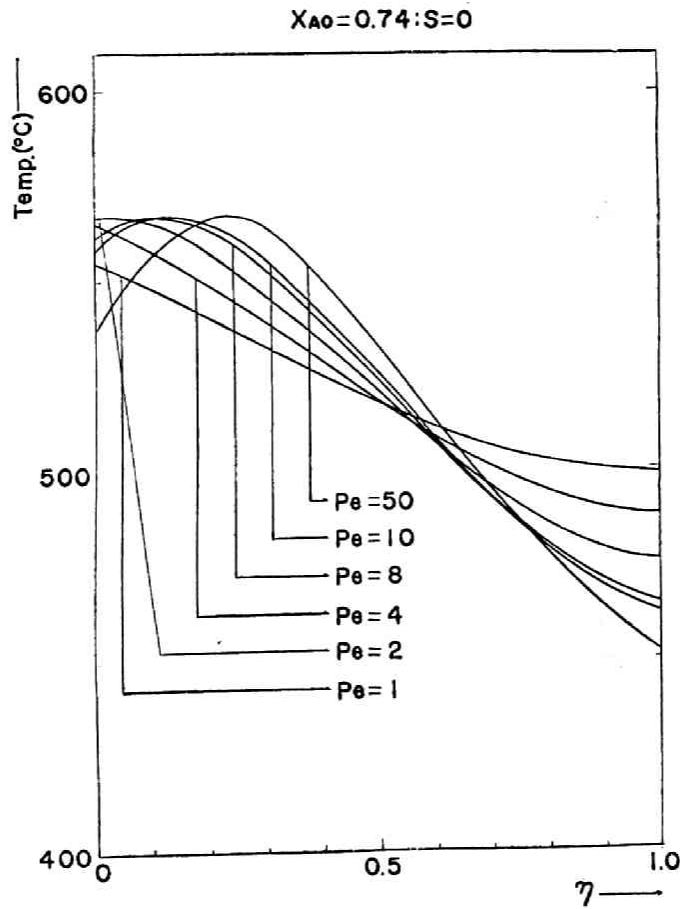


Fig. III-10 Optimal temperature profile  $s=0, a=r=1; X_{A0}=0.74$

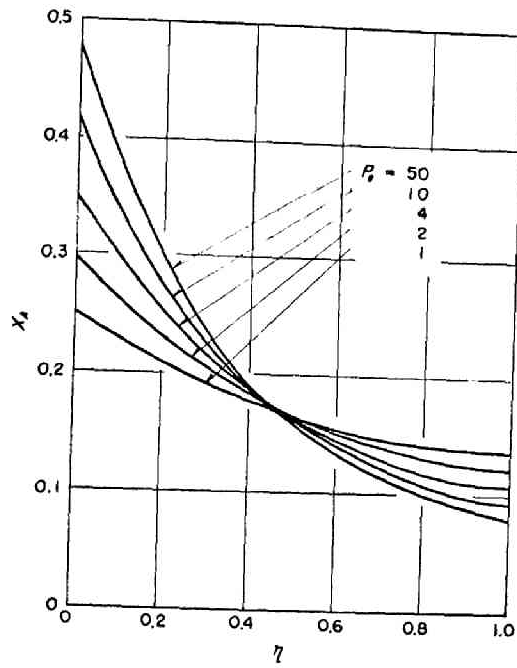


Fig. III-11 Optimal concentration profile  $s=0, a=r=1; X_{A0}=0.5$

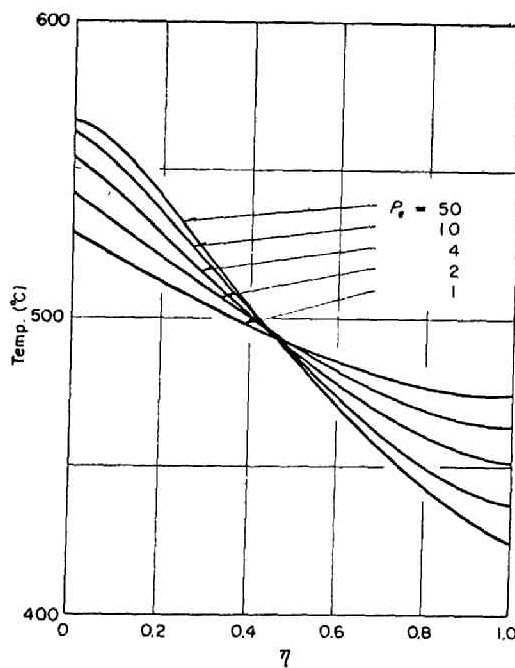


Fig. III-12 Optimal temperature profile  $s=0, a=r=1; X_{A0}=0.5$

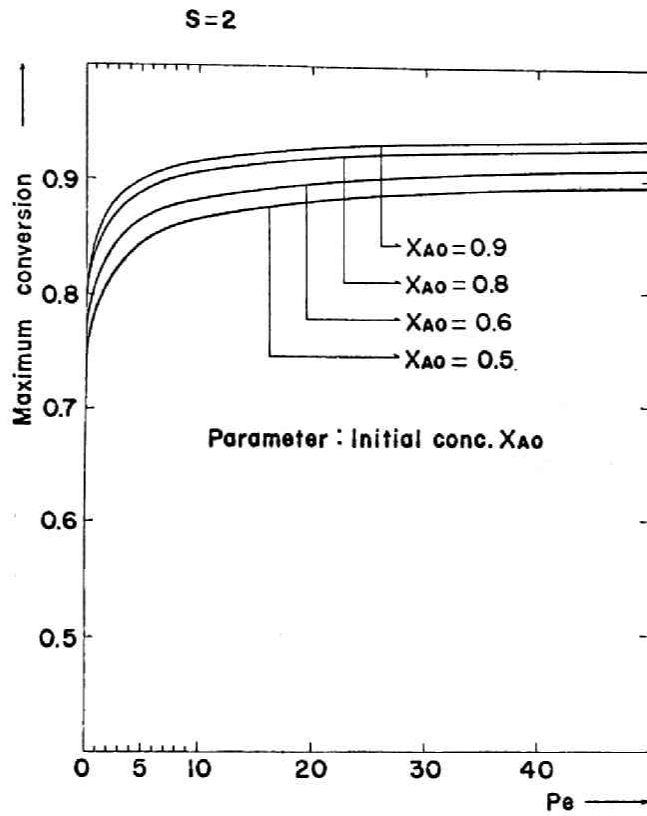


Fig. III-13 Maximum conversion vs.  $Pe, s=2, a=r=1$

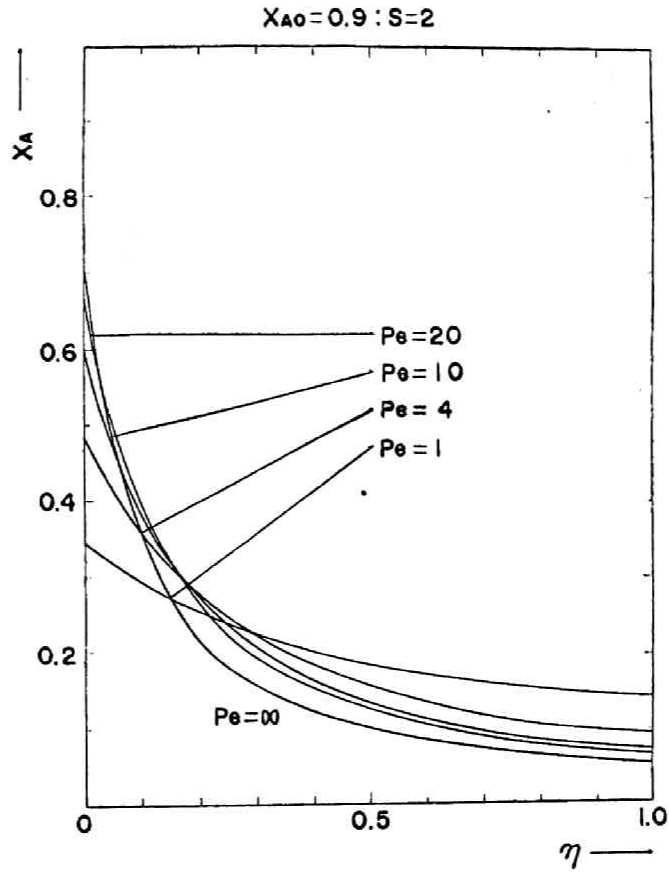


Fig. III-14 Optimal concentration profile,  $s=2, a=r=1; X_{A0}=0.9$

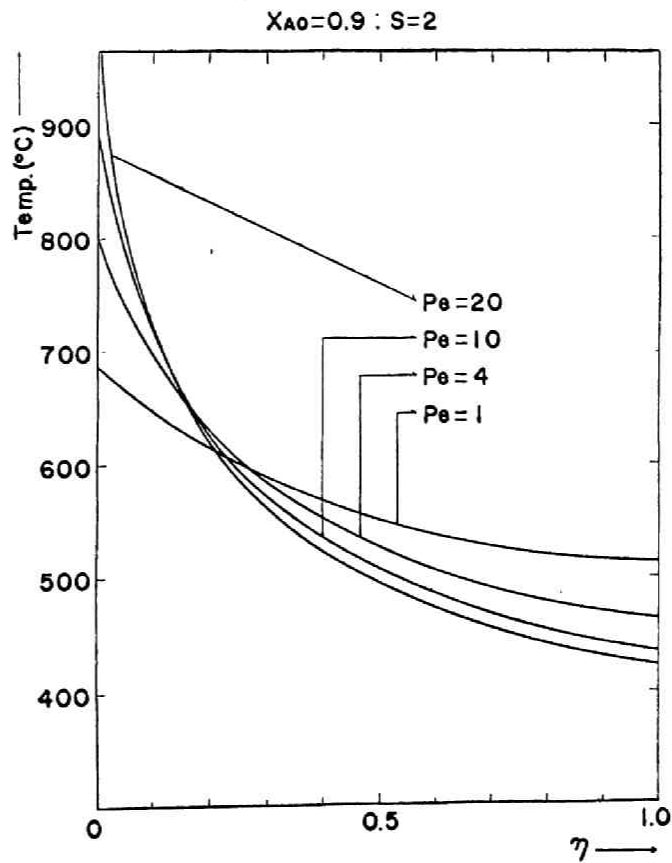


Fig. III-15 Optimal temperature profile,  $s=2, a=r=1; X_{A0}=0.9$

にしたとき  $Pe$  数をパラメーターとして管内の最適濃度分布および最適温度分布を図示したものである。Fig. III-8 に示されている  $X_{A0} = 0.92$  の場合、すなわち、反応物質 A の初期分率が高い場合には最適温度分布には極大値を有する点が現われる。 $Pe$  数によって管内の最適温度には変化がないが、その極大値を与える位置が、管内の流体混合が小さくなる ( $Pe \rightarrow \infty$ ) につれて反応管の出口に近づいていくことを示している。このように管内最適温度分布に極大値が現われ、しかもその位置が流体混合の影響をうけるということは、最適温度制御をしようとする際に非常な困難を伴うことが予想される。しかし、Fig. III-12 に示されている  $X_A = 0.5$  の場合、すなわち A の初期モル分率が小さくなると、管内の最適温度分布には Fig. III-8 にみられたような極大値は現われず、むしろ

2) で取り扱った通常の 2 次反応の場合に近い最適温度分布がえられる。

また Fig. III-13 ~ Fig. III-15 は正反応に関して一次反応で、逆反応に対して二次反応の場合、すなわち  $a=r=1$ ,  $s=2$  の場合の数値計算結果を示したものである。Fig. III-13 は Fig. III-6 と同様に  $X_{A0}$  をパラメーターとして  $Pe$  数が反応管出口の最大転化率に与える影響を示したものである。 $X_{A0}$  のどんな値に対しても最大転化率は  $Pe$  数の増加につれて、すなわち、管内流れがピストン流れに近づくとともに増加していくことを示している。

Fig. III-14、Fig. III-15 は  $X_A = 0.9$  の場合の反応管内の最適濃度分布および最適温度分布が、種々の  $Pe$  数に対してうける影響を示したものであるが、反応次数が  $a=r=1$ ,  $s=2$  になると、Fig. III-7、Fig. III-8 の場合とは異なり、最適温度分布には最早極大値も現われず、反応管入口で高く、出口付近で低い 2) の場合と同様な温度分布がえられる。この傾向は  $X_{A0}$  が小さくても変わらず、最適温度分布は  $Pe$  数の影響を  $a=r=1$ ,  $s=0$  の場合 (Fig. III-6) ほど強く受けないことがわかる。

このように自触媒反応の場合には、反応次数および反応物質の初期モル分率  $X_{A0}$  によって、管内の最適温度分布、反応管出口における最大転化率が、 $Pe$  数の変化、すなわち、管内の流動状態によってうける影

響は著しく変化し、この種の反応の最適温度制御には管内流動状態、反応次数などを適確に把握することが是非必要であることが明らかとなった。

#### 4) 逐次反応

##### 1) 反応モデルと基礎式

前節では化学反応が化学量論式に従う単一反応をとりあげてきたがここでは



なる逐次一次発熱反応を管型反応で行なわせた場合、望ましい中間生成物 P の反応管出口における濃度を最大にする最適温度分布が管内の流体混合によってどのような影響をうけるかを考察する。ここでとりあげる逐次反応や並発反応の場合には、反応が化学量論式に従わないため、非常に問題が複雑になり、最適温度分布も前節の単一反応の場合のように容易に求めることはできず、そのための数学的な手法も変分法、Gradient 法、最大原理、D. P.などを必要とする。

(III-181)式で表わされる逐次一次反応において反応速度式は次のように与えられる。

$$\text{反応物質 A の消失速度 } R_A: \quad R_A = k_1 C_A \quad (\text{III-182})$$

$$\text{目的物質 P の生成速度 } R_P: \quad R_P = k_1 C_A - k_2 C_P \quad (\text{III-183})$$

ここに  $k_1, k_2$  はそれぞれ Arrhenius 型の反応速度定数で (III-131, 132) 式によって定義される。ただし  $C_A, C_P$  はそれぞれ反応物質 A および目的生成物 P のモル濃度を表わす。

今、原料組成は成分 A のみしか存在しなかったと仮定するとその初期濃度を  $C_{A0}$  で表わせば、反応器の各点で次の関係式が成立する。

$$C_{A0} = C_A + C_P + C_X \quad (\text{III-184})$$

従って、3成分のうちいずれか2成分についてのプロセス方程式を設定すればそれで十分である。今、反応物質 A、および目的生成物 P に対する物質収支式を (III-171) 式に注意して求めると次のようにえられる。



<プロセス方程式>

$$\frac{1}{Pe} \frac{d^2 C_A}{dz^2} - \frac{dC_A}{dz} - k_1 C_A \tau = 0 \quad (\text{III-185})$$

$$\frac{1}{Pe} \frac{d^2 C_p}{dz^2} - \frac{dC_p}{dz} + (k_1 C_A - k_2 C_p) \tau = 0 \quad (\text{III-186})$$

ただし  $\tau = V_r/F$ , ( $V_r$ : 反応管容積,  $F$ : 原料供給速度)

単一反応の場合には, 2) でも述べたように, Danckwerts によって厳密な境界条件が与えられているが, それが果して逐次反応の場合にも適用されるか否かについては議論の余地はあるが, 一応ここでは A および P の両成分に対して, Danckwerts の境界条件が成立するものと仮定する. それ故 (III-185, 186) 式に対して次のようにえられる.

<境界条件>

$$z=0: \quad Pe(C_A|_{z=0^+} - C_{A0}) = \frac{dC_A}{dz}|_{z=0^+} \quad (\text{III-187})$$

$$z=1: \quad \frac{dC_A}{dz} = 0 \quad (\text{III-188})$$

$$z=0: \quad Pe \cdot C_p|_{z=0^+} = \frac{dC_p}{dz}|_{z=0^+} \quad (\text{III-189})$$

$$z=1: \quad \frac{dC_p}{dz} = 0 \quad (\text{III-190})$$

<評価関数>

$$C_p(1) \rightarrow \text{最大} \quad (\text{III-191})$$

従って問題は (III-185)~(III-191) 式で示されるように 目的生成物の反応管出口における濃度を最大にする管内最適温度分布が  $Pe$  数の変化によっていかなる影響をうけるかを調べることにある. しかし最適温度分布は前節のように微分法で簡単に求めることはできず, 変分法, Gradient, DP などの手法を用いざるをえないが, ここでは Pontryagin の最大原理を用いて最適温度分布を求めた.

数値計算結果および考察

(III-181) 式で示される反応系の具体的な数値計算例として, ナフタレンの酸化反応をとりあげた.

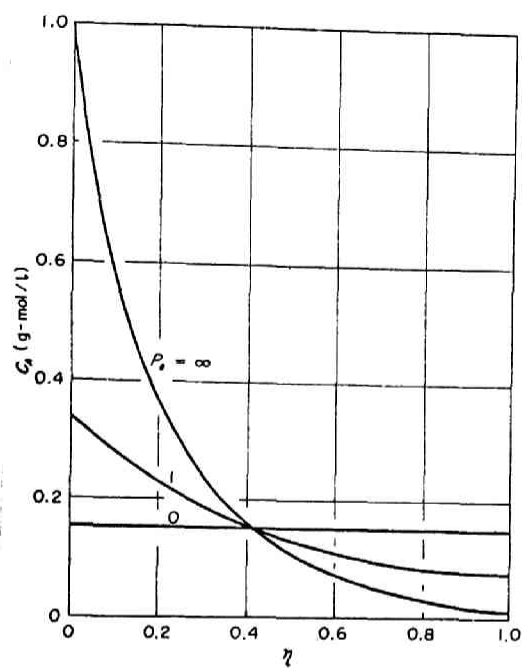


Fig. III-16 Optimal concentration profile of  $C_A$

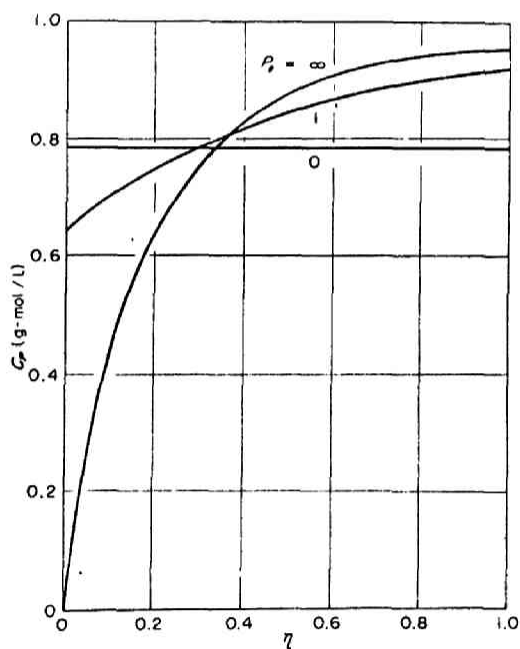


Fig. III-17 Optimal concentration profile of  $C_P$

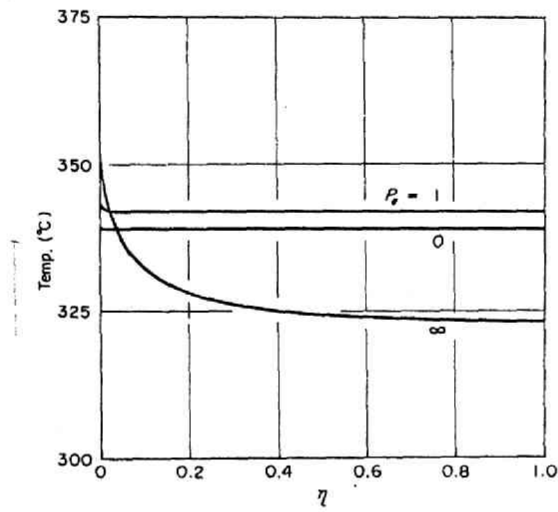


Fig. III-18 Optimal temperature profile

この酸化反応に関しては、いろいろな反応速度式が提出されているが、ここでは Demaria, Longfield & Butler<sup>36,37)</sup>による反応速度式を用いる。彼らは  
 ナフタレン(A) → 無水フタル酸(P) → 燃焼生成物(X)  
 になることを示し、次のようなデータをえている。

$$\begin{aligned}
 E_1 &= 21,200.0 \text{ cal/g-mol} & E_2 &= 46,500.0 \text{ cal/g-mol} \\
 k_{10} &= 13.0 \times \exp(E_1/770.0R) & k_{20} &= 13.0 \times \exp(E_2/770.0R) \\
 C_{A0} &= 1.0 \text{ g-mol/l} & \tau &= 15.0 \text{ (sec)}
 \end{aligned}$$

これらの数値を用いて(III-185)~(III-191)式で定式化された問題を解き、 $Pe$ 数をパラメーターとして反応管内の反応物質Aの最適濃度分布を示したのがFig. III-16であり、目的生成物Pの最適濃度分布を示したのがFig. III-17である。また管内の最適温度分布はFig. III-18に示されている。Fig. III-17に示されているように、目的生成物C<sub>p</sub>の濃度は反応管出口において $Pe = \infty$ と $Pe = 0$ とでは約17%の差がある。しかし $Pe = \infty$ と $Pe = 1$ とではその差は約3%程度しかない。従って、管内の最適温度分布が維持されているという仮定の下では、管内の流体の流れがピストン流れから相当ずれていても、反応管出口における目的生成物の濃度C<sub>p</sub>はそれほど低下しないことを示している。またFig. III-18に示されている管内最適温度分布は濃度分布の場合とは逆に、 $Pe = 1$ の場合は $Pe = 0$ (完全混合)の最適温度分布に近くなる。また全体的な傾向は、通常の2次反応の場合と同様、管の入口付近で高く、出口に近づくにつれて低くなる。また $Pe = \infty$ の場合でも、その最適温度分布は余り大きい変化がなく、自触媒反応の場合のような特異な温度分布は現われない。

### 5) まとめ

管型反応装置の最適温度制御や最適設計においては、従来から管内流体流れはピストン流れという仮定が用いられてきたが、実際の装置では管内流れがそのような理想的な状態に維持されることはなく、なんらかの混合が起こっていることは明らかである。しかしこのような流体混合を最適温度制御、あるいは最適設計を行なっていく場合に、果して考慮する必要があるのか、あるいは従来の管内の流れはピストン

流れという仮定で十分なのかどうかを調べるため、ここでは2次可逆発熱反応、自触媒反応、逐次反応の3種類の反応系をとりあげて、数多くの数値計算を行ない、反応管内の流体混合の指標である $Pe$ 数の変化が、管内の最適温度分布や濃度分布にいかなる影響を与えるかについて考察した。その結果、2次可逆発熱反応と逐次反応の場合には、最適温度分布のパターンそのものには大した影響はないが、自触媒反応の場合には、反応次数や初期濃度によっては流体混合の程度によって、パターンそのものも大きく変わることが明らかになった。従って、自触媒反応の場合には、反応次数や反応物質の初期濃度を適確に知ることは無論のこと、管内の流体混合の状態を良く把握することなしに最適温度制御を有効に行なうことは不可能であることが明らかとなった。また、2次可逆発熱反応、逐次反応の場合も、それほど大きい影響はうけないにしても、出口転化率の上昇に非常にウェイトをおく場合には、最適温度制御を考える際に流体混合を考慮する必要があると思われる。

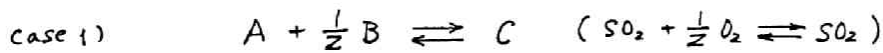
## 2-4-2. 固定床管式反応器の最適触媒量とその感度解析的考察

固定床管型反応器を用い、断熱条件下で種々の触媒反応を行なわせる場合に、最も少ない触媒量で所定の転化率を得るには、反応器入口温度をいかに設定すればよいかという最適化問題も古くから研究されている。<sup>40,41,42,43,44)</sup>しかしこの種の最適化においては、モデル中のパラメーターあるいは反応速度式中の反応速度パラメーターは、正しく真の値が求められており、その操作にも何ら変化はないという仮定のもとに解を求めている。従ってその仮定のもとで得られた解を、実際のプロセスプラントに適用しようとする場合には、反応速度式中のパラメーターを求めるときに含まれてくる誤差、あるいは操作パラメーターの不測の変化が、その最適状態にどの程度の影響を及ぼすのかということを知ること、すなわち感度解析を行なうことが必要になってくる。本節では、2つの触媒反応を断熱型の固定床管型反応器で行なわせる場合をとりあげ、すでに§III-2で述べた Tomovic<sup>1)</sup>型の感度係数を用いて、反応速度パラメーターや操作パラメーターの変動の影響を調べ、どのパラメーターの誤差や変動が反応器出口転化率に最も大きな影響を及ぼすかについて考察を加えた。<sup>45)</sup>

### 1) 基礎式および反応速度式

#### 基礎式

ここでとりあげた反応系は



で表わされる可逆発熱の触媒反応であり、具体的には (Case 1) は亜硫酸ガスの酸化反応、(Case 2) はエチレンの塩化水素添加によるエチレンクロライドの生成反応である。

上記の反応を断熱型の固定床管型反応器で行なわせるとき、管内流れはピ

ストン流れであると仮定し、着目成分 A の転化率を次式で定義する。

$$x = \frac{N_0 a_0 - N a}{N_0 a_0} \quad (\text{III-192})$$

ここに  $N, a$  はそれぞれ管内任意断面でのモル流量 およびモル分率を示し、添字  $0$  は管入口のそれを示している。さらに管内での温度変化による体積変化および反応に伴う体積変化を無視し、断面方向の温度分布は一様であると仮定すると、反応器内任意断面における物質収支式、熱収支式は着目成分 A に関してそれぞれ (III-193, 194) 式となる。

$$\text{物質収支式} \quad \frac{N_0 a_0}{S_p} \cdot \frac{dx}{dt} = r_A(x, T) \quad (\text{III-193})$$

$$\text{熱収支式} \quad T = \frac{a_0(-\Delta H)}{C_p}(x-x_0) + T_0 \quad (\text{III-194})$$

(III-193, 194) 式における記号は次のようなものである。

$S$	: 管断面積	$\rho$	: 触媒充填密度
$r_A(x, T)$	: 反応速度	$T$	: 任意断面温度
$C_p$	: ガス平均比熱	$T_0$	: 反応器入口温度
$(-\Delta H)$	: 発熱量 (A 成分単位モル当り)		

断面積、触媒充填密度は長さ方向に一定であるとする。触媒量 ( $S \rho$ ) は触媒層高さ  $L$  で代表させることができる。出口転化率  $x_{out}$  を所定の値に固定したとき、それを達成するのに必要な触媒層高さ " $L$ " は (III-193, 194) 式より次式のようになる。

$$L = \frac{N_0 a_0}{S_p} \int_{x_0}^{x_{out}} \frac{dx}{r_A(x, T)} = \frac{N_0 a_0}{S_p} \int_{x_0}^{x_{out}} \frac{dx}{r_A(x, T(x, T_0))} \quad (\text{III-195})$$

従って所定の  $x_{out}$  を得るために必要な触媒量を最小にする最適入口温度は (III-195) 式を  $T_0$  で微分することにより容易に求めることができる。

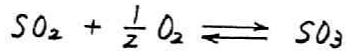
$$\frac{dL}{dT_0} = - \frac{N_0 a_0}{S_p} \int_{x_0}^{x_{out}} \frac{1}{r_A(x, T)^2} \cdot \frac{d}{dT_0} (r_A(x, T)) dx \quad (\text{III-196})$$

$dL/dT_0 = 0$  を満たす最適入口温度は、実際には最大傾斜法により求まり、またそのときの所要触媒層高さは、求めた  $T_0$  を (III-195) に代入することにより求まる。

## 反応速度式

実際例として2つの触媒反応をとりあげたが、これらの反応系に対してすでに Calderbank, Thodos 等により反応速度式が与えられている。

Case 1) 亜硫酸ガスの酸化反応



この反応は可逆発熱反応であり、 $\text{SO}_3$ の生成速度したがって $\text{SO}_2$ の消費速度に関する速度式として Calderbank<sup>46)</sup>により、吸着理論から出発した次式が与えられている。

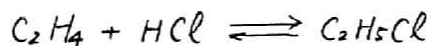
$$r_A(x, T) = \exp\left(-\frac{A}{R(T+273)} + B\right) p_a p_a^{\frac{1}{2}} - \exp\left(-\frac{C}{R(T+273)} + D\right) p_c p_b^{\frac{1}{2}} p_a^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{III-197})$$

上式中の  $p_a, p_b, p_c$  はそれぞれ  $\text{SO}_2, \text{O}_2, \text{SO}_3$  の分圧を気圧の単位で表わしたものであり、転化率  $x$  の関数として次式のように表わされる。

$$\left. \begin{aligned} p_a &= \frac{P_0 a_0 (1-x)}{1 - \frac{1}{2} a_0 x} \\ p_b &= \frac{P_0 (b_0 - \frac{1}{2} a_0 x)}{1 - \frac{1}{2} a_0 x} \\ p_c &= \frac{P_0 a_0 x}{1 - \frac{1}{2} a_0 x} \end{aligned} \right\} \quad (\text{III-198})$$

上式で  $P_0$  は初期全圧、 $a_0, b_0$  はそれぞれ触媒層入口における  $\text{SO}_2, \text{O}_2$  のモル分率であり、また  $A, C$  はそれぞれ正反応、逆反応の活性化エネルギーを表わし、 $B, D$  はそれぞれ正反応、逆反応の頻度因子を表わしている。

Case 2) エチレンの塩化水素添加によるエチレンフロライドの生成反応



可逆発熱反応であるこの反応のエチレンフロライドの生成に関する速度式としては触媒の表面における表面反応が律速段階であるとする Hougen-Watson 型の反応速度式が Thodos, Stutzman<sup>47)</sup> により次式のように求められている。



$$r_A(x, T) = \frac{k(P_a P_b - P_c / K)}{1 + K_a P_a + K_b P_b + K_c P_c + K_d P_d} \quad (\text{III-199})$$

上式で  $k$  は触媒の活性度に関係する反応速度定数  $K$  は反応の平衡定数、 $K_a, K_b, K_c, K_d$  はそれぞれ  $C_2H_4, HCl, C_2H_5Cl, \text{inert gas}$  としての  $CH_4$  が触媒へ吸着される際の吸着平衡定数であり、それらは温度の関数として次式で示される。

$$\left. \begin{aligned} k &= \exp\left(\frac{E}{T_R} + EF\right) \\ K &= \exp\left(\frac{G}{T_R} + GF\right) \\ K_a &= \exp\left(\frac{A}{T_R} + AF\right) \\ K_b &= \exp\left(\frac{B}{T_R} + BF\right) \\ K_c &= \exp\left(\frac{C}{T_R} + CF\right) \\ K_d &= \exp\left(\frac{D}{T_R} + DF\right) \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-200})$$

ただし  $T_R$  はランキン単位の温度を示す。

また  $P_a, P_b, P_c, P_d$  は各成分の分圧を気圧の単位で表わしたものであり、転化率  $x$  と次式のような関係にある。

$$\left. \begin{aligned} P_a &= \frac{P_0 a_0 (1-x)}{1-a_0 x} \\ P_b &= \frac{P_0 (b_0 - a_0 x)}{1-a_0 x} \\ P_c &= \frac{P_0 a_0 x}{1-a_0 x} \\ P_d &= \frac{P_0 d_0}{1-a_0 x} \end{aligned} \right\} \quad (\text{III-201})$$

上式で  $P_0$  は初期全圧  $a_0, b_0, d_0$  はそれぞれ反応器入口での  $C_2H_4, HCl$

CH<sub>4</sub>のモル分率である。

## 2) 感度解析

1) で述べたように所定の転化率を得るために必要な触媒量を最小にする反応器入口温度は 容易に(II-195, 196)式より求めることができる。これらの式に含まれているパラメーターには大別して次の2種類のものがあるがいずれも誤差を含みうるものである。一つは流量、原料組成などの操作パラメーターであり 今一つは反応速度式に含まれる頻度因子、活性化エネルギーなどの反応速度パラメーターである。操作パラメーターは最適化問題を考える際には、普通の場合、確定的な量として扱っているが 実際には操業中に変化しうるものであるし また必ずしも一定に保ちえない量である。反応速度パラメーターについても、種々の実験により求められるのであるが その際に当然誤差が含まれると考えられる。このように最適化を行なう段階では、一定と考えているパラメーターも、実際には ある範囲で変動するものであると考えねばならない。従って単に数学的に最適解を算出しただけでは、実際的な観点からすれば十分ではなく それらのパラメーター変化が最適な触媒量、最適な入口温度で運転されているプラントにいかなる影響を与えるのか、すなわち反応器出口転化率は 所定のものよりどの程度変化してくるのかを知るが必要になってくる。ここでは種々のパラメーター変動が触媒層出口転化率  $x_{out}$  にどの程度の変化を与えるものであるかを、Tomovic<sup>(1), (48)</sup>によって導入された感度係数を用いて解析した。

一般に任意のパラメーターの基準の値を  $q$  で表わすとき 触媒層内の任意断面  $l$  における転化率を  $x(l, q)$  で表わし パラメーターが基準の値から  $\Delta q$  だけ変動したときの、任意断面の転化率を  $x(l, q + \Delta q)$  で表わすことにする。このとき両者の差、すなわち任意断面  $l$  における転化率の変動量  $\Delta x(l, q)$  は

$$\Delta x(l, q) = x(l, q + \Delta q) - x(l, q) = \left. \frac{\partial x}{\partial q} \right|_q \Delta q + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 x}{\partial q^2} \right|_q (\Delta q)^2 + \dots \quad (\text{II-202})$$

で表わされる。ここでパラメーターの変動量  $\Delta q$  が小さいとし、高次の微小量を無視すると

$$\Delta x(l, \varphi) = \left. \frac{\partial x}{\partial \varphi} \right|_{\varphi} \cdot \Delta \varphi \quad (\text{III-203})$$

で  $\Delta x(l, \varphi)$  は近似される。この係数  $\frac{\partial x}{\partial \varphi}$  が III-2 で述べた感度係数なのである。今、

$$\frac{\partial x}{\partial \varphi} = y \quad (\text{III-204})$$

とおくと、この関数  $y$  の満たす微分方程式は次のようにして得られる。すなわち (III-193, 194) 式より プロセス方程式は

$$\frac{dx}{dl} = \frac{S_p}{N_0 a_0} \cdot Y_A(x, T(x, T_0)) = f(x, T, \varphi) \quad (\text{III-205})$$

となり、これを  $\varphi$  について偏微分することにより、(III-204) 式の感度係数の満たす微分方程式、すなわち感度方程式は

$$\frac{dy}{dl} = \frac{\partial f}{\partial x} y + \frac{\partial f}{\partial \varphi} \quad (\text{III-206})$$

と得られる。ここに  $\frac{\partial f}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial f}{\partial \varphi}$  はパラメーターの基準の値に対して評価される。また (III-206) 式の初期条件は (III-205) 式の初期条件、すなわち反応器入口転化率は、他のパラメーター変動の影響をうけないことから、一般に

$$y(0) = 0 \quad (\text{III-207})$$

である。この (III-206, 207) 式で表わされる感度方程式を解くことによって、パラメーター  $\varphi$  の微小変動  $\Delta \varphi$  が出口転化率に与える影響は

$$\Delta x_{out} = y(L) \Delta \varphi \quad (\text{III-208})$$

によって与えられるのがわかる。

### ㉓ 数値計算結果および考察

Case 1 Case 2 について数値計算に用いたパラメーターの基準の値を、Table III-1, Table III-2 に示してある。Case 1 ( $\text{SO}_2$  の酸化反応)、Case 2 ( $\text{C}_2\text{H}_4$  の HCl 添加反応) それぞれの場合の平衡曲線および反応速度を最大にする転化率  $x$  と 反応温度  $T$  との軌跡 (理想反応操作線) を、縦軸に温度、横軸に転化率をとって、前者を実線で、後者を点線で図示したのが、Fig III-19, Fig III-20 である。また反応器出口転化率を Case 1 の場合 0.8

Name of Parameter	Nominal Value	Name of Parameter	Nominal Value
<i>A</i>	31,000.0 cal/moles SO <sub>2</sub>	<i>N</i> <sub>0</sub>	73.841 mole/sec
<i>B</i>	12.07	<i>c</i> <sub>p</sub>	7.22 cal/mole °C
<i>C</i>	53,600.0 cal/moles SO <sub>2</sub>	<i>ρ</i>	0.6 gr/cm <sup>3</sup>
<i>D</i>	22.75	<i>S</i>	3,900.0 cm <sup>2</sup>
(-Δ <i>H</i> )	22,600.0 cal/moles SO <sub>2</sub>	<i>x</i> <sub>0</sub>	0.00
<i>a</i> <sub>0</sub>	0.08	<i>x</i> <sub>out</sub>	0.80
<i>b</i> <sub>0</sub>	0.184		

Table III-1 Nominal value of parameter  
for  $\text{SO}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{SO}_3$

Name of Parameter	Nominal Value	Name of Parameter	Nominal Value
<i>E</i>	-11 778.0 °R	<i>DF</i>	3.833
<i>EF</i>	15.211	(-Δ <i>H</i> )	5,812.0 cal/mole C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
<i>G</i>	5,265.0 °R	<i>N</i> <sub>0</sub>	1.0 lbmole/hr
<i>GF</i>	- 4.96	<i>a</i> <sub>0</sub>	0.101
<i>A</i>	- 7,026.0 °R	<i>b</i> <sub>0</sub>	0.101
<i>AF</i>	10.108	<i>d</i> <sub>0</sub>	0.798
<i>B</i>	- 8,037.0 °R	<i>c</i> <sub>p</sub>	9.6 cal/mole °C
<i>BF</i>	11.456	<i>S</i>	0.01 lb/m <sup>3</sup>
<i>C</i>	- 5,060.0 °R	<i>ρ</i>	1,323.0 lb/m <sup>3</sup>
<i>CF</i>	7.809	<i>x</i> <sub>0</sub>	0.0
<i>D</i>	- 2,829.0 °R <sup>-1</sup>	<i>x</i> <sub>out</sub>	0.55

°R : ランキン温度

Table III-2 Nominal value of parameter  
for  $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{HCl} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$

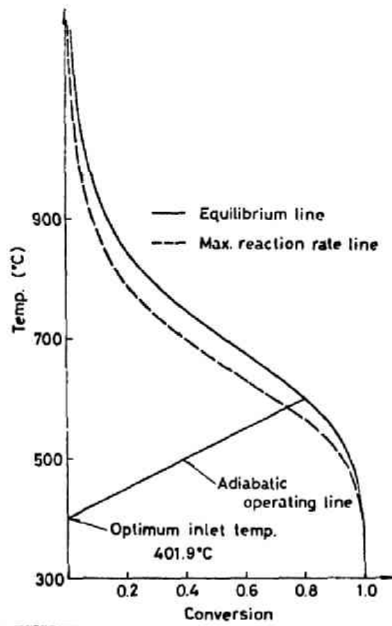


Fig. III-19 Adiabatic operating line  
for  $\text{SO}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{SO}_3$

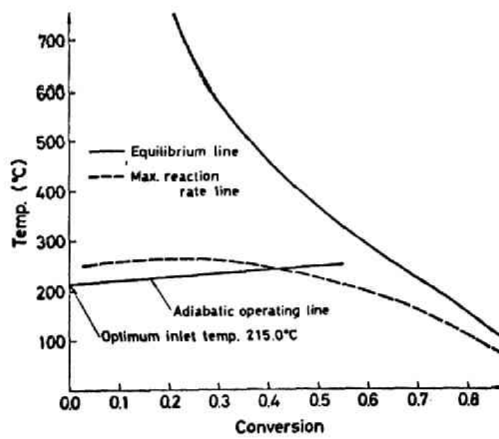


Fig. III-20 Adiabatic operating line  
for  $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{HCl} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$

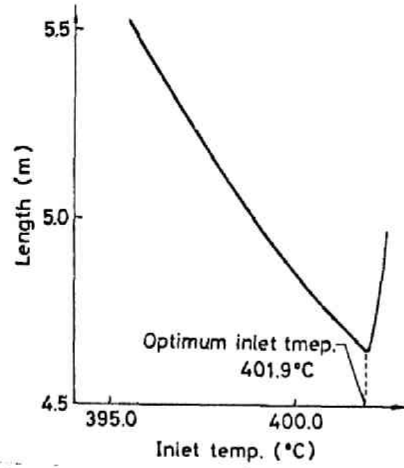


Fig. III-21 Catalyst bed length vs. inlet temperature for  $\text{SO}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{SO}_3$

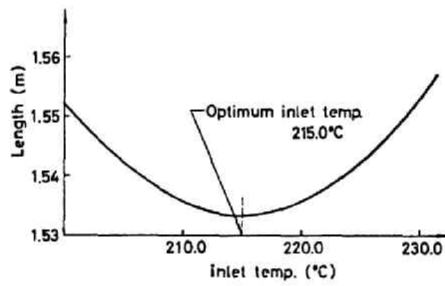


Fig. III-22 Catalyst bed length vs. inlet temperature for  $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{HCl} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$

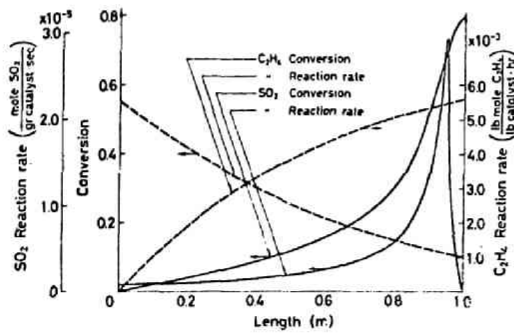


Fig. III-23 Conversion and rate profile in catalyst bed

Case 2 の場合 0.55 と規定したとき この転化率を得るために必要な最小触媒量と最適入口温度とを (Ⅲ-195, Ⅲ-196) 式より求めた結果を示すのが Fig. Ⅲ-21, Ⅲ-22 の最小値を与える点である。Fig. Ⅲ-21 に示されている Case 1 の  $\text{SO}_2$  の酸化反応の場合には 入口温度が最適値  $401.9^\circ\text{C}$  (その時の触媒層高さは  $465.6\text{cm}$ ) からずれると 所与の転化率をうるために必要な触媒量は急激に増大することがわかる。また Case 2 の場合には 入口温度が最適値  $215.0^\circ\text{C}$  (その時の触媒層高さは  $153.4\text{cm}$ ) より少々ずれても所要触媒量は大きく増加しない。Case 1, Case 2 のそれぞれの場合の断熱操作線が Fig. Ⅲ-19, Fig. Ⅲ-20 に示されている直線であり 反応器内で流体温度は直線的に上昇していく。またこの断熱操作線にそって すなわち最適入口温度で操作されたとき 触媒層内の各高さにおける反応速度と転化率の変化の様子を Case 1 の場合を実線で Case 2 の場合を点線で示したのが Fig. Ⅲ-23 である。Case 1 の  $\text{SO}_2$  の酸化反応の場合には 触媒層出口付近で反応速度が最大になり 転化率の上昇も出口に近づくにつれて急になる。一方 Case 2 のエチレンの塩化水素添加反応の場合には 反応速度は入口付近で最も高く 触媒層出口に向かって単調に小さくなり 転化率はゆるやかに上昇していく。

以上で Case 1, Case 2 の2つの触媒反応を断熱型の管型反応器で行なわせる場合に 所定転化率を得るために必要な 最小触媒量と最適入口温度とが 1) に述べた方法で容易に決定できることが示された。次にこのように最適設計された反応器で 種々のパラメーターが変動するものとするとき 反応器出口転化率は 所定の転化率からどの程度低下するか またいずれのパラメーター変動が最も大きい影響を出口転化率に与えるかについて 2) で述べた方法により 解析した結果を示す。ここでは最適操作だけでなく 最適でない操作 すなわち入口温度を最適入口温度にしないで 所定の転化率を得るように設計された反応器についての感度解析の結果も併せて記した。

Case 1 ( $\text{SO}_2$  の酸化反応の場合)

パラメーター変動としては A (正反応の活性化エネルギー), B (正反応の頻度因子), C (逆反応の活性化エネルギー), D (逆反応の頻度因子)。

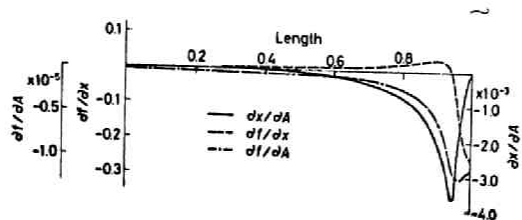


Fig. III-24 Profile of sensitivity coefficient  $\frac{\partial x}{\partial A}$  for  $\text{SO}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{SO}_3$

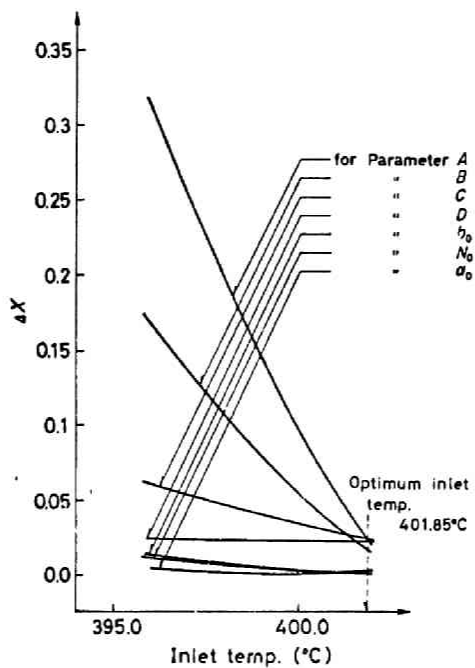


Fig. III-25 Effect on outlet conversion by 1% perturbation of parameter vs. inlet temperature for  $\text{SO}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{SO}_3$



$N_0$  (原料モル流量)  $a_0$  (原料中の  $SO_2$  のモル分率),  $b_0$  (原料中の  $O_2$  のモル分率), の7種類を考えた。それぞれのパラメーターが Table III-1 に示された基準の値から1%の変動をうけたときの出口転化率の変動は、2) で述べた(III-206)を解くことにより(III-208)式のように与えられる。まず(III-206)式の解の挙動を示すために、一例として正反応の活性化エネルギー  $A$  に対する感度係数  $\frac{\partial x}{\partial A}$  について、(III-206)式を解いた結果を示すのが Fig. III-24 の実線である。感度係数そのものは、触媒層内の位置によってかなり大きく変動し、パラメーター変動の影響は触媒層内の位置によってかなり変化するものであることがわかる。また Fig. III-25 に、所定転化率を0.8と固定し、入口温度を任意に設定したとき(このとき必要な触媒層高さは Fig. III-21 に示されている) 出口転化率が上述した7種類のパラメーターの1%変動によって受ける影響を図示してある。入口温度が最適入口温度より低くなるにつれて、パラメーター変動によって受ける出口転化率の影響は、パラメーター  $A, B, C$  の3種類については著しく大きくなる。一方、最適入口温度に対しては、いずれのパラメーター変動の影響もかなり小さなものであることがわかる。このことは  $SO_2$  の酸化反応については、入口温度を最適入口温度に設定しておくことは、所要触媒量が最小になるだけでなく、パラメーター変動の影響を受けにくい、いわゆる *insensitive* な操作にもなっていることを示している。なお入口温度を最適入口温度よりも高く設定することは、触媒層出口の状態が平衡状態にきわめて近づくため、所定の出口転化率を得るための所要触媒量が Fig. III-21 にみられるように急激に増大し、操作としては好ましくない。

## Case 2 エチレンの塩化水素添加反応の場合

パラメーター変動としては、反応速度パラメーターとして、反応速度定数、反応平衡定数、吸着平衡定数の中にそれぞれ(III-200)式のような形で含まれる12種類のパラメーター、および操作パラメーターとして  $N_0$  (原料のモル流量),  $a_0$  (原料の  $C_2H_4$  のモル分率),  $b_0$  (原料の  $HCl$  のモル分率),  $d_0$  (原料の  $CH_4$  のモル分率),  $C_p$  (ガス平均比熱) の5種類の合計17種類のパラメーターを考えた。Case 1 と同様に、それぞれのパラメーターの基準の値が、

Table III-2 に示した値から 1% 変動したとき 触媒層出口転化率がいか程の変動を受けるかを調べた。一例として パラメーター E に対する感度係数  $\frac{\partial x}{\partial E}$  の挙動を (III-206) 式を解いて図示したのが Fig III-26 である。この感度係数の触媒層内の変化は 比較的ゆるやかで 層内のどの位置でもそれほど大きな相違は存在しない。また所定転化率を 0.55 と固定して、入口温度を最適入口温度より任意に変化させたとき (このときの所要触媒層高さは Fig III-22 に示されている) 各パラメーターの変動によって、出口転化率の受ける影響の大きさを図示したのが Fig III-27 である。入口温度が最適値より高くなっても、低くなっても パラメーター変動によって受ける出口転化率の影響は  $SO_2$  の酸化反応の場合と異なり いずれのパラメーターに対しても急激な変化はない。またパラメーターの内でも 反応速度定数に含まれるパラメーター E, EF の 2 種類の変動のみが大きな影響力を持ち、他のパラメーター変動の影響はかなり小さなものである。この反応では Case 1 の場合と異なり、入口温度を最適値に設定するのが 特に *insensitive* な操作になっていて好ましいとはいえない。反応系そのものがパラメーター変動に対して余り影響を受けにくいようである。

以上の結果からみると Case 1, Case 2 のいずれの反応においても、パラメーター変動としては 反応速度パラメーターの方が出口転化率に大きな影響を及ぼしていることがわかる。

しかし 2) で示した感度係数を用いる方法は、パラメーターの微小変動に対する影響の一次近似を調べる方法であることを考えると、はたして (III-208) 式のように出口転化率の変動を求めることは どの程度のパラメーター変動の大きさまで許されるのかが問題になる。そこで一例として Case 2 のパラメーター E が変化したときの各値に対して 入口温度を最適値で操作したときの出口転化率を (III-193) 式より求め、さらに (III-206, 207, 208) 式の感度係数を用いて求めたものとの比較を示したのが Fig III-28 である。このパラメーター変動に対しては (III-206) ~ (III-208) 式を解いて得た解が非常に良い近似を与えていることがわかるが、一般に感度係数を用いた方法で十分であるとは結論できず、特にパラメーターの大きい変動<sup>3)</sup> に対しての研究が今後ますます必要になると思われる。

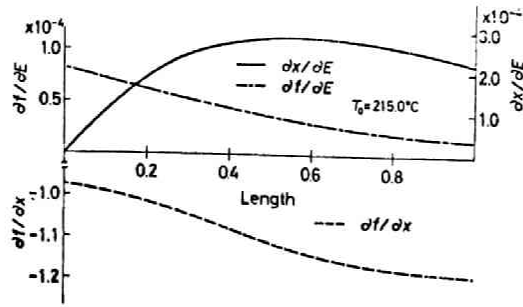


Fig. III-26 Profile of sensitivity coefficient  $\frac{\partial x}{\partial E}$  for  $C_2H_4 + HCl \rightleftharpoons C_2H_5Cl$

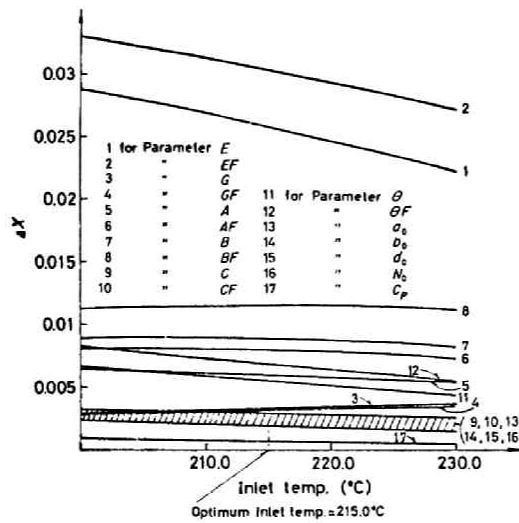


Fig. III-27 Effect on outlet conversion by 1% perturbation of parameter vs. inlet temperature for  $C_2H_4 + HCl \rightleftharpoons C_2H_5Cl$

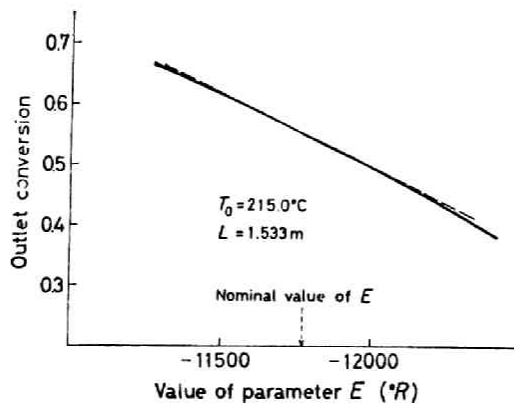


Fig. III-28 Outlet conversion for perturbed parameter E  
 $C_2H_4 + HCl \rightleftharpoons C_2H_5Cl$

(Slope of dotted line is value of sensitivity coefficient  $\frac{\partial x}{\partial E}$ )

#### 4) まとめ

ここでは2つの反応系を例にとり、断熱操作のもとで所要転化率をうるに必要な触媒量を最小にする最適な入口温度を求める最適化問題と取りあげ、同時に種々のパラメータ変動が出口転化率に及ぼす影響をTomovic型の感度係数を用いて解析した。その結果、パラメータとしては、反応速度パラメータの影響が最も大きく、またその影響の仕方も反応系の反応速度式に大きく左右されることがわかった。感度係数および感度方程式を有効に利用することによって、化学プロセスの最適化に附随する種々の感度解析的な問題を容易に処理でき、またある程度の情報をうることができることが明らかとなった。

### 2-4-3 二通路自己熱交換型反応器の最適化

管型反応器の最適設計操作の問題は Bilous & Amundson,<sup>28)</sup> Aris<sup>20)</sup> 等によって 反応管の長さ方向の最適温度分布という観点から論じられてきた。しかしこの最適温度分布を実際の反応プロセスにおいていかにして実現するかが非常に難しい問題となっている。そのために次節においてこの理想的な状態により近づける一方法としての外部冷却方法について考察していく。本節では実際の反応プロセスで 反応熱を有効に利用するという観点から、しばしば使用されている二通路自己熱型反応器をとりあげ<sup>49,50)</sup> この反応器の最適設計操作の問題を考察する。

自己熱交換型反応器とは Fig. III-29 に示すような反応器であって 温度が反応熱のみによって維持される発熱反応の化学反応を行なわせるために使われる反応器である。これは予熱されたガスが 沢山の予熱側の小さな管内を上昇し その間に触媒層での化学反応によって発生した熱を吸収する。一方反応器の頂部では 反応に十分な温度にまで達した反応ガスが その方向を逆転し 反応が起こっている触媒層の方へ下降するわけである。

このような自己熱交換型反応器を用いて アンモニアの合成反応を行なわせた場合の安定性については Van Heerden,<sup>51)</sup> C., Baddour,<sup>52)</sup> 井上,<sup>53,54)</sup> 等の研究があるが、ここでは Fig. III-29 に示すような反応器で  $SO_2$  の酸化反応を行なわせるプロセスを考え 触媒層出口転化率を最大にする最適操作について考察した。種々のパラメータの変化に対して 最適操作がどのような影響を受けるか また安定性との関係はどのようになるかを知ることは 最適操作を行なう上においても非常に重要な問題であるが 従来はこの問題については十分に研究されておらず その方法も Baddour<sup>52)</sup> の論文にみられるように 数多くの数値計算をくり返して調べていた。ここでは一つの方法として 最適操作量を求める時に用いる adjoint system<sup>55,56,57)</sup> を利用することによって ある程度の情報をうる点についても考察した。

### 1) 基礎式および反応速度式

SO<sub>2</sub>のV<sub>2</sub>O<sub>5</sub>触媒による酸化反応を例にとりて二通路自己熱交換型反応器の解析を行なう。この反応器の略図をFig. III-29に示す。

反応器の長さの関数として 温度と転化率を関係づける方程式は 物質収支および熱収支から導かれる。反応器を流れるガスはピストン流れであってかつ半径方向に温度分布がないという仮定のもとに これらの方程式が求められる。さらに反応ガスのモル分率が小さいから、反応による容積変化は無視しうるものとする。二通路自己熱交換型反応器に対しては 次のプロセス方程式(III-209)と(III-211)式が導かれる。

予熱側ガスの熱収支式

$$\frac{dT}{dz} = - \frac{1}{1-f} \cdot \frac{U \cdot A}{\phi \cdot C_g} \cdot (T'(z) - T(z)) \quad (\text{III-209})$$

触媒層内ガスの熱収支式

$$\frac{dT'}{dz} = \frac{a(-\Delta H)}{C_g} \cdot \frac{d\tilde{s}_A}{dz} - \frac{U \cdot A}{\phi C_g} (T'(z) - T(z)) \quad (\text{III-210})$$

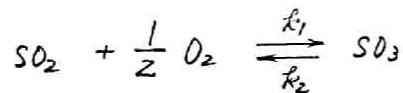
触媒層ガスの物質収支式

$$\frac{d\tilde{s}_A}{dz} = \frac{A_c \rho_B \cdot L}{a \cdot \phi} \gamma_A \quad (\text{III-211})$$

Junction Condition

$$(1-f) \cdot T(0) + f \cdot T(1) = T'(0) \quad (\text{III-212})$$

SO<sub>2</sub>のV<sub>2</sub>O<sub>5</sub>触媒による酸化反応は可逆反応で 次の反応に従う。



この反応の反応速度式 $\gamma_A$ は Calderbank<sup>46)</sup>によって次式のように与えられる。

$$\begin{aligned} \gamma_A &= k_1 \frac{P_a \cdot P_{\text{SO}_2}}{P_{\text{SO}_2}^{1/2}} - k_2 \frac{P_{\text{SO}_3} \cdot P_{\text{O}_2}^{1/2}}{P_{\text{SO}_2}^{1/2}} \\ &= \frac{3.600 \times a^{1/2} \{ k_1 (1-\tilde{s}_A)(b-0.5a\tilde{s}_A) - k_2 \tilde{s}_A (b-0.5a\tilde{s}_A)^{1/2} (1-0.5a\tilde{s}_A)^{1/2} \}}{(1-0.5a\tilde{s}_A)^{3/2} \cdot (1-\tilde{s}_A)^{1/2}} \end{aligned} \quad (\text{III-213})$$

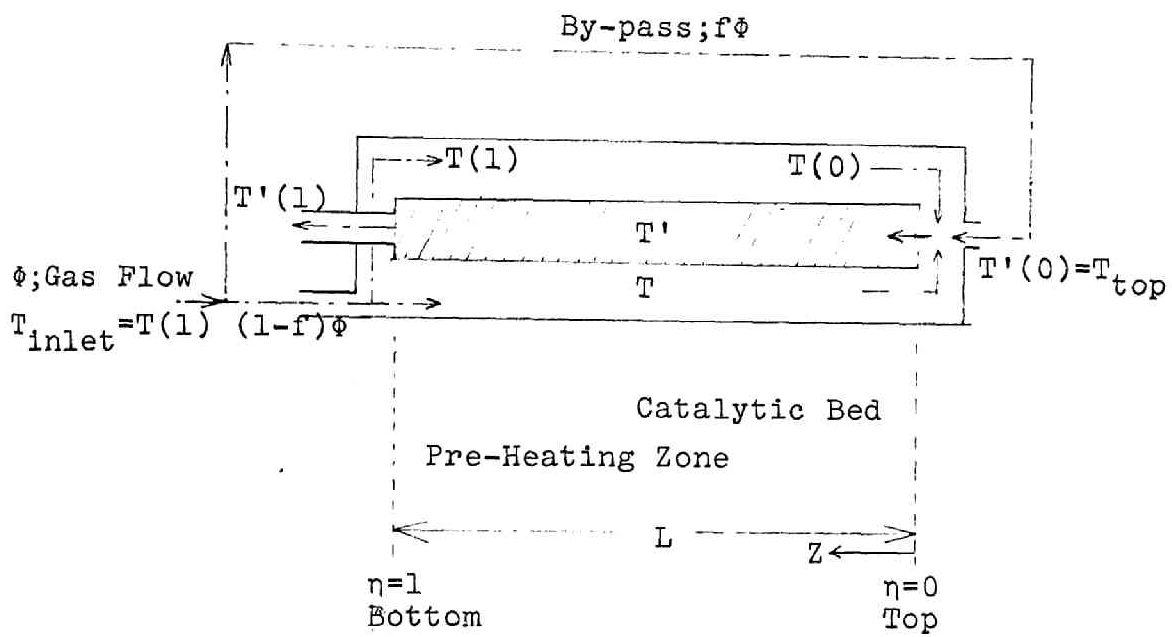


Fig. III-29 Schematic Diagram of a autothermal reactor

ここで  $k_1, k_2$  は反応速度定数であって、次式で与えられる。

$$k_1 = k_{10} \cdot \exp(-E_1/RT') = \exp(12.07 - 31,000/RT') \quad (\text{III-214})$$

$$k_2 = k_{20} \cdot \exp(-E_2/RT') = \exp(2275 - 53,100/RT') \quad (\text{III-215})$$

上記の諸式において使用した記号を Table III-3 に示す。

- 2) 供給ガス流量を一定としたとき 触媒層出口での  
転化率  $\xi(1)$  を最大にする最適操作

まず By-pass の流量  $f\phi = 0$  の場合 最適な触媒層入口ガス温度  $T'(0) = T_{top}$  を求めるために  $T'(0)$  に種々の値を仮定して プロセス方程式 (III-209, 210, 211) を積分し 触媒層出口での転化率  $\xi(1)$  を最大にする  $T'(0)$  を求めた。数値計算を行なう際 使用したデータは Table III-4 に示す。

その結果  $T_{top} = T(0) = 780^\circ(\text{K})$  の時 触媒層出口転化率  $\xi(1) = 0.87058$  に達することがわかった。ここでは  $T'(0)$  の最適値だけでなく 最適操作条件のもとでの転化率および温度分布を求め これを Fig III-30 および Fig III-31 に示した。図の実線がその解である。上記のように  $T'(0)$  に種々の数値を仮定し 試行法によって最適な  $T'(0)$  が求められたわけであるが このような trial and error によらなくても 変分法から  $\lambda_\xi(z), \lambda_T(z), \lambda_T'(z)$  なる新しい補助変数を導入して 次のような汎関数を極値にする  $T'(0)$  を求めればよいことがわかる。すなわち

$$\begin{aligned} J = \xi(1) &+ \int_0^1 \lambda_T(z) \left\{ -\frac{U \cdot A}{\phi \cdot C_g} \cdot (T'(z) - T(z)) - \frac{dT}{dz} \right\} dz \\ &+ \int_0^1 \lambda_T'(z) \left\{ \frac{a \cdot (-\Delta H)}{C_g} \cdot \frac{A_c \rho_B \cdot L}{a \cdot \phi} r_A - \frac{U \cdot A}{\phi \cdot C_g} (T'(z) - T(z)) - \frac{dT'}{dz} \right\} dz \\ &+ \int_0^1 \lambda_\xi(z) \left\{ \frac{A_c \rho_B \cdot L}{a \cdot \phi} r_A - \frac{d\xi}{dz} \right\} dz \end{aligned} \quad (\text{III-216})$$

(III-216)式の第一変分を求めると

$$\delta J = \delta \xi(1) + \int_0^1 \lambda_T \left\{ -\frac{U \cdot A}{\phi \cdot C_g} (\delta T' - \delta T) - \delta \left( \frac{dT}{dz} \right) \right\} dz$$



$\xi_A$	SO <sub>2</sub> の転化率	$U$	総括伝熱係数 (kcal/m <sup>2</sup> hr°C)
$a$	原料ガス中のSO <sub>2</sub> のモル分率	$\rho_B$	触媒層充填密度 (kg/m <sup>3</sup> )
$b$	原料ガス中のO <sub>2</sub> のモル分率	$A$	伝熱面積 (m <sup>2</sup> )
$z$	$z = z/L$ , 触媒層入口より測 た無次元距離	$(-\Delta H)$	反応熱 (kcal/kg-mol)
$f$	By-pass量 $0 \leq f \leq 1$	$A_c$	反応管断面積 (m <sup>2</sup> )
$P_i$	成分 <i>i</i> の分圧	$\Phi$	原料ガス流量 (kg-mol/hr)
$T_{inlet}$	原料ガス温度 (°K)	$r_A$	反応速度 (kg-mol-SO <sub>2</sub> converted/kg-cat hr)
$T_{top}$	触媒層入口温度 (°K)	$T(z)$	$z$ なる位置における 触媒層内のガス温度 (°K)
$T$	予熱側ガス温度 (°K)		
$T'$	触媒層内ガス温度 (°K)		
$L$	反応管の全長 (m)		
$C_g$	触媒層内ガス比熱 (kcal/kg-mol)		

Table III-3 Nomenclature

$a_0 = 0.075$	$U_0 = 20.0$ (kcal/m <sup>2</sup> hr°C)	$A_c = 4.906 \times 10^{-4}$ (m <sup>2</sup> )
$b_0 = 0.1$	$A = 0.0785$ (m <sup>2</sup> )	$\rho_B = 600.0$ (kg/m <sup>3</sup> )
$\Phi_0 = 0.1$ (kg-mol/hr)	$L = 1.0$ (m)	$C_g = 7.11$ (kcal/kg-mol)
	$(-\Delta H) = 22,600$ (kcal/kg-mol)	

Table III-4 Nominal value of parameter

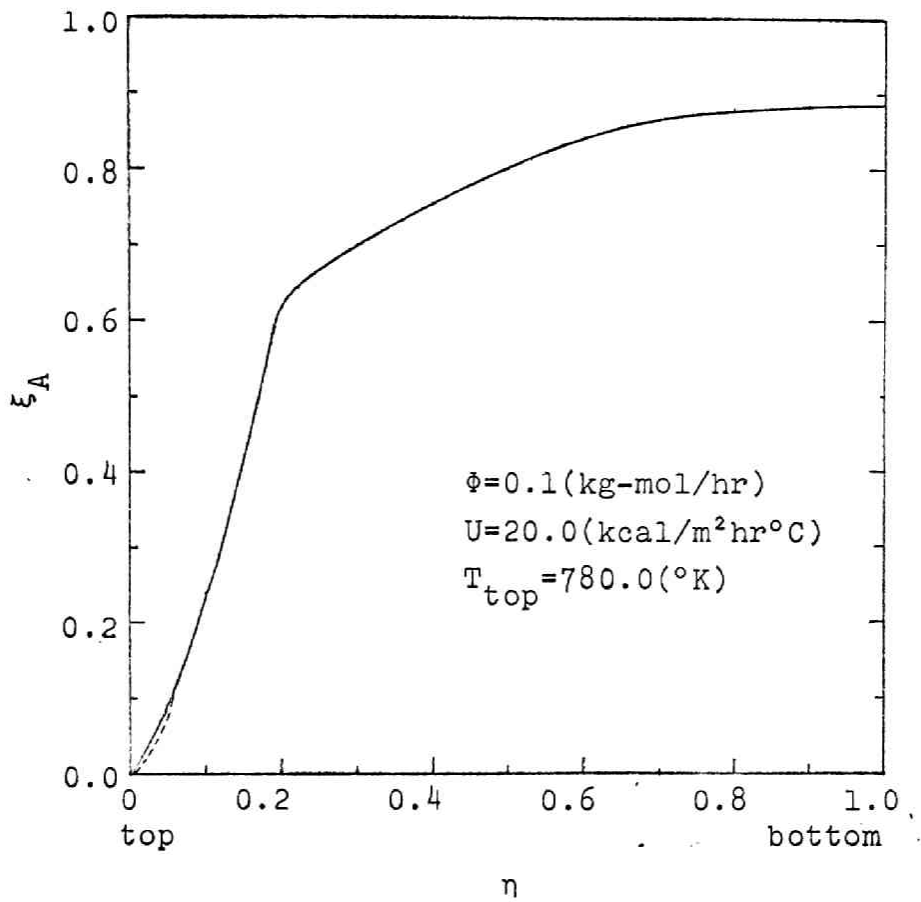


Fig. III-30 Optimal conversion profile  $\xi_A$

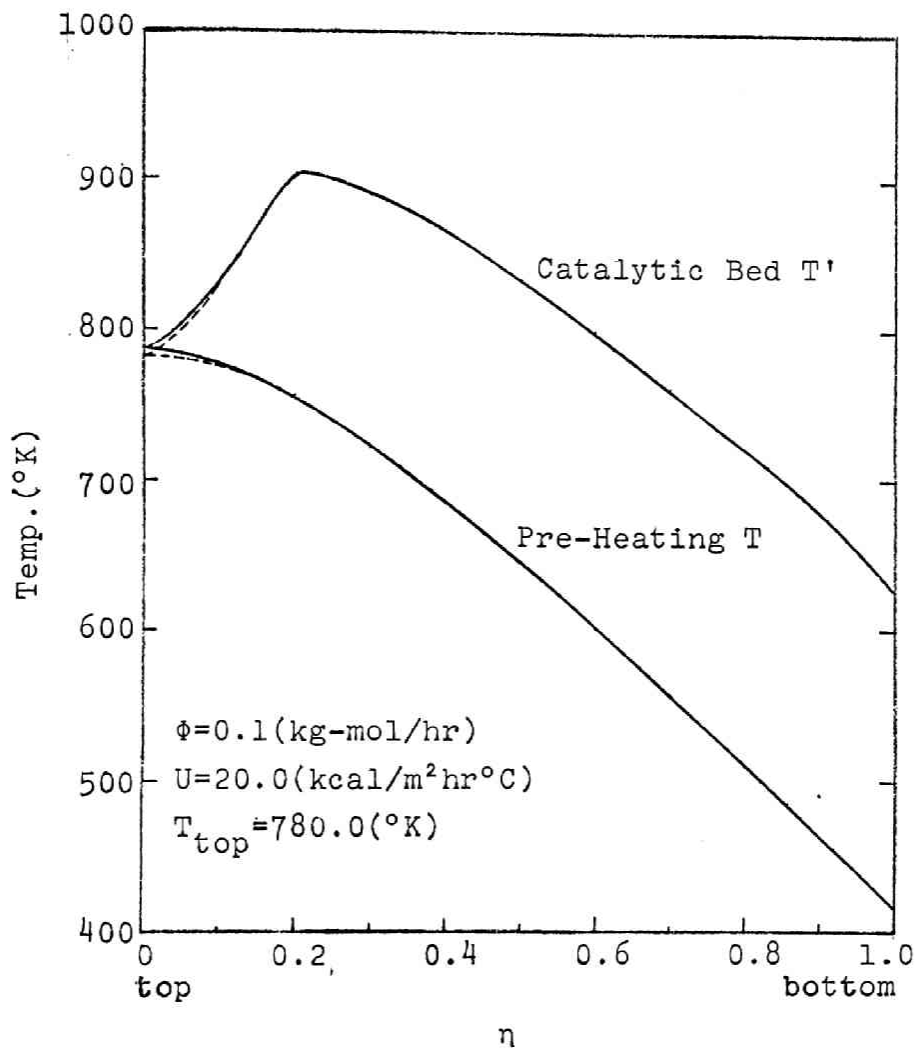


Fig. III-31 Typical temperature profiles

$$\begin{aligned}
& + \int_0^1 \lambda_{T'} \left\{ \frac{a(-\Delta H)}{C_g} \frac{Ac\rho_B L}{a\phi} \delta Y_A - \frac{\sigma A}{\phi C_g} (\delta T' - \delta T) - \delta \left( \frac{dT'}{dz} \right) \right\} dz \\
& + \int_0^1 \lambda_{\xi} \left\{ \frac{Ac\rho_B L}{a\phi} \delta Y_A - \delta \left( \frac{d\xi_A}{dz} \right) \right\} dz \quad (\text{III-217})
\end{aligned}$$

(III-217)式を適当に変形すると、次の(III-218)式をうる。

$$\begin{aligned}
\delta J &= \delta \xi_A(1) - [\lambda_{\xi} \delta \xi_A]_0^1 - [\lambda_T \delta T]_0^1 - [\lambda_{T'} \delta T']_0^1 \\
& + \int_0^1 \left\{ \frac{\sigma A}{\phi C_g} (\lambda_T + \lambda_{T'}) + \frac{d\lambda_T}{dz} \right\} dz + \int_0^1 \left\{ \frac{Ac\rho_B L}{a\phi} \frac{\partial Y_A}{\partial \xi_A} (\lambda_{T'} \frac{a(-\Delta H)}{C_g} + \lambda_{\xi}) + \frac{d\lambda_{\xi}}{dz} \right\} dz \\
& + \int_0^1 \left\{ -\frac{\sigma A}{\phi C_g} (\lambda_T + \lambda_{T'}) + \frac{Ac\rho_B L}{a\phi} \left( \frac{a(-\Delta H)}{C_g} \lambda_{T'} + \lambda_{\xi} \right) \frac{\partial Y_A}{\partial T'} + \frac{d\lambda_{T'}}{dz} \right\} dz \quad (\text{III-218})
\end{aligned}$$

また  $\delta \xi_A(0) = 0$ ,  $\delta T(0) = \delta T'(0)$  であるから結局

$$\begin{aligned}
\delta J &= \delta \xi_A(1) (1 - \lambda_{\xi}(1)) + (\lambda_T(0) + \lambda_{T'}(0)) \delta T(0) - \lambda_T(1) \delta T(1) - \lambda_{T'}(1) \delta T'(1) \\
& + \int_0^1 \left\{ \frac{\sigma A}{\phi C_g} (\lambda_T + \lambda_{T'}) + \frac{d\lambda_T}{dz} \right\} dz + \int_0^1 \left\{ \frac{Ac\rho_B L}{a\phi} \left( \frac{a(-\Delta H)}{C_g} \lambda_{T'} + \lambda_{\xi} \right) \frac{\partial Y_A}{\partial \xi_A} + \frac{d\lambda_{\xi}}{dz} \right\} dz \\
& + \int_0^1 \left\{ -\frac{\sigma A}{\phi C_g} (\lambda_T + \lambda_{T'}) + \frac{Ac\rho_B L}{a\phi} \left( \frac{a(-\Delta H)}{C_g} \lambda_{T'} + \lambda_{\xi} \right) \frac{\partial Y_A}{\partial T'} + \frac{d\lambda_{T'}}{dz} \right\} dz \quad (\text{III-219})
\end{aligned}$$

この(12)式から最適な  $T(0)$  がみだすべき必要条件が次のように求まる。

Adjoint System

$$\frac{d\lambda_T}{dz} = -\frac{\sigma A}{\phi C_g} (\lambda_T + \lambda_{T'}) \quad (\text{III-220})$$

$$\frac{d\lambda_{T'}}{dz} = \frac{\sigma A}{\phi C_g} (\lambda_T + \lambda_{T'}) - \frac{Ac\rho_B L}{a\phi} \left( \frac{a(-\Delta H)}{C_g} \lambda_{T'} + \lambda_{\xi} \right) \frac{\partial Y_A}{\partial T'} \quad (\text{III-221})$$

$$\frac{d\lambda_{\xi}}{dz} = -\frac{Ac\rho_B L}{a\phi} \left( \frac{a(-\Delta H)}{C_g} \lambda_{T'} + \lambda_{\xi} \right) \frac{\partial Y_A}{\partial \xi} \quad (\text{III-222})$$

境界条件

$$\lambda_{\xi}(1) = 1 \quad (\text{III-223})$$

$$\lambda_{T'}(1) = 0 \quad (\text{III-224})$$

$$\lambda_T(1) = 0 \quad (\text{III-225})$$

$$\lambda_T(0) + \lambda_{T'}(0) = 0 \quad (\text{III-226})$$

具体的な計算法はまず  $\xi_A(0) = 0$  触媒層入口温度  $T_{top} = T(0) - T'(0)$  を適当な値に仮定し プロセス方程式(III-209, 210, 211)を触媒層の入口  $\eta = 0$  から触媒層の出口  $\eta = 1$  に向かって解き 次に今求めた  $T(\eta), T'(\eta), \xi_A(\eta)$  を使って Adjoint System の(III-220)~(III-222)式を  $\eta = 1$  から  $\eta = 0$  に向かって境界条件(III-223)~(III-225)式のもとに解き、境界条件(III-236)式を満足すれば最初に仮定した  $T(0) = T'(0)$  の値が正しかったわけであり この  $T(0)$  が  $\xi_A(1)$  を最大にする最適な触媒層入口温度を与える。このような変分法を使って得た最適な  $T(0)$  の値は  $779^\circ(\text{K})$  であり 先程の trial and error によって得た解とよく一致している。比較のため その時の転化率および温度分布を先程の Fig. III-30 および Fig. III-31 の点線によって示す。

### 3) パラメーター変動の最適操作に及ぼす影響

触媒層出口転化率  $\xi_A(1)$  に及ぼす触媒層入口温度  $T_{top} = T(0) = T'(0)$  の影響をガス流量  $\phi$  をパラメーターとして求めたのが Fig. III-32 であり、またその時の反応ガスの入口温度  $T_{inlet} = T(1)$  と  $T'(0)$  との関係と同じくガス流量  $\phi$  をパラメーターとして求めたのが Fig. III-33 である。Fig. III-32 から最適な触媒層入口温度  $T(0)$  は 流量が変化しても ( $0.08 \leq \phi \leq 0.2$ ) ほとんど変化せず、最適温度は  $T_{top} = T(0) = 780^\circ(\text{K})$  であり、また流量  $\phi$  が少なくなるにつれ触媒層出口における転化率  $\xi_A(1)$  は触媒層入口温度のかなり広い範囲にわたって、ほぼ等しい値をとり、逆に流量が多くなるにつれ触媒層入口温度のわずかな変化も転化率  $\xi_A(1)$  に大きい影響を与えることがわかる。

また Fig. III-33 の各曲線には最小値が存在し、反応ガスの入口温度  $T_{inlet}$  が ある値以上でなければ反応が進行しないことを示している。すなわち必ず原料ガスの温度  $T_{inlet}$  はこの最小値より高い温度でなければならない。また一点鎖線で示したように、この最小値の右側が安定な定常操作の領域に対応し、左側は不安定な操作領域に対応している。ここでは制御装置をつけない系が外乱をうけて定常状態からはずれても十分に時間が経過した後にもとに戻るか、少なくとも発散しないことを安定性の定義とした

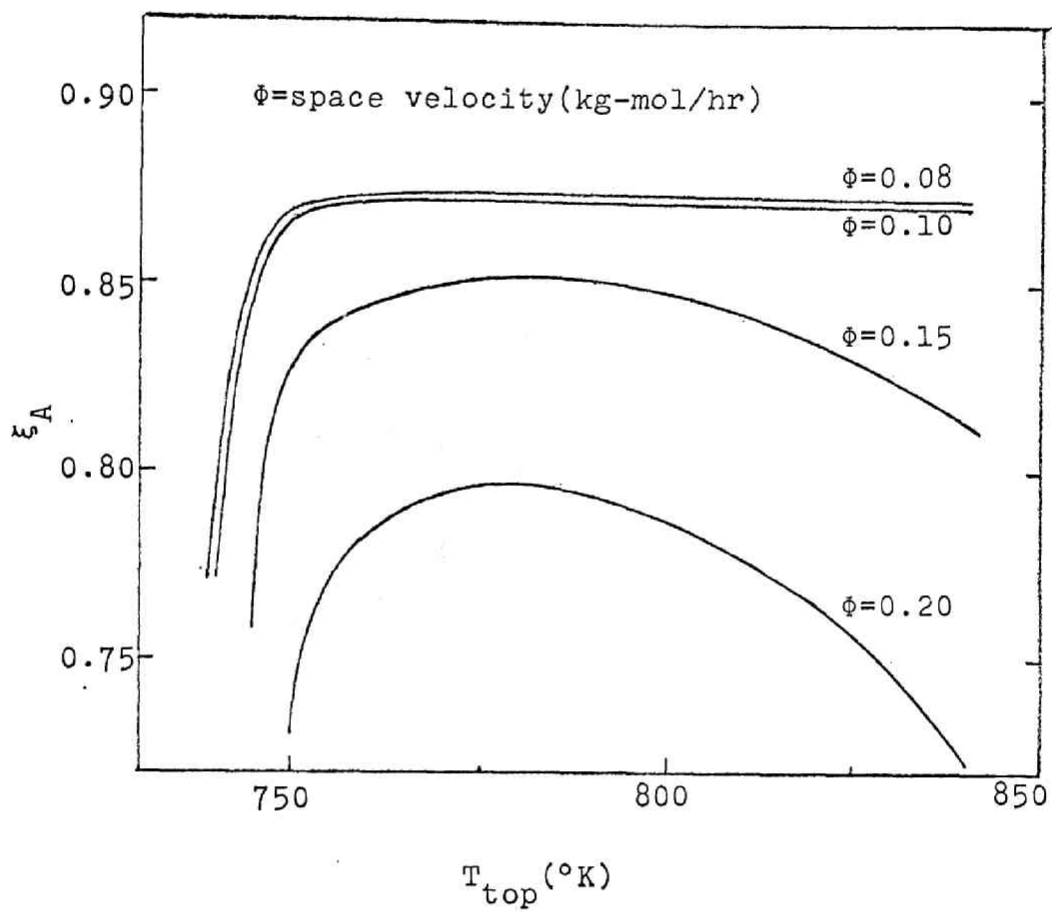


Fig. III-32 Effect of top temperature on conversion rate  $\xi_A$

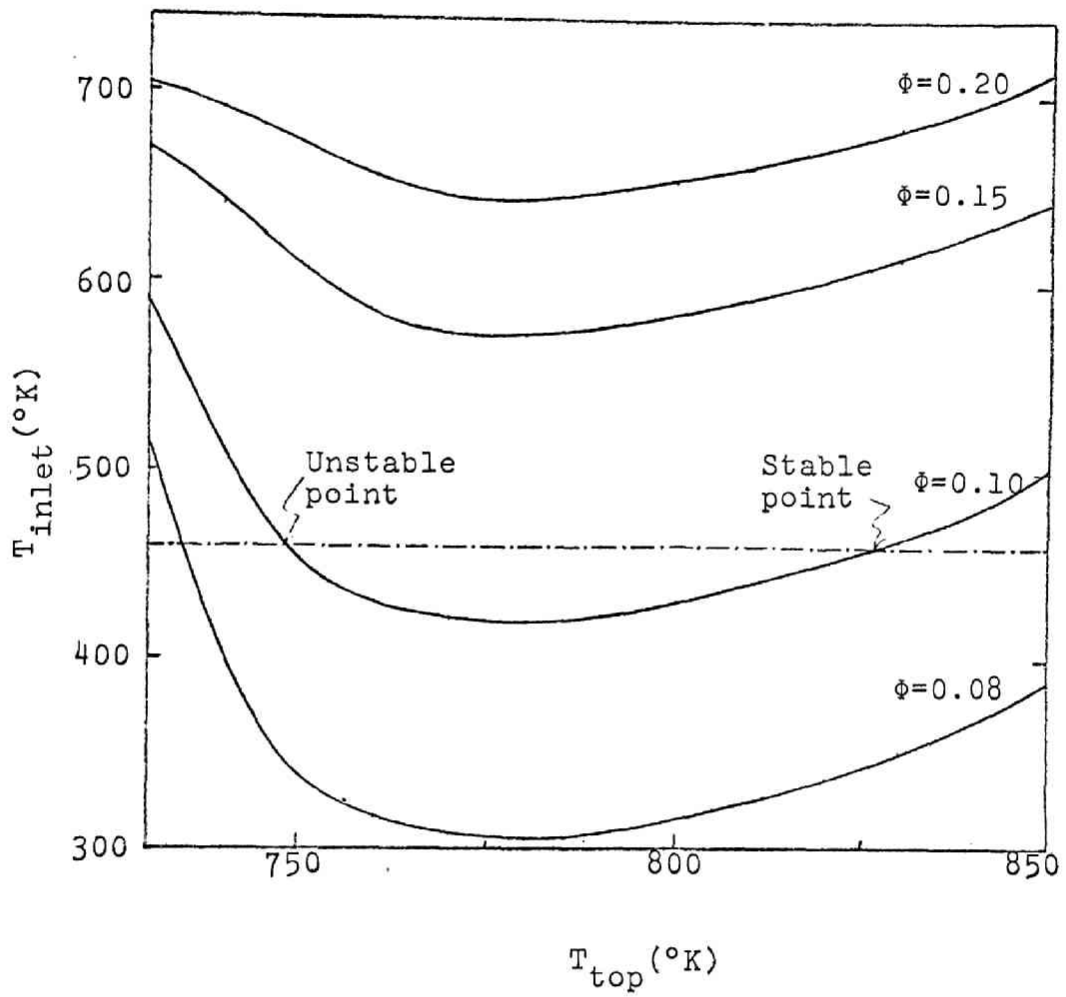


Fig. III-33 Relationship between inlet and top temperature

Van Heerden, C<sup>51)</sup> の取り扱いによって 自己熱交換型反応器の安定な定常操作点は Fig. III-34 の A 点に また不安定な操作点は B 点にそれぞれ対応している。さらに総括伝熱係数  $U$  をパラメータにとって 上記と同様の計算を行なった結果を示すのが Fig. III-35 および Fig. III-36 である。Fig. III-35 はガス流量  $\phi$  が変化しても 最適な触媒層入口温度  $T_{top}$  はほとんど変化しなかったのに比べ 総括伝熱係数  $U$  の変化に対しては  $U$  が大きくなるに従って最適な  $T_{top}$  の温度も高くなり また流量  $\phi$  の変化の場合とは逆に  $U$  が大きくなるにつれ 転化率は  $T_{top}$  のかなり広い範囲にわたってほぼ等しい値をとることを示し  $U$  が小さくなるにつれ  $T_{top}$  のわずかな変化も 転化率  $\xi_A(1)$  にかなり大きい影響を与えることを示している。

Fig. III-36 については Fig. III-33 と同様 各曲線には最小値が存在し 原料ガスの温度  $T_{inlet}$  は必ずこの最小値より高い温度でなければならないが ガス流量  $\phi$  の値が大きいか程  $T_{inlet}$  の値は高かったのに対し  $U$  の場合には逆に小さい程  $T_{inlet}$  の最小値は高くなる。

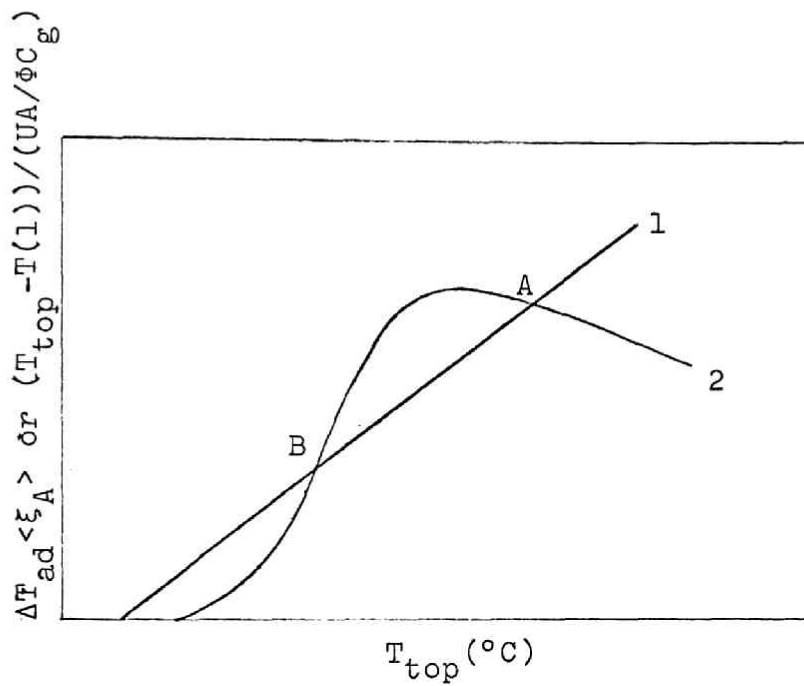
Fig. III-37 は最適な触媒層入口温度  $T_{top} = 780(^{\circ}\text{K})$  の場合に 触媒層出口転化率  $\xi_A(1)$  に及ぼす流量  $\phi$  の影響を示したものである。この図から  $\phi = 0.1 (\text{kg}\cdot\text{mol}/\text{h})$  附近では  $\phi$  の変動による  $\xi_A(1)$  の変化は極めてわずかであるのに対し 流量  $\phi$  が増加するにつれ  $\xi_A(1)$  は急速に悪くなっていくことがわかる。

Fig. III-38 および Fig. III-39 は最適な触媒層入口温度  $T_{top} = 780(^{\circ}\text{K})$  および  $T_{top} = 800(^{\circ}\text{K})$  の場合に 触媒層出口転化率  $\xi_A(1)$  に及ぼす総括伝熱係数  $U$  の影響を示したものである。これらの図から いずれの場合も  $\xi_A(1)$  を最大にする最適な  $U$  が存在し かつこの最適値からのずれがわずかであっても 急激に転化率が悪くなることがわかる。

Fig. III-40 は最適な触媒層入口温度  $T_{top} = 780(^{\circ}\text{K})$  の場合に  $\xi_A(1)$  に及ぼす  $\text{SO}_2$  のモル分率  $a$  の影響を示したものである。この図から  $a = 0.015$  を境にして、これより小さな  $a$  の値に対しては  $a$  が小さくなるにつれ 急激に  $\xi_A(1)$  の値が減少し この値よりも大きい値に対しては、 $a$  の増加につれて  $\xi_A(1)$  の値は減少する。

これまでに 流量  $\phi$  総括伝熱係数  $U$  および  $\text{SO}_2$  のモル分率  $a$  の変動が 触媒層入口温度を最適な  $T_{top} = T(0) = 780(^{\circ}\text{K})$  に固定した場合に、





- 1 ; Heat removal line,  $(T_{top} - T(1)) / (UA / \phi C_g)$   
 2 ; Heat generation line,  $\Delta T_{ad} \langle \xi_A \rangle$   
 $\langle \xi_A \rangle$  ; The degree of conversion averaged over  
 the reactor length  
 A ; Stable point  
 B ; Unstable point

Fig. III-34 Heat generation and heat removal curves

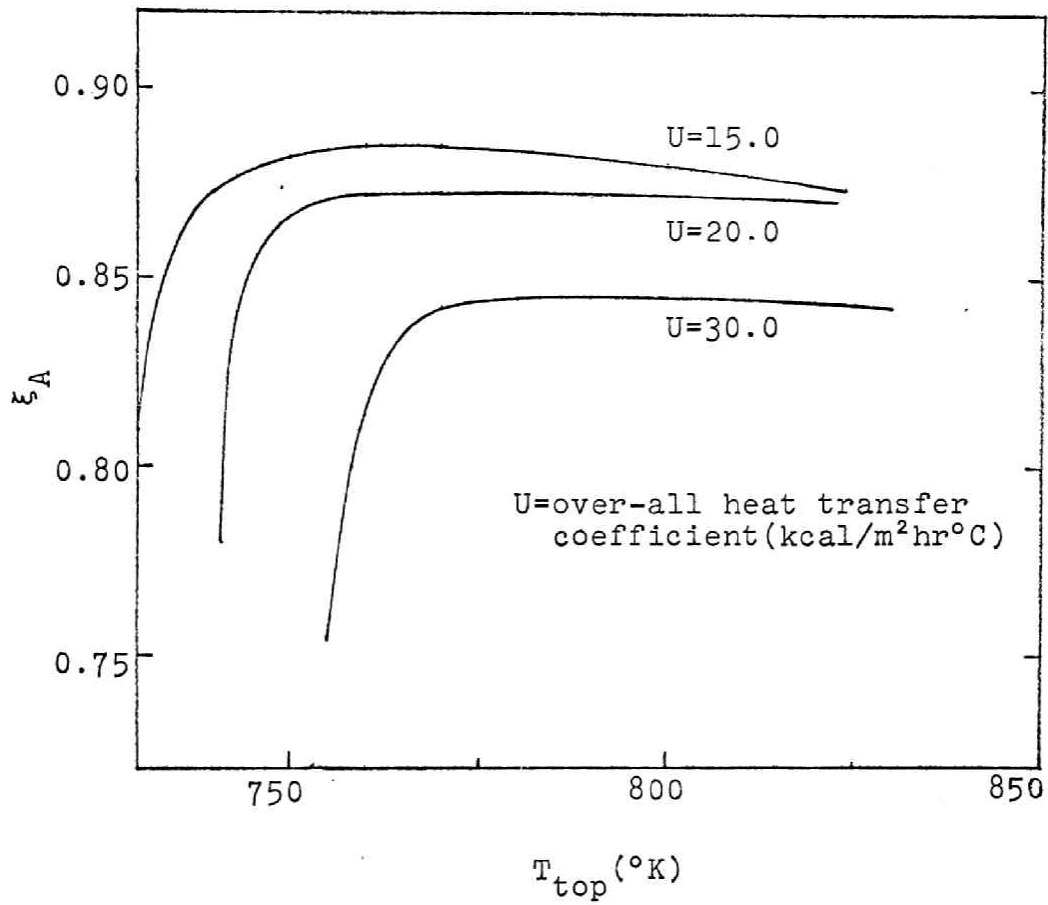


Fig. III-35 Effect of top temperature on conversion rate  $\xi_A$

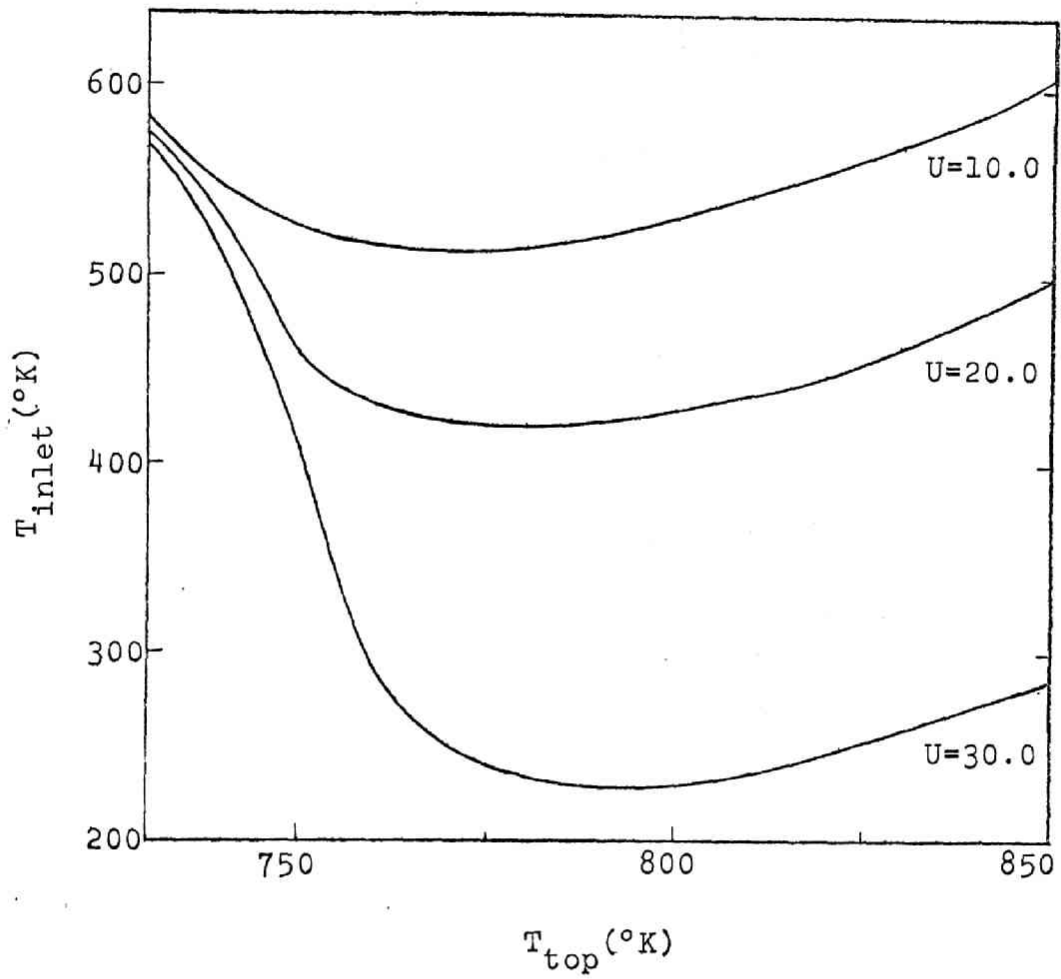


Fig. III-36 Relationship between inlet and top temperature

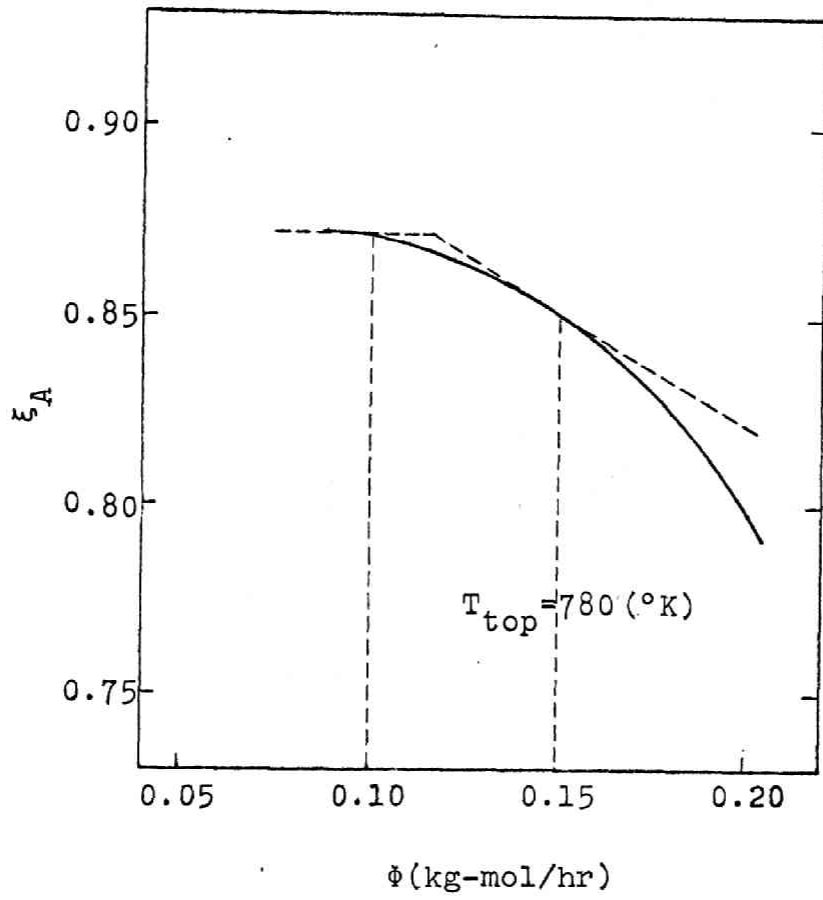


Fig. III-37 Effect of space velocity on conversion rate  $\xi_A$

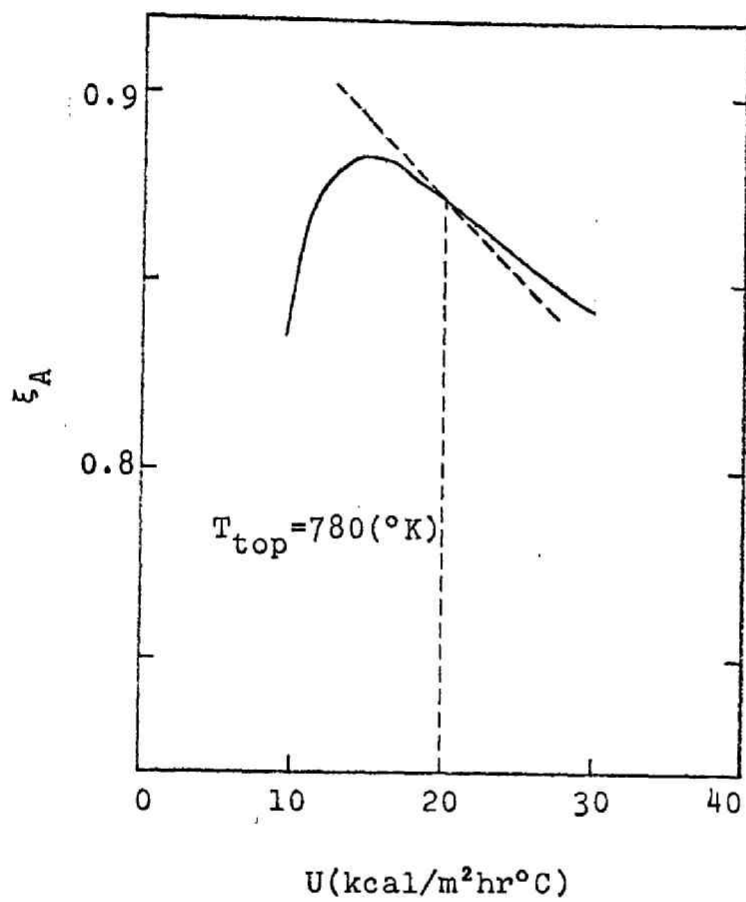


Fig. III-38 Effect of over-all heat transfer coefficient  $U$  on conversion rate  $\xi_A$

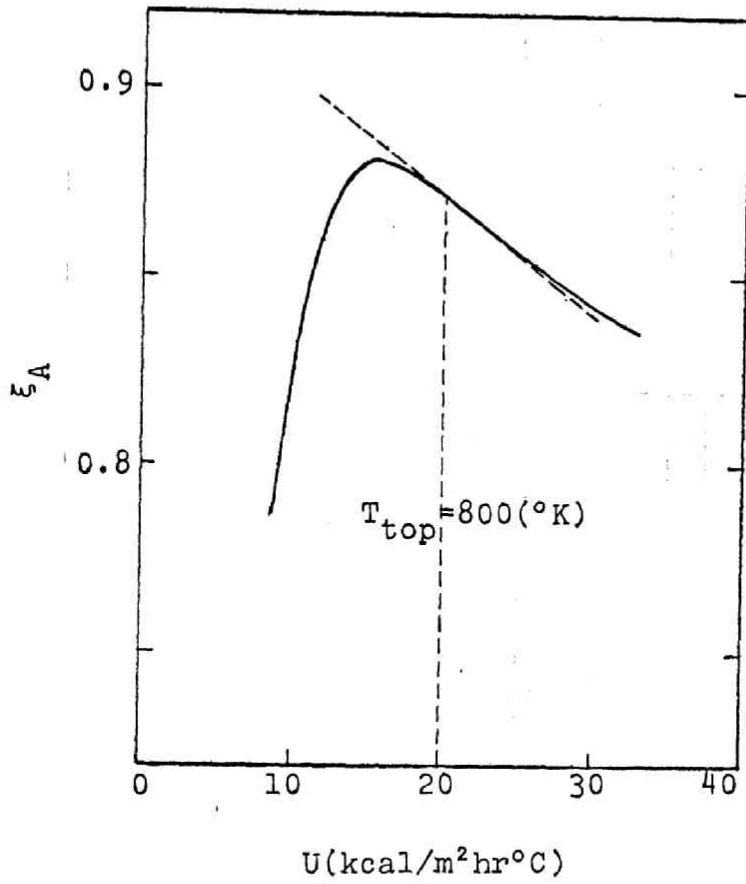


Fig. III-39 Effect of over-all heat transfer coefficient  $U$  on conversion rate  $\xi_A$

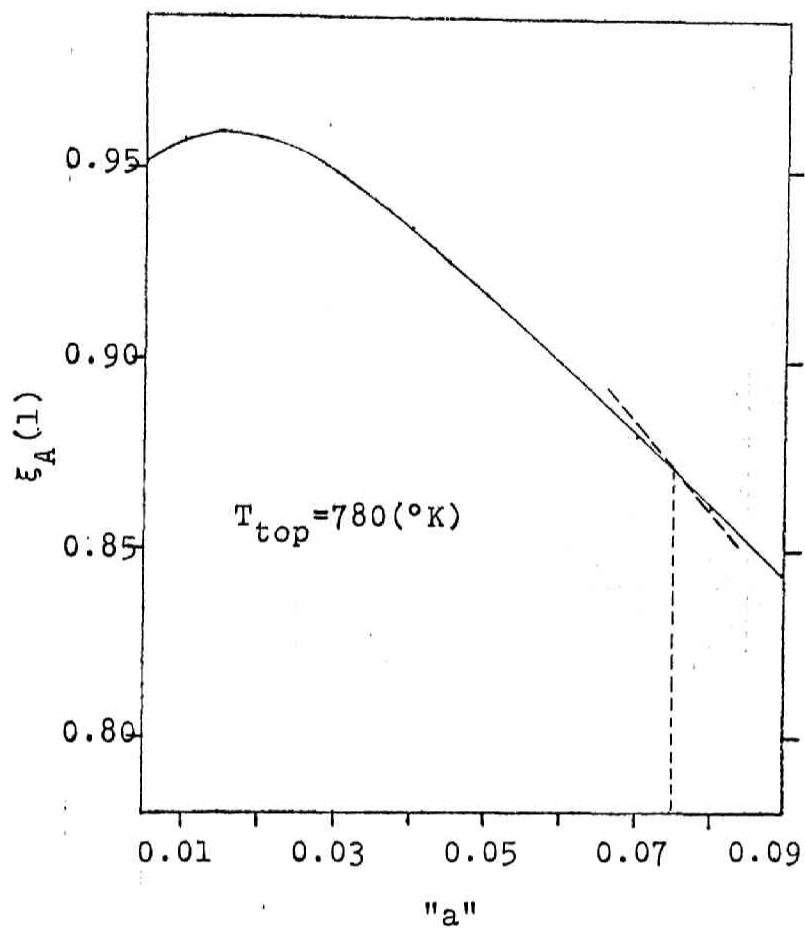


Fig. III-40 Effect of molal fraction "a" of  $SO_2$  on conversion rate  $\xi_A(l)$

$\xi_A(1)$ に与える影響について考察してきたが これらは最適な  $T_{top}$  に対して数多くの数値計算を行ない、その結果からえた情報であるが、最適な  $T_{top} = T'(0)$  を求める時に用いた Adjoint System を利用すれば、次のように種々のパラメーターが変動したときに、触媒層出口転化率  $\xi_A(1)$  がどのような影響をうけるかを知ることができる。すなわち

$$A = -\frac{1}{1-f} \cdot \frac{U_0 A}{\phi_0 c_g}, \quad P = \frac{U_0 A}{\phi_0 c_g}, \quad B = \frac{a_0(-\Delta H)}{c_g} \frac{A c_p \beta_0 L}{a_0 \phi_0}, \quad C = \frac{A c_p \beta_0 L}{a_0 \phi_0}$$

とおくとき これらのパラメーターがわずかに変化したとき  $\xi_A(1)$  の受ける変化は次の(Ⅲ-237)式で与えられる。パラメーター変動をも考慮して(Ⅲ-216)式の変分を求めると結局 最適な触媒層出口転化率  $\xi_A(1)$  の受ける変動  $\delta \xi_A(1)$  は

$$\delta \xi_A(1) = \int_0^1 \left\{ \lambda_{\xi} \gamma_A \delta C + \lambda_T \gamma_A \delta B + (T'-T) (\lambda_T \delta A - \lambda_{T'} \delta P) \right\} dz \quad (Ⅲ-237)$$

ここで(Ⅲ-237)式に含まれる  $\lambda_{\xi}(z), \lambda_T(z), \lambda_{T'}(z), \gamma_A(z), T'(z), T(z)$  の値は最適な触媒層入口温度  $T_{top} = T(0)$  を求める際にえられた値を使用すればよい。

たとえば

(i) 反応ガス流量が  $\phi_0$  から  $\phi = \phi_0 + \delta \phi$  に変化した場合の触媒層出口転化率の変動  $\delta \xi_A(1)$  は

$$\begin{aligned} \delta \xi_A(1) = & \delta A \int_0^1 \lambda_T (T'-T) dz + \delta B \int_0^1 \lambda_T \gamma_A dz + \delta C \int_0^1 \lambda_{\xi} \gamma_A dz \\ & - \delta P \int_0^1 \lambda_{T'} (T'-T) dz \end{aligned} \quad (Ⅲ-238)$$

ここで

$$\delta A = -A \frac{\delta \phi}{\phi_0}, \quad \delta B = -B \frac{\delta \phi}{\phi_0}, \quad \delta C = -C \frac{\delta \phi}{\phi_0}, \quad \delta P = -P \frac{\delta \phi}{\phi_0}$$

であるから結局

$$\delta \xi_A(1) = -\frac{\delta \phi}{\phi_0} \int_0^1 \left\{ A \lambda_T (T'-T) + B \lambda_T \gamma_A + C \lambda_{\xi} \gamma_A - P \lambda_{T'} (T'-T) \right\} dz \quad (Ⅲ-239)$$

(ii) 総括伝熱係数が  $U_0$  から  $U = U_0 + \delta U$  に変化した場合の  $\delta \xi_A(1)$  は

$$\delta \xi_A(1) = \delta A \int_0^1 \lambda_T (T'-T) dz - \delta P \int_0^1 \lambda_{T'} (T'-T) dz \quad (Ⅲ-240)$$



$$\text{ここで} \quad \delta A = A \frac{\delta U}{U_0}, \quad \delta P = P \frac{\delta U}{U_0}$$

であるから 結局

$$\delta \dot{X}_A(1) = \frac{\delta U}{U_0} \int_0^1 \{ A \lambda_T (T' - T) - P \lambda_T' (T' - T) \} dz \quad (\text{III-241})$$

(iii)  $\text{SO}_2$  のモル分率が  $a_0$  から  $a = a_0 + \delta a$  に変化した際の  $\delta \dot{X}_A(1)$  は

$$\delta \dot{X}_A(1) = \delta C \int_0^1 \lambda_{\xi} r_A dz + \int_0^1 (\lambda_T' B + \lambda_{\xi} C) \frac{\partial r_A}{\partial a} \cdot \delta a dz \quad (\text{III-242})$$

$$\text{ここで} \quad \delta C = -C \frac{\delta a}{a_0} \quad \text{であるから 結局}$$

$$\delta \dot{X}_A(1) = \delta a \int_0^1 \left\{ -\frac{C}{a_0} \lambda_{\xi} r_A + (\lambda_T' B + \lambda_{\xi} C) \frac{\partial r_A}{\partial a} \right\} dz \quad (\text{III-243})$$

今最適な触媒層入口温度  $T_{\text{top}} = T(0) = 780 (^{\circ}\text{K})$  の時 (III-239, 241, 242) 式を使ってそれぞれ  $\phi$ ,  $U$  および  $a$  が、それぞれの最適な値  $\phi_0 = 0.1$  ( $\text{kg}\cdot\text{mol}/\text{hr}$ ),  $U_0 = 20.0$  ( $\text{kcal}/\text{m}^2 \cdot \text{hr} \cdot ^{\circ}\text{C}$ ) および  $a_0 = 0.075$  からずれた場合 触媒層出口転化率の変動  $\dot{X}_A(1)$  はいくら位になるかをそれぞれ Fig. III-37, III-38, III-39 および III-40 の最適値における直線 (点線で示した) でもって示した。ただ  $\phi_0 = 0.1$  の場合変化がわずかで不明瞭なため、流量  $\phi$  によって最適な  $T_{\text{top}}$  の値がほとんど変化しない点を考慮して、同じ  $T_{\text{top}} = 780 (^{\circ}\text{K})$  を用いて、 $\phi_0 = 0.15$  ( $\text{kg}\cdot\text{mol}/\text{hr}$ ) の場合にどうなるかをあわせて考察した。その結果、それぞれの最適値における曲線の接線と Adjoint System を用いて求めた勾配とが、かなりよく一致しているから、パラメーターが変動したときわざわざプロセス方程式を解き直さなくても、この Adjoint System を利用すれば、十分な精度でその触媒層出口における転化率の変動を予知することができる。

#### 4) まとめ

単一装置がたとえ最適に設計されたとしても、実際の運転においていつも最初想定された条件の下で運転されるとは限らない。従ってシステムのパラメーターの変動、状態変数の初期値の変動および操作条件が最適値

から備倚したとき、目的関数の変化する割合を知ることは、きわめて重要である。いわゆる最適化問題の感度解析 (Sensitivity Analysis) を  $\text{SO}_2$  の酸化反応を例にとり、二通路自己熱交換型反応器の場合について、行なってみた。その際、触媒層入口温度  $T(0)$  の最適値を求める時に用いた Adjoint System を利用すれば、流量、総括伝熱係数、原料の組成比等のパラメーターが変動したとき、わざわざプロセス方程式を解き直さなくても十分な精度で、その触媒層出口における転化率の変動を予知できることがわかった。

#### 2-4-4 管型反応器の冷却方式に関する若干の考察

前節においては、種々の反応系について、その最適温度分布を求め、いわゆる理想的な反応器の最適設計について考察を加えてきた。

しかしこのように求めた最適温度分布を、どのようにすれば達成できるかという点についての研究は、はなはだ少なく、わずかに小西<sup>(57)</sup>、楠木<sup>(59)</sup>、高松<sup>(60)</sup>等の研究があるにすぎない。本節では、前節でえられた最適温度分布を、どのようにすれば実現することができるかという点について検討する。すなわち管型反応器の最適設計、操作を完全に理想化した状態で考えるのではなく、より実際的な観点から考察していく一方法として、近似的に最適温度分布に一致させるような冷却方式は、どのような状態にならねばならないかを考察し、その冷却方式を近似的にうるための設計方法について述べる。

##### 1) 基礎式および反応速度式

ここでは前節(2-4-1)で考察した2次可逆発熱反応について考察する。まずこの反応系について計算された最適温度分布を維持するための管壁の温度分布を求めてみる。いま管壁温度、すなわち冷却流体温度を $T_w$ で表わすことにすると、管内温度 $T$ と $T_w$ の間には熱収支より

$$\frac{1}{Pe} \frac{dT}{dz^2} - \frac{dT}{dz} - \frac{4h}{\rho C_p d} \frac{L}{u} (T - T_w) + \frac{(-\Delta H)}{\rho C_p} \frac{L}{u} Y_A = 0 \quad (\text{III-244})$$

ただし  $h$  : 総括熱伝達係数  
 $L$  : 反応管の全長  
 $C_p \rho$  : 反応物質の比熱および密度  
 $d$  : 反応管の直径  
 $u$  : 反応物質の線速度

さらに $Y_A$ は前節の最適計算からえられる最適状態における反応速度式であって、次式で与えられる。

$$Y_A = \frac{\mu}{4} \frac{(1-X_A)^4}{X_A^2} \frac{u}{L} C_{A0} \quad (\text{III-245})$$

また(III-244)式に対する境界条件は次式によって与えられるものとする。

$$\frac{1}{Pe} \frac{dT}{dz} \Big|_{z=0^+} = T \Big|_{z=0^+} - T_{IN} \quad (\text{III-246})$$

$$\left. \frac{dT}{dz} \right|_{z=1} = 0 \quad (\text{III-247})$$

ここで  $T_{IN}$  は反応物質の流入温度である。

(III-244)~(III-247)式において最適な管内温度  $T$ , 最適転化率  $X_A$  も既に前節において求められているから 境界条件(III-246,247)式をみたし(III-244)式の解となるような  $T_w$  を求めればよい。(以下の計算に用いた数値は Table III-5 に示す。) Fig III-41 は  $Pe$  数をパラメーターとして, Fig III-5 に示される最適温度分布を達成するために必要な外部流体の温度を示している。この図から,  $T_w$  も  $Pe$  数によってかなり変化しており, 特に注意しなければならないことは,  $T_w$  の曲線は ある位置でピークを持つことであり このピークを境にして反応管の入口に近いところでは冷却流体を並流に 反応管の出口に近いところでは向流に流す必要のあることを示している。管内を最適な温度にするような冷媒温度  $T_w$  が求められたのであるが この  $T_w$  は 管外を一定量の冷却流体を流すような外部熱交換型の装置で果して実現されるのかどうか また外部熱交換型の装置の各点の流量が自由に換えられるとすれば, どのような流量を各位置で与えればよいかといったことが問題となる。そこでここでは 外部に一定量の冷却流体を, ピストン流で流すような装置を考えると その状態は次式で与えられる。

$$\frac{dT_w}{dz} = \varepsilon \frac{h \pi d L}{\rho' c_p'} \cdot \frac{1}{Q} \cdot (T - T_w) \quad (\text{III-248})$$

ただし

$\rho' c_p'$  冷却流体の密度, および比熱

$Q$  冷却流体の流量  $\varepsilon = +1$ : 並流,  $-1$ : 向流

(III-248)式に含まれている  $T$  及び  $T_w$  は, それぞれ最適な管内反応物質濃度, 管外冷却流体温度である。この  $T$  及び  $T_w$  を(III-248)式に代入し そのとき各位置でえられる冷却流体の量  $Q$  が一定であれば ある一定量の冷却流体を流すことによって, この管型反応器の最適温度分布を実現することができる。今一例として反応器の流れ方向の各点において, どのような冷却流量  $Q$  を与えればよいかを示したものが Fig III-42 である。図中矢印は冷却流体の流れ方向を示している。この図から明らかなように管内最適

活性化エネルギー	$E_1 = 5,000$	cal/gr-mol
活性化エネルギー	$E_2 = 10,000$	"
反応熱	$(-ΔH) = 5,000$	"
総括伝熱係数	$h = 0.0296$	cal/cm <sup>2</sup> ·°C·sec
ガス定数	$R = 1.987$	cal/gr-mol·°K
反応物質の比熱	$C_p = 0.6$	cal/gr·°C
反応物質の密度	$\rho = 0.8$	g/cm <sup>3</sup>
反応物質の線速度	$u = 2.0$	cm/sec
冷却流体の比熱	$C_p' = 0.6$	cal/gr·°C
冷却流体の密度	$\rho' = 0.9$	g/cm <sup>3</sup>
反応管の直径	$d = 1.25$	cm
反応管の全長	$L = 300$	"
反応速度	$R_A$	gr-mol/cm <sup>3</sup> ·sec
反応物質の温度	$T$	°C
管壁(冷却流体)の温度	$T_w$	"
	$\mu = (H_2/H_1) \cdot H_1 \cdot L/u = 1.0$	
	$H_1 = k_{10} C_{A0} = 20/3$	sec <sup>-1</sup>
	$H_2 = k_{20} C_{A0} = 20 \times 10^3/3$	"

Table III-5 Nominal value of parameter

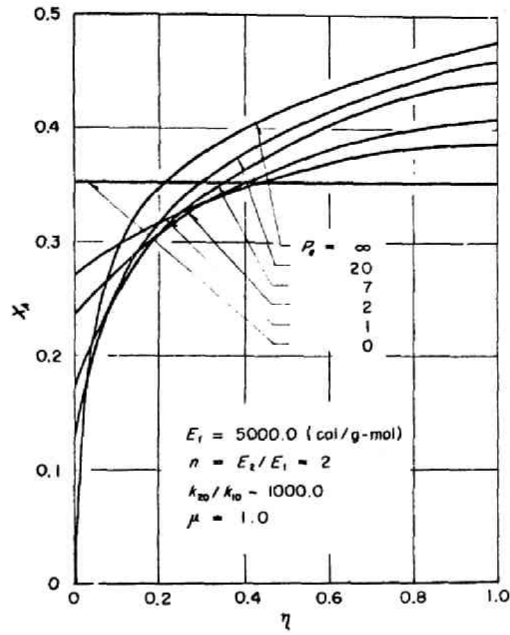


Fig. III-4 Optimum concentration profiles for various Pe

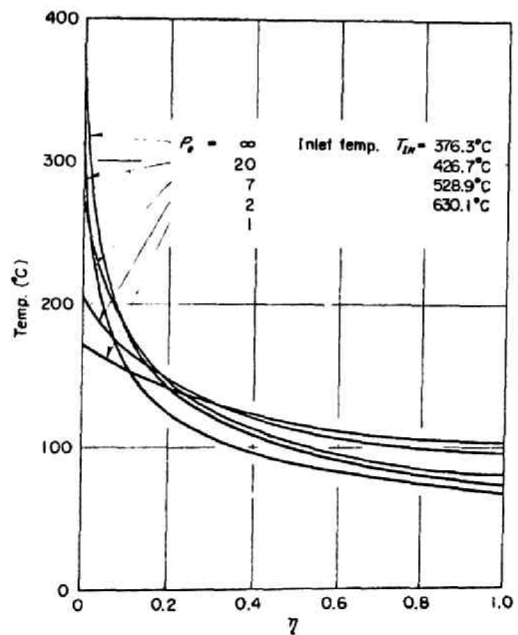


Fig. III-5 Reactant temperature profile

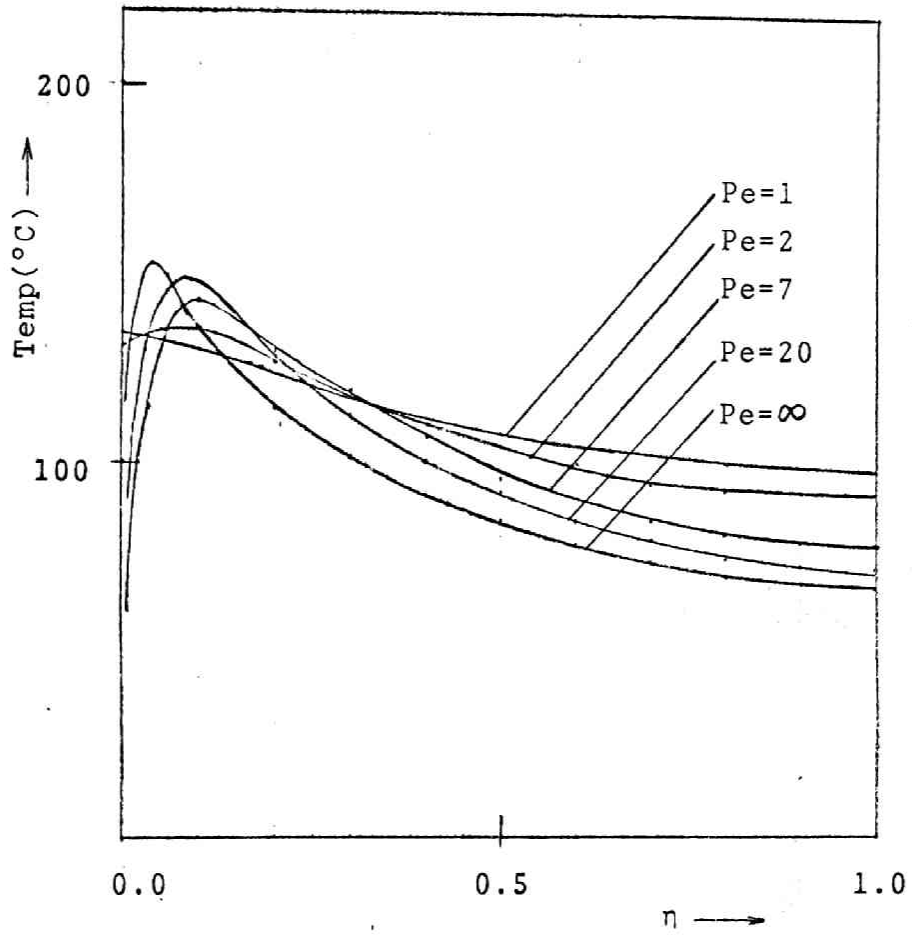


Fig. III-41 Optimal coolant temperature

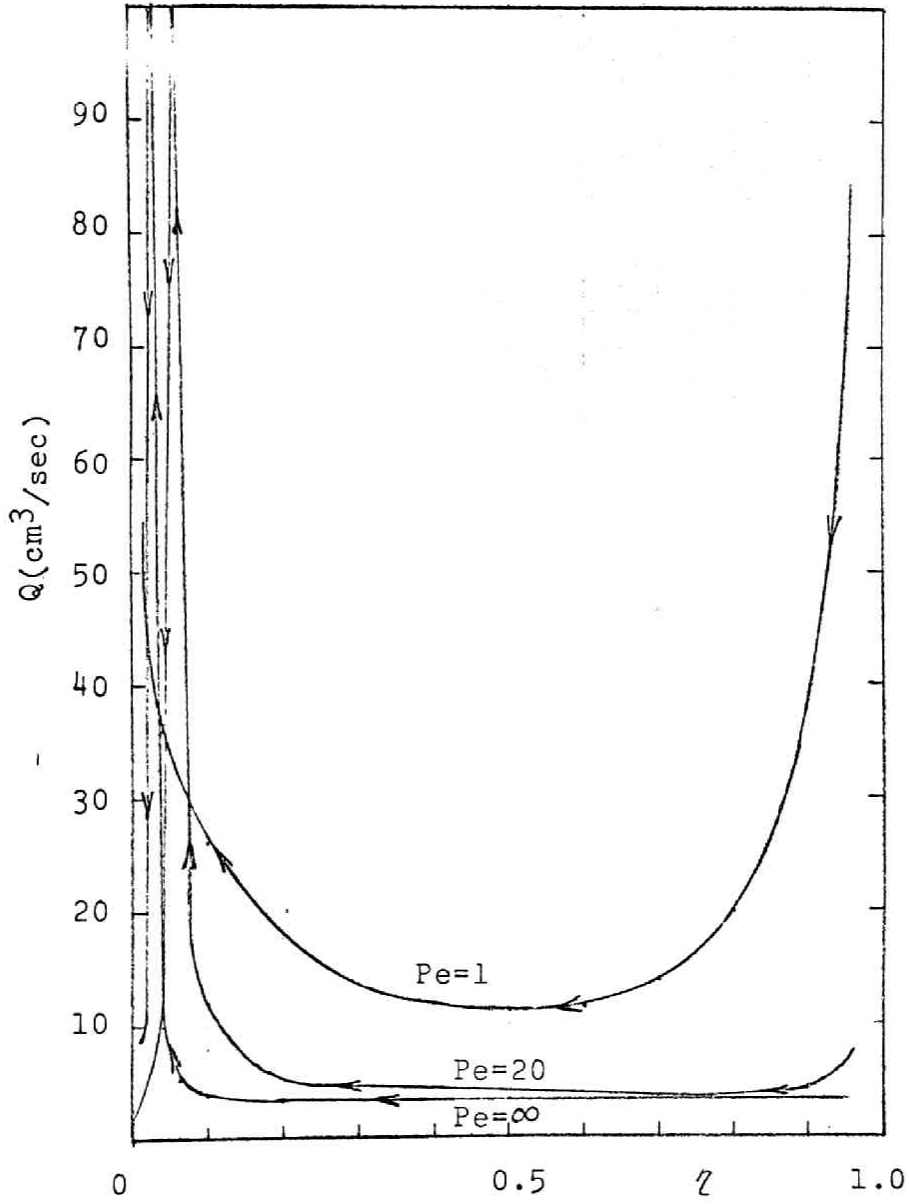


Fig. III-42 Flow rate of coolant



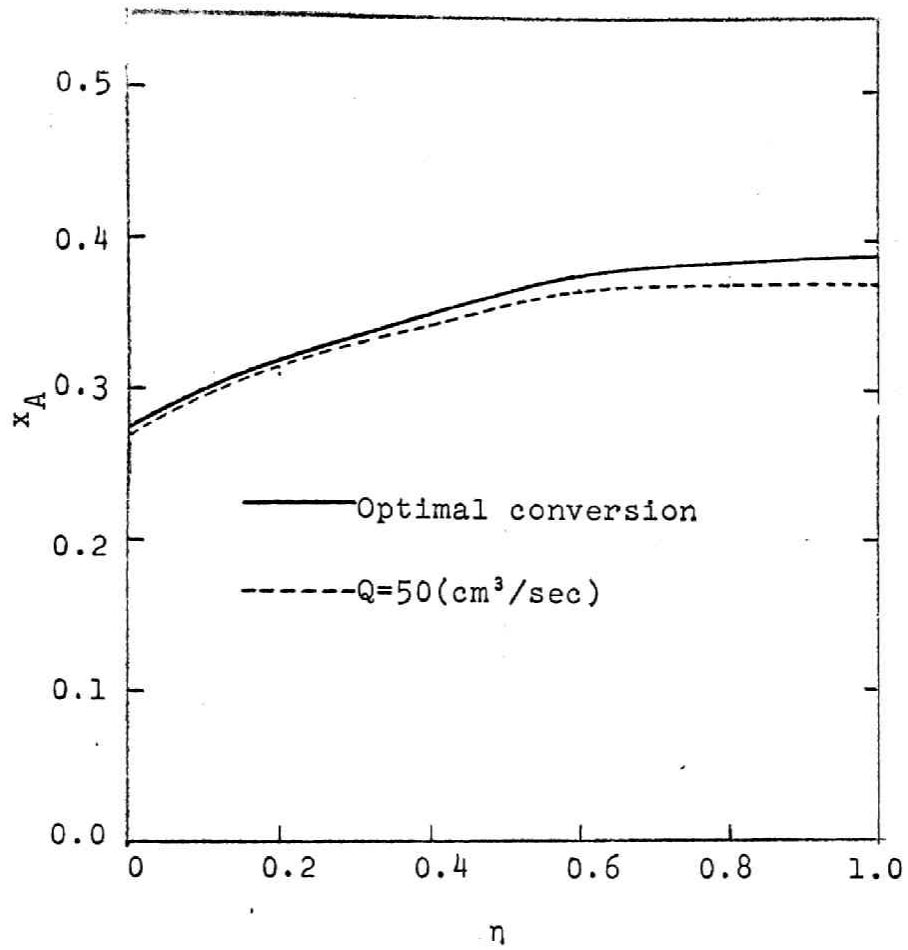


Fig. III-43 Comparison of conversion for  $Pe=1$

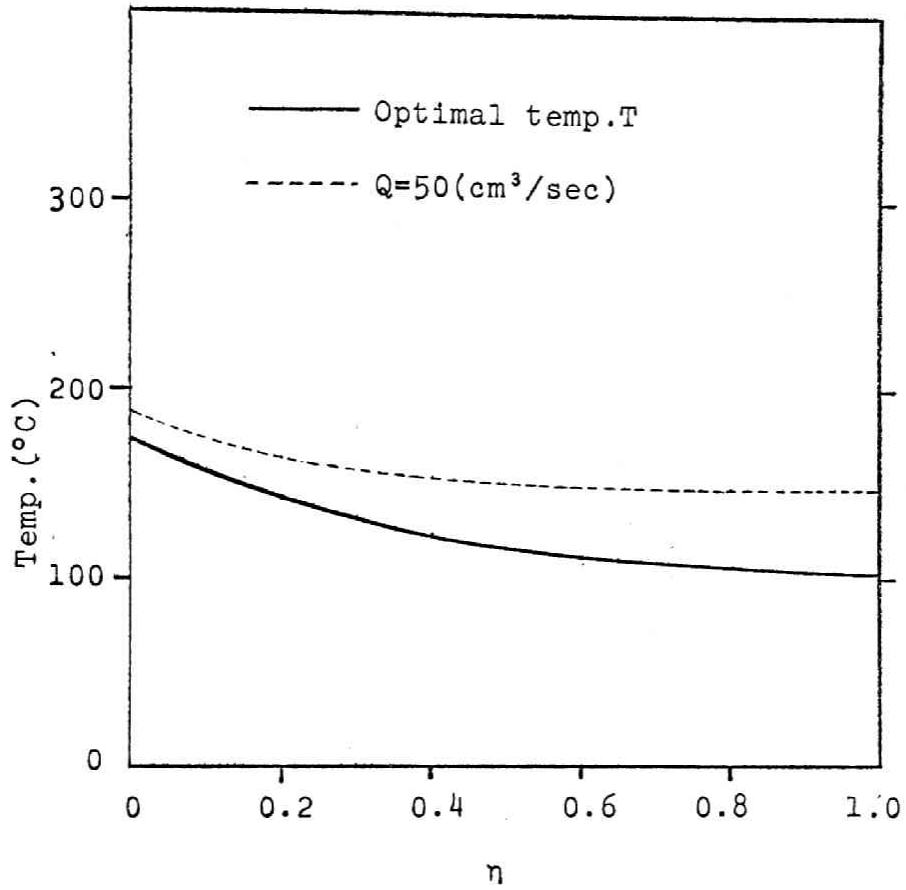


Fig. III-44 Comparison of reactant temperature for  $Pe=1$

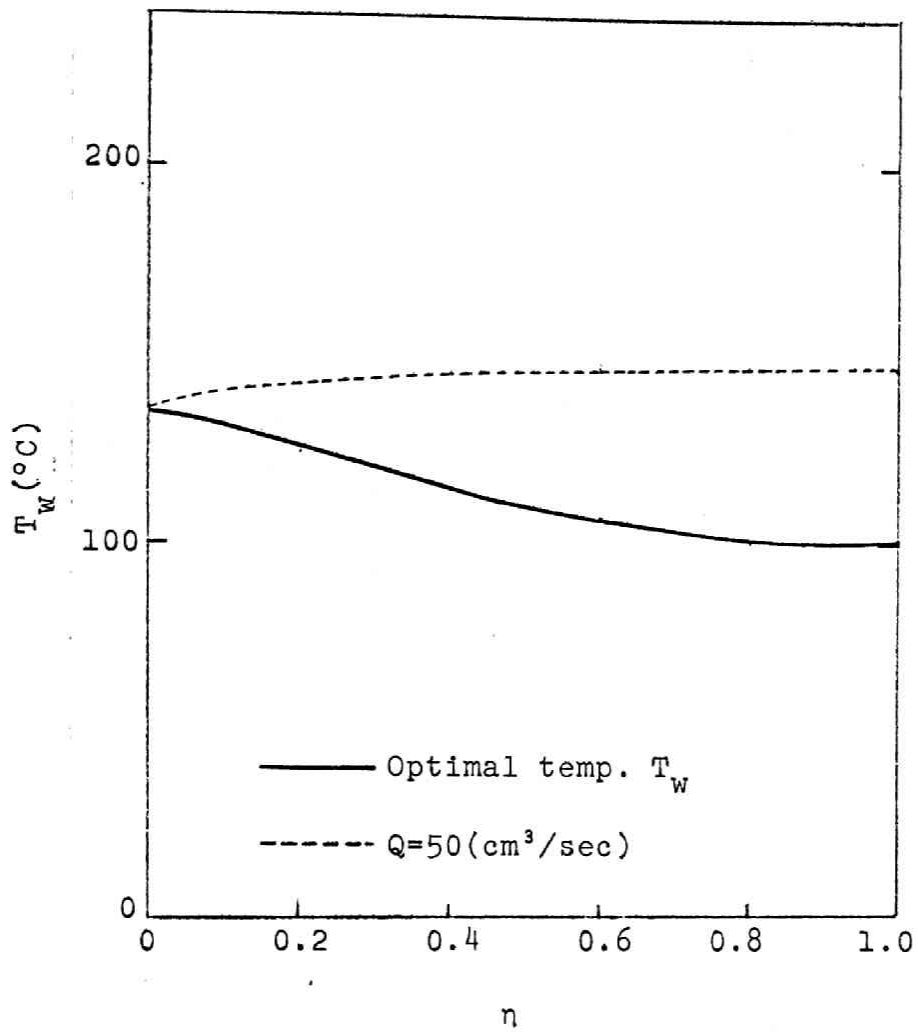


Fig. III-45 Comparison of wall temperature for  $Pe=1$

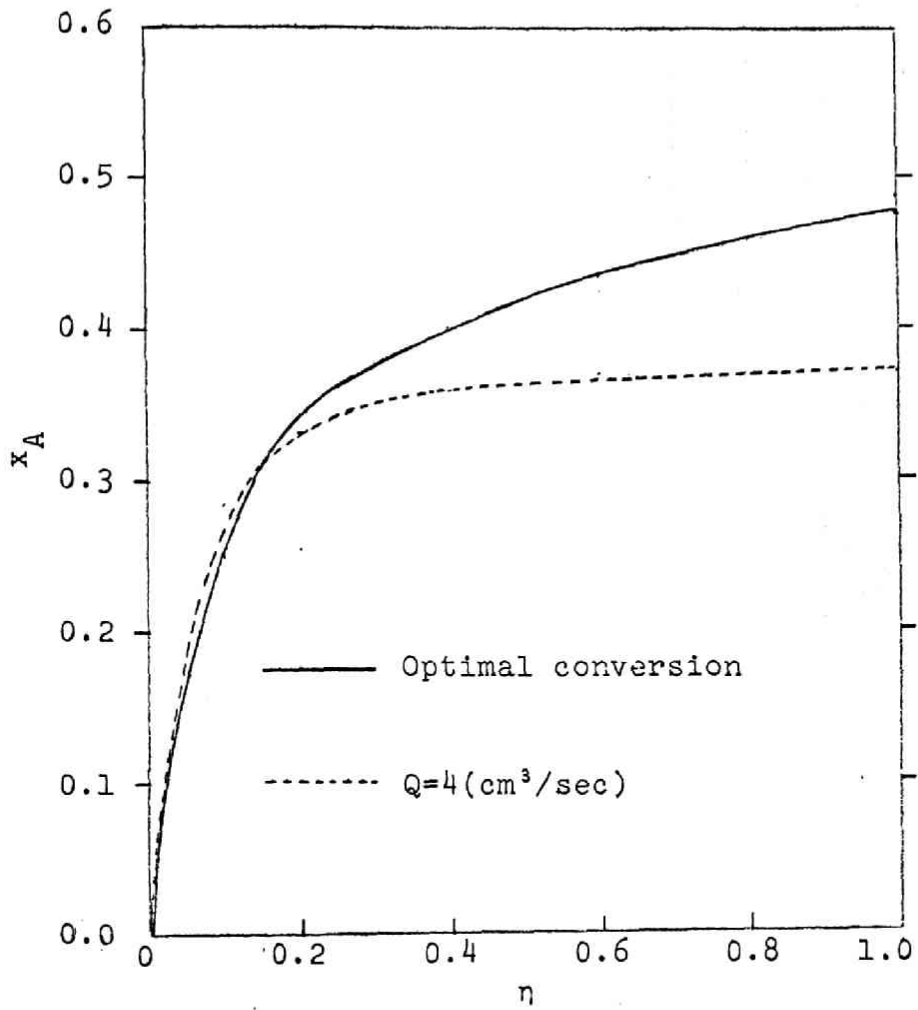


Fig. III-46 Comparison of conversion for  $Pe=\infty$

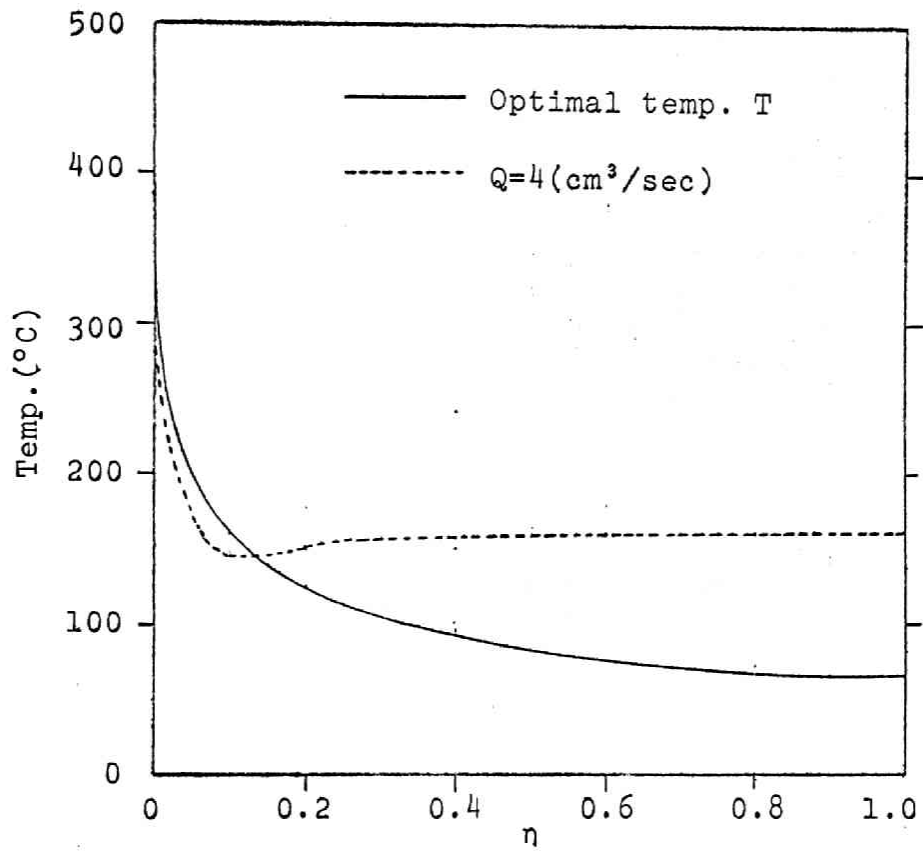


Fig. III-47 Comparison of reactant temperature for  $Pe = \infty$

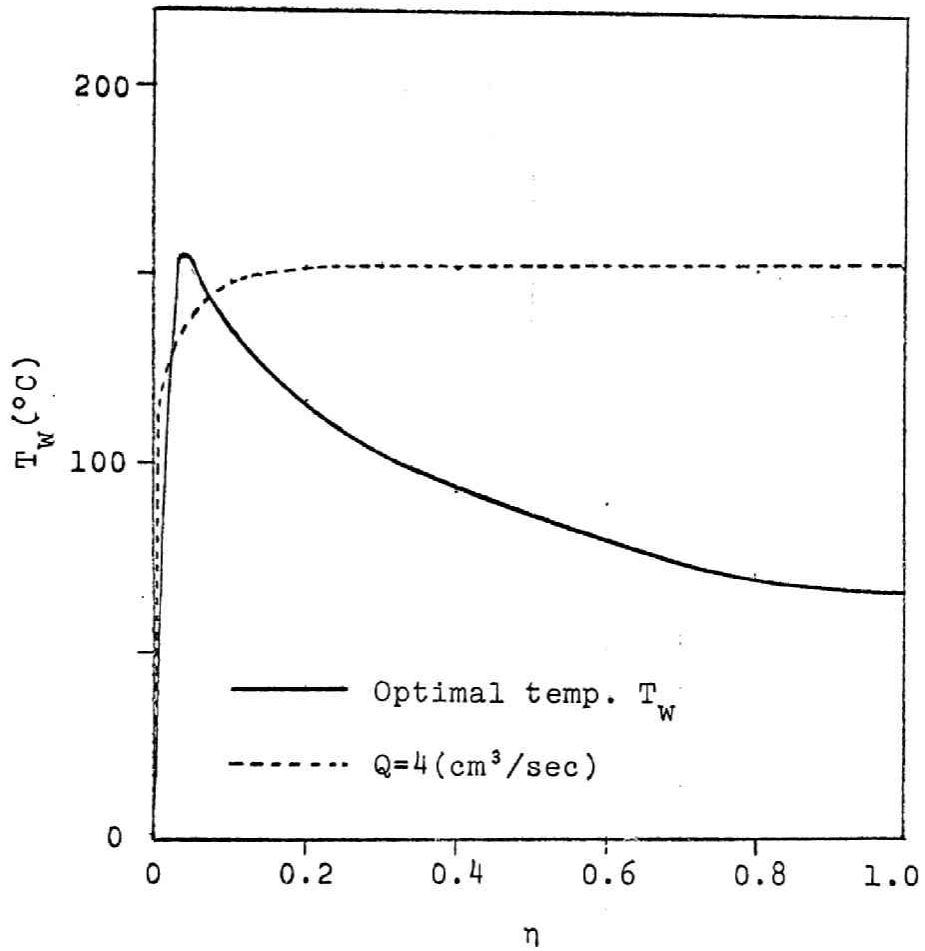


Fig. III-48 Comparison of wall temperature for  $Pe=\infty$

温度分布を達成する冷却流体の流量は一定とはならず、各位置で大きく変化することがわかる。そこで管内最適温度分布を近似的に維持するような外部冷却方式を求めることが必要となってくる。Fig. III-42からも明らかのように最適な冷却流体の流量にかなりの変動があるが、これを無視してある一定量の冷却流体を流すとしてみたとき、反応管内の転化率および温度がどのようになるかについて考察してみよう。

いま目安として  $Pe = 1$  と  $Pe = \infty$  (ピストン流れ) の場合に、冷却流体の流量をそれぞれ  $Q = 50 \text{ (cm}^3/\text{sec)}$ 、 $Q = 4 \text{ (cm}^3/\text{sec)}$  で並流に流した場合に、転化率、反応管内温度  $T$  および冷却流体温度  $T_w$  がどうなるかを示したものが Fig. III-43, 44, 45 および Fig. III-46, 47, 48 である。

## 2) 冷却流体の流量と温度の決定法について

上述したように、冷却流体を向流に流すか、並流に流すかについては明らかとなった。次には、冷却流体流量と温度とをどのように決定すればよいか問題である。そのためにまず除去すべき熱量  $q$  について検討してみよう。

いま(III-248)式を変形すると

$$Q \rho' c_p' dT_w = d \cdot h \cdot \pi \cdot L \cdot d\zeta (T - T_w) \quad (\text{III-249})$$

この(6)式の右辺は、反応管の各位置において取り去らねばならない熱量  $\Delta q$  (すなわち、逆流物質流体から冷却流体への熱の移動速度) に相当するから、次式が成立する。

$$\Delta q = d \cdot h \cdot \pi \cdot L \cdot d\zeta (T - T_w) = \beta (T - T_w) d\zeta \quad (\text{III-250})$$

ただし  $\beta$  は熱伝達係数で  $\beta = d \cdot h \cdot \pi \cdot L \text{ (cal/sec} \cdot \text{c)}$

上式を(III-249)式に代入し、積分すると、

$$Q \rho' c_p' \int dT_w = \beta \int (T - T_w) d\zeta = \int \Delta q = q \quad (\text{III-251})$$

いま冷却流体温度  $T_w$  のピ-7の位置を Fig. III-41 から求め、この位置を、 $\zeta = \zeta_1$  とし、Fig. III-49 に示すような外部熱交換型反応装置を考えることにする。

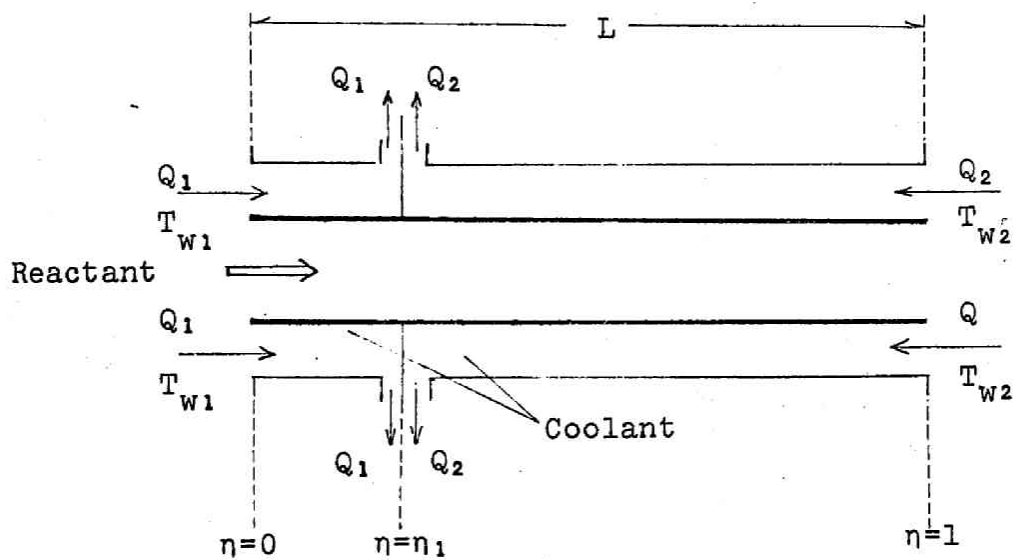


Fig. III-49 Schematic diagram of a tubular reactors cooled from the wall



Fig. III-49において  $0 \leq z \leq z_1$  の範囲では、反応物質の流れと並流に冷却流体  $Q_1$  を流し、 $z_1 \leq z \leq 1$  の範囲では反応物質の流れと向流に冷却流体  $Q_2$  を流す。さらに冷却流体  $Q_1, Q_2$  の入口温度を  $T_{w1}, T_{w2}$  と表わすことにする。この  $T_{w1}, T_{w2}$  の値としては、Fig. III-41から  $z=0$  (反応管入口)、 $z=1$  (反応管出口) における  $T_w$  の値を求め、この値をそれぞれ  $T_{w1}, T_{w2}$  の値として用いることにする。

そして  $z=z_1$  における  $T_w$  の値をやはり Fig. III-41から求め、これを  $T_{wm}$  とすると、上に示したそれぞれの値を利用することによって、冷却流体それぞれの流量  $Q_1, Q_2$  は次のように簡単に求めることができる。

反応管の位置	$0 \leq z \leq z_1$	$z = z_1$	$z_1 \leq z \leq 1$
冷却流体の温度 $T_w$	$T_{w1}$	$T_{wm}$	$T_{w2}$
冷却流体の流量	$Q_1$ (並流)		$Q_2$ (向流)

すなわち  $0 \leq z \leq z_1$  の範囲で除去すべき熱量を  $q_1$ 、 $z_1 \leq z \leq 1$  の範囲で除去されるべき熱量を  $q_2$  とすると(III-251)式から冷却流体の流量  $Q_1, Q_2$  がそれぞれ次式によって求められる。

$$Q_1 = \frac{\beta \int_0^{z_1} (T - T_w) dz}{\rho' c_p' \int_{T_{w1}}^{T_{wm}} dT_w} = \frac{q_1}{\rho' c_p' (T_{wm} - T_{w1})} \quad (\text{III-252})$$

$$Q_2 = \frac{\beta \int_{z_1}^1 (T - T_w) dz}{\rho' c_p' \int_{T_{wm}}^{T_{w1}} dT_w} = \frac{q_2}{\rho' c_p' (T_{wm} - T_{w2})} \quad (\text{III-253})$$

(III-252, 253)式の  $q_1, q_2$  はそれぞれ図積分によって、すなわち Fig. III-5 及び Fig. III-41 から  $T, T_w$  を求め、 $(T - T_w)$  を縦軸、 $z$  を横軸にとってプロットし、その面積に  $\beta$  を乗ずることによって容易に求められる。

上述したように、近似的に最適温度分布をえられるような冷却方式及び冷却流体流量を決定する一つの簡便な設計法を、管内反応物質の最適温度分布曲線及びそれを達成するために必要な管外冷却流体の最適温度分布曲線を利用することによって与えられることを示した。

しかしこのように決定された冷却流体流量  $Q_1, Q_2$  及び入口温度  $T_{w1}, T_{w2}$

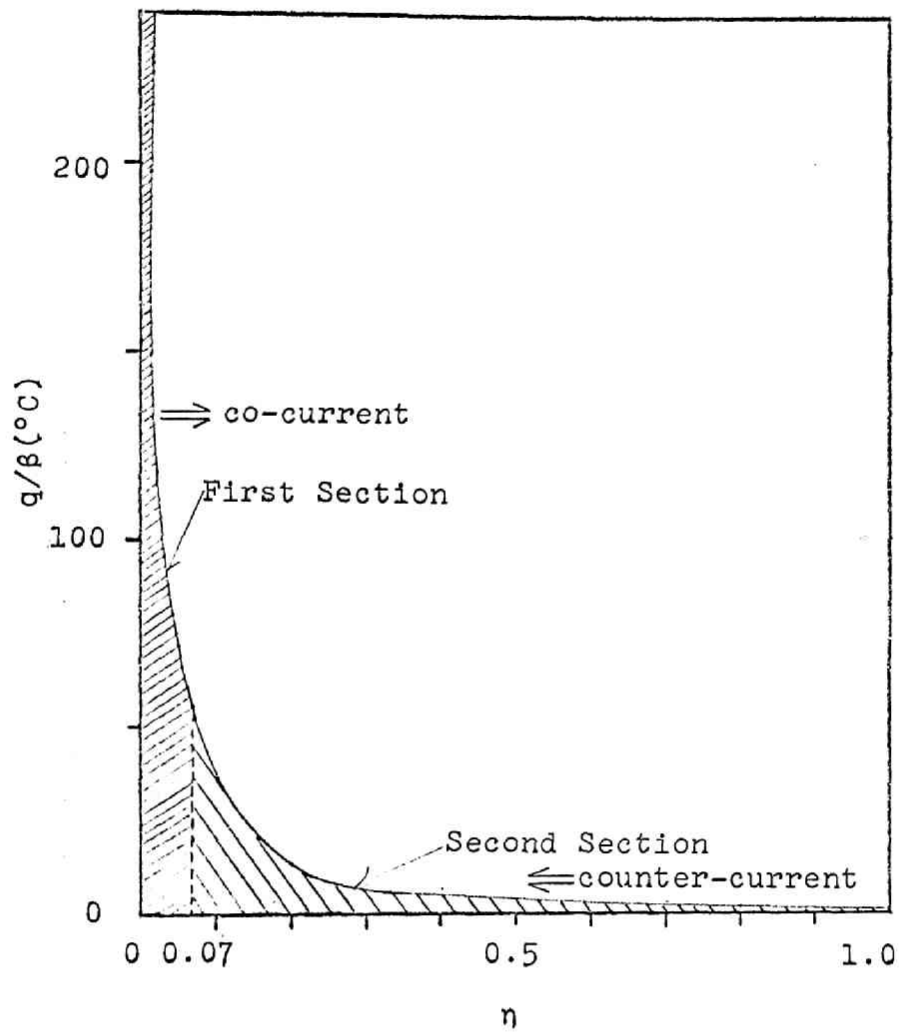


Fig. III-50 Exclusive heat  $q/\beta$  for  $Pe=20$

を用いてどの程度最適温度分布が達成できるかを調べるために、 $Pe=20$ を例にとりて検討してみた。

$Pe=20$ の場合 冷却流体温度  $T_w$  は  $\zeta=\zeta_1=0.07$  でピークを持つ。従ってこの位置を境にして  $0 \leq \zeta \leq 0.07$  では冷却流体  $Q_1$  を並流に、 $0.07 < \zeta < 1$  の範囲では  $Q_2$  を向流に流すべきことがわかる。次に並流、向流に流す冷却流体流量  $Q_1, Q_2$  は、上述したように次のように求まる。まず Fig 3 から冷却流体の入口温度及び出口温度は  $T_{w1}=0(^{\circ}C)$ 、 $T_{w2}=72.0(^{\circ}C)$ 、 $T_{wm}=150.2(^{\circ}C)$  と求まる。次に Fig III-5 Fig III-41 から  $Pe=20.0$  に相当する  $T$  及び  $T_w$  を求め、その差  $(T-T_w)$  を縦軸に、横軸にとりこれをグラフに plot すると Fig III-50 がえられる。この Fig III-50 より図積分によって、除去熱量  $q_1, q_2$  を求めると、(III-252, 253) 式から冷却流体流量  $Q_1, Q_2$  は  $Q_1=8.2$ 、 $Q_2=6.12$  と求められる。ここでこのようにして求めた  $Q_1, Q_2$  を用いてプロセス方程式をみたす転化率、反応流体温度、冷却流体温度を求めてみよう。

<物質収支式>

$$\frac{1}{Pe} \frac{d^2 x_A}{d\zeta^2} - \frac{dx_A}{d\zeta} = D_A \left\{ \frac{H_2}{H_1} x_A^2 \exp(-E_2/RT) - (1-x_A)^2 \exp(-E_1/RT) \right\} \quad (\text{III-254})$$

<境界条件>

$$\frac{1}{Pe} \frac{dx_A}{d\zeta} \Big|_{\zeta=0^+} = x_A \Big|_{\zeta=0^+} \quad (\text{III-255})$$

$$\frac{dx_A}{d\zeta} \Big|_{\zeta=1} = 0 \quad (\text{III-256})$$

<反応物流体の熱収支式>

$$\begin{aligned} \frac{1}{Pe} \frac{d^2 T}{d\zeta^2} - \frac{dT}{d\zeta} - \frac{4k_c}{\rho \cdot C_p \cdot d} \cdot \frac{L}{u} \cdot (T-T_w) \\ = - \frac{(-\Delta H)}{\rho \cdot C_p} \cdot \frac{L}{u} \cdot C_{A0} \left\{ H_1 \cdot (1-x_A)^2 \exp(-E_1/RT) - H_2 \cdot x_A^2 \exp(-E_2/RT) \right\} \quad (\text{III-257}) \end{aligned}$$

<境界条件>

$$\frac{1}{Pe} \left( \frac{dT}{d\zeta} \right) \Big|_{\zeta=0^+} = T \Big|_{\zeta=0^+} - T_{IN} \quad (\text{III-258})$$

$$\frac{dT}{d\zeta} \Big|_{\zeta=1} = 0 \quad (\text{III-259})$$

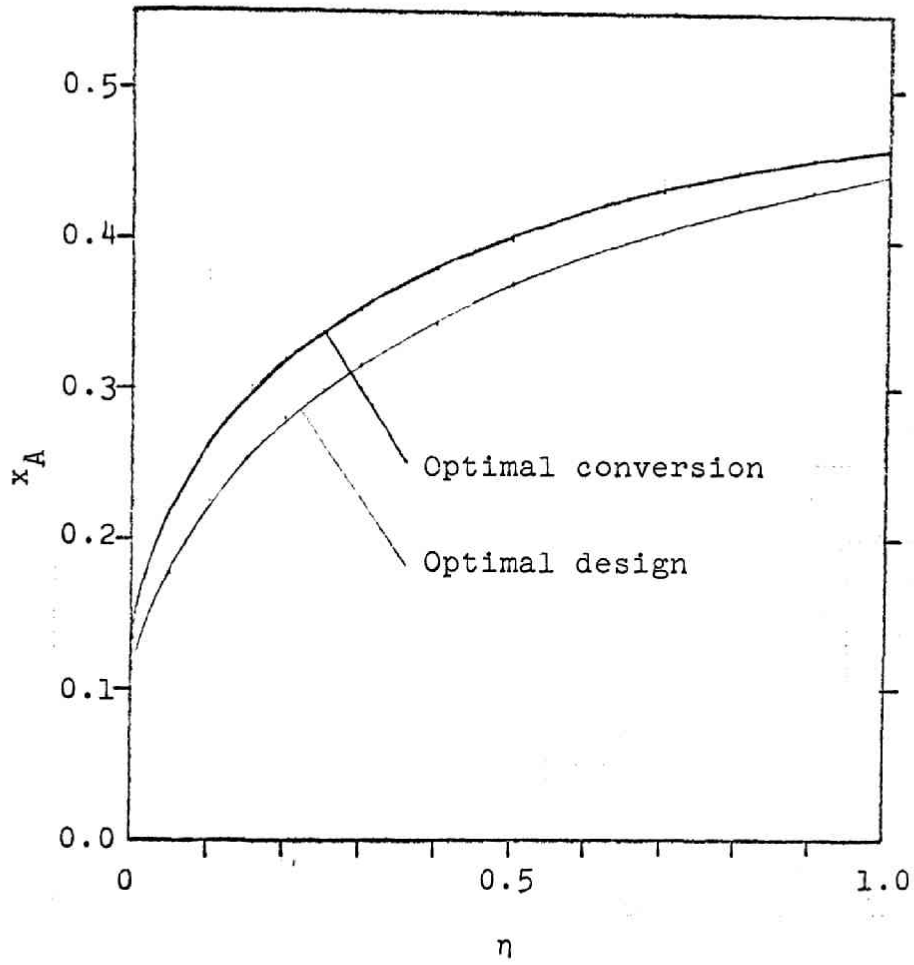


Fig. III-51 Comparison of conversions for  $Pe=20$

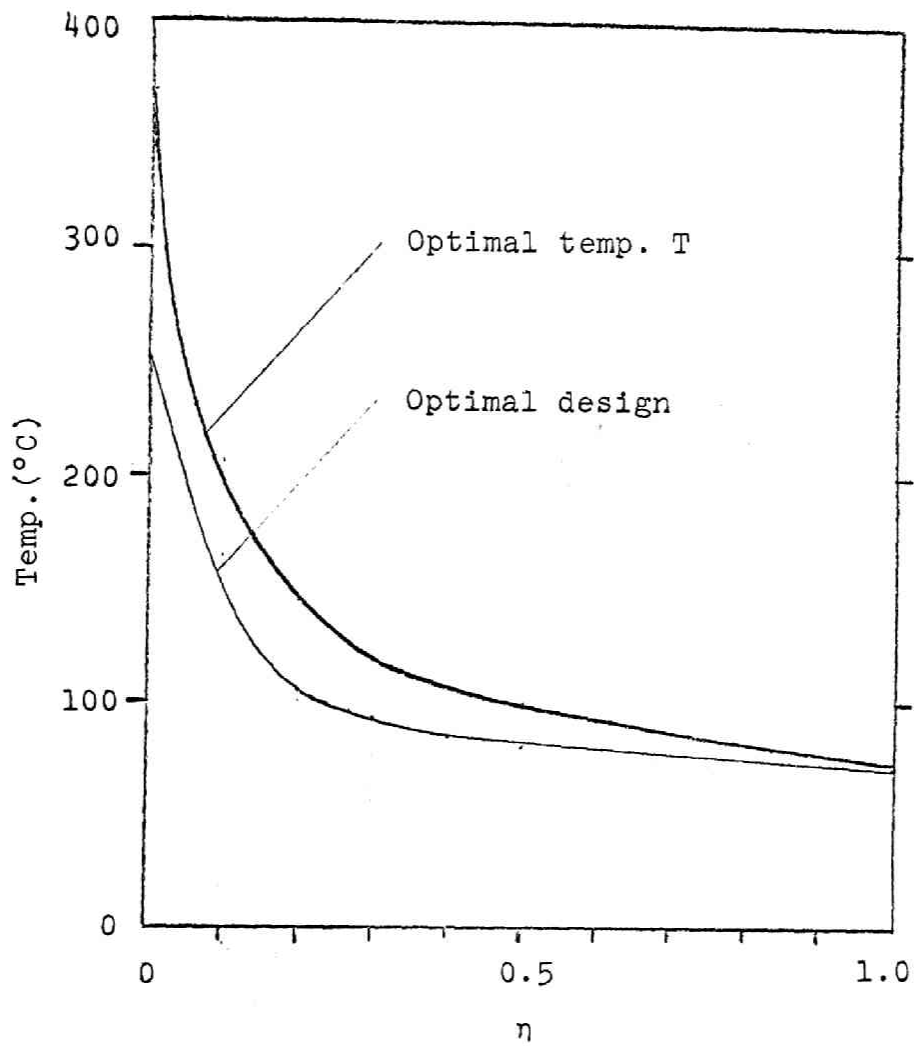


Fig. III-52 Comparison of reactant temperature for  $Pe=20$

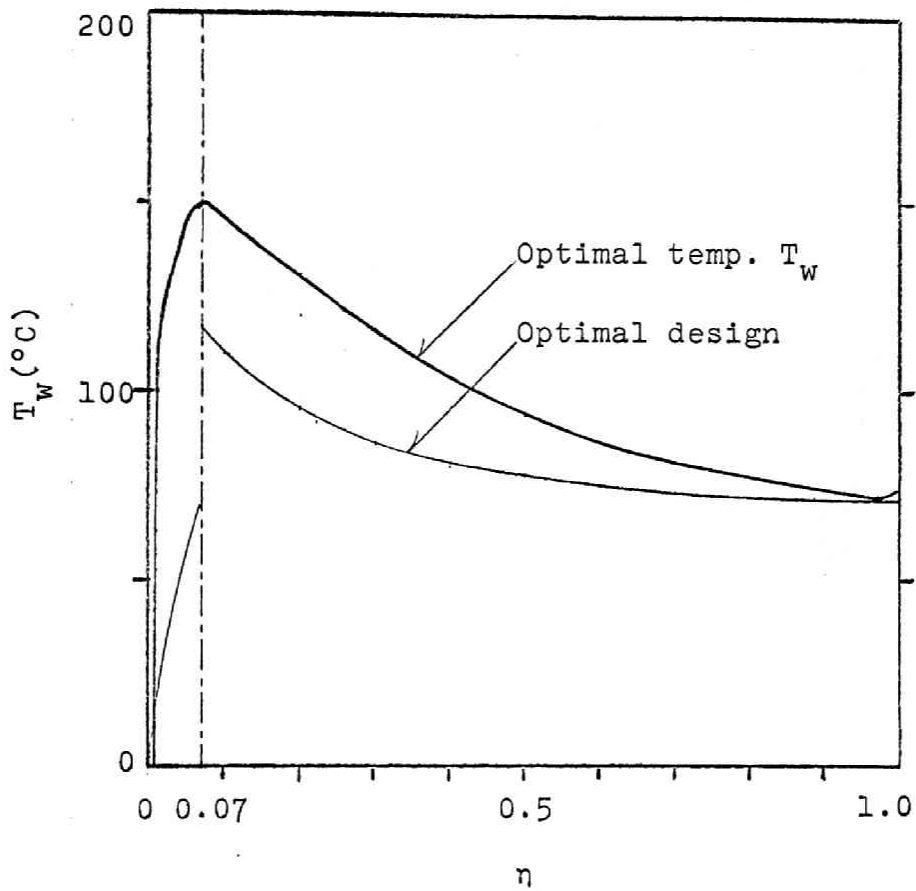


Fig. III-53 Comparison of wall temperature for  $Pe=20$

〈冷却流体の熱収支式〉

$$\frac{dT_w}{dz} = \frac{d \cdot \pi \cdot h \cdot L}{\rho' \cdot C_p'} \cdot \frac{T - T_w}{Q_1} \quad 0 \leq z \leq 0.07 \quad (\text{III-260})$$

$$\frac{dT_w}{dz} = \frac{d \cdot \pi \cdot h \cdot L}{\rho' \cdot C_p'} \cdot \frac{T - T_w}{-Q_2} \quad 0.07 \leq z \leq 1.0 \quad (\text{III-261})$$

〈境界条件〉

$$T_w(0) = T_{w1} \quad (\text{III-262})$$

$$T_w(1) = T_{w2} \quad (\text{III-263})$$

上式を解いて求めた転化率  $X_A$ 、反応流体温度  $T$ 、冷却流体温度  $T_w$  と最適なもの  $X_A$ 、 $T$ 、 $T_w$  との比較を示したのが Fig. III-51, 52, 53 である。

Fig. III-51 から明らかなように最適転化率  $X_A$  とここに示した設計方法に基づいて求めた転化率  $X_A$  との差は 2% 程度である。

### 3) まとめ

本節においては、化学反応器の最適設計および操作に関して、その数式モデルから得られた最適解をいかにすれば、実際のプロセスにおいて実現することができるかという観点から、管型反応器を例にとりあげ、単一可逆二次発熱反応を行なわせた場合の最適温度分布を実際を実現させる方法として、外部熱交換型反応器を考え、冷却方式をどのようにすれば、理想反応操作に最も近い条件がえられるかについて考察した。しかし、この問題に対する決定的な結論は、いまだ出ておらず、多くの研究者によって研究されているのが現状であり、今後の研究成果が最も強く望まれる問題である。

## § 2-5 結論

プロセスシステムの挙動が常微分方程式系で表わされている場合の最適化問題において、モデル中に含まれてくるパラメータの変動や不確かさによって引き起こされる種々の影響を解析するための数理的な方法の基礎について述べ、それらを特に反応プロセスと反応装置の最適操作、設計の問題に適用した。

プロセスシステムの最適化問題はあくまで数式モデルをその出発点としており、またともすれば、数学的に解を求めるという点に注意が集中しすぎ、高等な数的手法と、電子計算機を駆使して求めた解が果して実用上、どの程度の意味を持っているのか、またその解の信頼性がどの程度あるのかといった点がおろそかにされていたことは否めない。

従来の最適化の解は、その意味では点としての情報しか与えていないのに対して、感度解析を行なうことにより、最適点の近接の平面的な情報を提供してくれると考えられる。

今後、プロセスシステムの最適設計、操作の検討には、感度解析的な考察が不可欠であり、さらに感度を考察した上でのシンセシスの方法論の確立が望まれており、それに対する研究もようやく活発になりつつある。



(III-2) 参考文献

- 1) Tomovic, R.; Sensitivity Analysis of Dynamic Systems;  
McGraw-Hill (1968)
- 2) Chang, S.S.L.; Synthesis of Optimum Control System;  
McGraw-Hill (1961)
- 3) Tomovic, R.; The role of sensitivity analysis in engineering problems;  
Sensitivity Methods in Control Theory;  
edited by L. Radanovic Pergamon Press (1966)
- 4) Kokotovic; Poro and R.S. Rutman;  
Sensitivity of automatic control systems (Survey);  
Auto. Remote Control., Vol.26, No.4, (1965)
- 5) Andronov, A.A., A.A. Vitt and S.E. Khaikin:  
"Theory of Oscillators" Pergamon Press (1966)
- 6) Tikhonov, A.N.  
On the systems of differential equations containing parameters; Matem. Sborn., Vol.27, No.1, (1950)
- 7) Vassileva, A.B.  
On the differential equations containing a small parameter; Matem. Sborn., Vol.31, No.3, (1952)
- 8) Nagumo, M.  
Uber das verhalten des Integrals von  
Proc. Phys. Math. Soc. Japan; Vol.21, (1939)
- 9) Pontryagin, L.S.  
Asymptotic behavior of the solutions of systems of differential equations with a small parameter in the higher derivatives; Trans. American Math. Soc. Vol. 18,

- 10) Inoue, K.;  
Studies on Optimal and Sub-optimal Design of Control  
Systems; Doctorial Thesis. Kyoto Univ. (1968)
- 11) 高松武一郎 橋本伊織  
プロセスシステムの最適化と感度解析  
制御工学 Vol. 14, No.5, No.6, (1970)
- 12) Dorato, P.;  
On sensitivity in optimal control systems;  
Trans. I.E.E.E. Vol.AC-8, No.3, (1963)
- 13) Pagurek, B.;  
Sensitivity of the performance of optimal control  
systems to plant parameter variations;  
Trans. I.E.E.E. Vol.AC-10, No.2, (1965)
- 14) Pagurek, B.;  
Sensitivity of the performance of optimal linear control  
systems to parameter variations; Int. J. Control  
Vol.1, No.1 (1965)
- 15) Pagurek, B.;  
Sensitivity of the performance of optimal control  
systems to plant parameter variations;  
Sensitivity Method in Control Theory, edited by  
L.Radanovic, Pergamon Press (1966)
- 16) Wistenhausen, H.S.;  
On the sensitivity of optimal control systems  
Trans. I.E.E.E., Vol.AC-10), No.5, pp495-496 (1965)
- 17) Youla, D.C.; and P.Dorato.;  
On the comparison of the sensitivity of open-loop  
and closed-loop Optimal control systems;

Trans. I.E.E.E. Vol. AC-13, No. 2, pp. 186-188  
(1968)

18) Clark, J. M. C.:

Sensitivity of an optical system to specified errors of measurement; Automatica, Vol. 3, No. 314 (1966)

19) Holtzman, J. M. and S. Horing.:

The sensitivity of terminal conditions to parameter variations: Trans. I.E.E.E. Vol. AC-10, No. 4,  
(1965)

20) Aris, R.; The Optimal Design of Chemical Reaction;  
Academic Press (1962)

21) Roberts, M.; Dynamic Programming in Chemical Engineering  
and Process Control; Academic Press (1964)

23) 西村 肇ら

線型モデル法によるプロセスネットワークの最適化. 化学工学 Vol.31. No.2 p183

24) 久保田 宏

反応操作の最適化. 化学工学 Vol.28. No.10. p913. (1964)

25) Calderbank, P.H.;

Contact-process converter design; C.E.P., Vol.49, pp585-590  
(1953)

26) Denbigh, K.G.;

Velocity and yield in continuous reaction system;  
Trans. Faraday Soc., Vol.40, p352 (1944)

27) 進藤

反応操作の設計とSO<sub>2</sub>転化器(I). 硫酸 Vol.7. p 252 (1954)

28) Bilous, O. and N.R. Amundson;

Optimum temperature gradients in tubular reactors;  
C.E.S. Vol.5, pp81-92, pp115-126, (1956)

- 29) Horn, F.;  
Optimale temperatur und konzentrations verläufe;  
C.E.S., Vol. 14, pp. 77-88 (1961)
- 30) Adler, J. and D. Vortmyer;  
The effect of axial diffusion processes on the optimum  
yield of tubular reactors - I, isothermal reactors with  
simple reversible reaction  $A \rightleftharpoons C$ ; C.E.S., Vol. 18,  
pp. 99-108 (1963)
- 31) Adler, J. and D. Vortmyer;  
The effect of axial diffusion processes on the optimum  
yield of tubular reactors - II, variable temperatures,  
simple reversible reaction  $A \rightleftharpoons C$ ; C.E.S., Vol. 19,  
pp. 413-422 (1964)
- 32) 江口 弥  
流通系における混合模型. 化学工学 Vol. 26. No. 8 p 947 (1962)
- 33) 江口 弥  
流通系装置における逆混合 (2) 化学装置 Vol. 2 No. 12 p 43 (1960)
- 34) Danckwerts, P.V.;  
Continuous flow systems - distribution of residence  
times; C.E.S., Vol., 2, pp. 1-13 (1953)
- 35) Fan, L.T., Y.K. Ahn and L.E. Erickson;  
Effects of product recycle and temperature of auto-  
catalytic reactors; Preprint 18a, Presented by the  
Symposium on Selected Papers in Kinetics, Fifty-Seventh  
National Meeting Minneapolis Minnesota 26-29, Sept. (1965)
- 36) Demaria, Longfield and Butler;  
Catalytic reactor design; I.E.C., Vol. 53, pp. 259-266  
(1961)

- 37) Kramers, H. and K.R. Westerterp;  
Elements of Chemical Reactor Design and Operation;  
Netherlands Univ. Press (1963)
- 38) 高松武一郎 橋本伊織 沢井弥一郎  
管型反応器の最適温度分布に及ぼす流体混合の影響 制御工学  
Vol. 11, No. 9, p469 (1967)
- 39) Takamatsu, T., I. Hashimoto and Y. Sawanoi;  
The effect of fluid mixing on the maximum yield and the  
optimum temperature profile in a tubular reactor (Auto-  
catalytic Reaction); Memoirs of the Faculty of Eng.,  
Kyoto Univ., Vol. XXIX, part 3 (1967)
- 40) Bilous, O. and N.R. Amundson;  
Optimum temperature gradients in tubular reactors-I,II;  
C.E.S., Vol. 5, pp. 81-92, pp. 115-126 (1956)
- 41) Denbigh, K.G.;  
Optimum temperature sequence in reactors; C.E.S.,  
Vol. 8, pp. 125-132 (1958)
- 42) Aris, R.;  
On optimal adiabatic reactors of combined types;  
The Canadian J. of C.E., Vol. , pp. 87-92 (1962)
- 43) 此木 忠三  
多段触媒反応装置設計の理論的研究 化学工学 Vol. 21, No. 7, p408 (1957)
- 44) 此木 忠三  
温度制限のある多段反応装置について 化学工学 Vol. 21, No. 12, p 780 (1957)
- 45) 高松武一郎 橋本伊織 島田晃顕  
固定床管式反応器の最適触媒量とその触媒量余裕に関する一考察  
制御工学 Vol 12, No. 3, P137 (1968)
- 46) Calderbank, P.H.;  
Contact-process converter design; C.E.P., Vol. 49,

- No. 11, pp. 585-590 (1953)
- 47) Thodos, G. and L.F. Stutzman;  
Reaction kinetic studies synthesis of ethyl chloride;  
I.E.C., Vol. 50, No. 3, pp. 413-416 (1958)
- 48) 榎本 義一 井上 紘一  
線形最適制御系の構成における感度解析的考察 制御工学 Vol. 1,  
No. 11, p 26 (1967)
- 49) 沢, 井 弥一郎  
管型反応装置の最適設計及び操作 京都大学修士論文 (1967)
- 50) 高松 武一郎 橋本 伊織 沢, 井 弥一郎  
二通路自己熱交換型反応器の最適化 化学工学協会  
第32年会 336 (1967)
- 51) Van Heerden, C.;  
Autothermic processes - properties and reactor design;  
I.E.C., Vol. 45, p1242 (1953)
- 52) Baddour, R.F., P.L.T. Brian, B.A. Logeais and I.P. Eymery;  
Steady-state simulation of an ammonia synthesis converter;  
C.E.S., Vol. 20, p 281 (1965)
- 53) 大木 善博 加藤 敏郎 井上 博愛 小宮 太郎  
自己熱交換型反応器の Hot Spot について. 化学工学 Vol. 32  
No. 9 p 921. (1968)
- 54) 井上 博愛  
熱交換型反応装置の安定性に関する研究 化学工学 Vol. 33  
No 7 p 598 (1969)
- 55) Friendlar, A.L.;  
A study of guidance sensitivity for various low-  
thrust transfer from earth to mars; NASA TN D-1183 (1961)
- 56) Gavrilovic, M., R. Petrovic and D. Siljak;  
Adjoint method in the sensitivity analysis of optimal

system; Jr. Franklin Inst., Vol. 276, No. 1 (1963)

57) 高松武一郎, 佐山算敏, 外池孝雄

管型反応装置の最適設計と感度解析 制御工学 Vol. 9  
No. 9. (1965)

58) 小西 徹

触媒反応装置の設計  
化学機械 Vol. 16 No. 10 (1952)

59) 楠木浩一郎等

管型反応器の適正冷却条件 化学工学協会第33年会  
研究発表講演要旨集 (D307) (1968)

60) 高松武一郎, 橋本伊織, 沢井弥一郎

管型反応装置の最適冷却方式について, 化学工学協会第32年会  
335 研究発表講演要旨集 (1967)

### Ⅲ-3 感度解析の設計問題への応用

—— 結合された分布定数系における設計変数の余裕量に対する定量的考察 ——

#### § 3-1 緒論

すでに述べて来たように従来の最適化問題の研究においては 基礎的な仮定として 対象とするプロセスプラントの挙動が正確に数式表現できているとしているが 実際には数式モデルは種々の仮定を設けて作られたものであるし、またそのモデル中のパラメータもアイデンティフィケーションの段階で誤差が含まれたり、操業中に変動するものと考えられる。従って一つの数式モデルを基礎にして求められた解がそのまま実際のプロセスに適用されることははなはだ少なく、それぞれの設計変数に余裕量や安全率を見込むことが広く行なわれている。むしろこの安全率に対しては、過去のデータの蓄積からある程度の目安はできているにしても プロセスプラントが複雑になるにつれて各設計変数に正確な余裕量を経験的に見積もることは、ますます困難になろう。

従ってこの設計変数に対する余裕量ないしは安全率を合理的に見積もるには、入力の変動やプロセスプラントのパラメータの変動が一定にしておきたい出力にどの程度の影響を与えるかを知ると同時に、パラメータの変動の悪影響を打消すためには、いずれのプラントの設計変数にどの程度の余裕量を見積もることが必要なのであるかといった基本的な問題を解決しなければならない。

このように化学プロセスの最適設計、操作の研究成果をより現実性のあるものにするためには、感度解析的な考察が是非とも必要であるにもかかわらず、その研究論文はきわめて少なく、わずかに Aris<sup>1,2)</sup>, Takamatsu<sup>3,4,5,6)</sup>, Wang<sup>7)</sup> などの研究がみられるにすぎない。本節では、化学プロセスに多くみられる分布定数系とみなさねばならないプラントが、多段に結合されたシステムの定常最適化問題において、従来安全率という形で見積もられてきた設計変数に対する余裕量を、より定量的に捕える一つの試みとして、感度係数<sup>8,9)</sup>を利用する方法を示す。また具体的な例として §Ⅲ-2-4 でとりあげた反応を固定床管式反応器で行なわせる場合の触媒量余裕と、多段断熱反応器において、種々のパラメータ変動の影響を打消すために必要な反応器容積の余裕量を定量的に決定する問題をとりあげる。



### § 3-2 結合された分布定数系における設計変数の余裕量に対する定量的考察 最適設計問題の定式化

化学プロセスに多くみられる分布定数系の  $N$  段からなる多段直列結合システムにおいて 各プロセスの定常状態は  $i$  段目のプラントの入口から出口方向への任意の位置  $l$  において 次のように表わされる。

〈 プロセス方程式 〉

$$\frac{dx_i}{dl} = f_i(x_i, M_i, P_i) \quad (III-264)$$

$i = 1, 2, \dots, N$   
 $l \in [0, L_i]$

ここに  $L_i$  は  $i$  段目のプラントの全長を表わし、 $x_i(l) = (x_i^1(l), \dots, x_i^n(l))$  は  $i$  番目のプラントの状態変数であり、 $M_i = (M_i^1, \dots, M_i^{m_i})$  は  $l$  に無関係な設計変数である。また  $P_i = (P_i^1, \dots, P_i^{s_i})$  はそのプラントに固有なパラメータである。また各プラント間には 〈 結合条件 〉 として

$$x_i(0) = x_{i-1}(L_{i-1}) \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (III-265)$$

があり、このシステムの入力としては、

$$x_1(0) = \alpha \quad (III-266)$$

またシステムの出出口における束縛条件として

$$x_N(L_N) = \beta \quad (III-267)$$

が要求されているとする。このときこのシステムの定常最適設計の問題は (III-264-267) 式の条件を満たし、かつ次のような評価関数

$$J = \sum_{i=1}^N \int_0^{L_i} f_i^0(x_i, M_i, P_i) dl \quad (III-268)$$

を最小あるいは最大にする設計変数の列  $\{M_i\}$  を見出す問題となる。

#### 感度解析の設計変数余裕量決定への適用

(III-264)~(III-268) で定式化された分布定数系の定常最適設計問題において 単に数理的な解が求まっただけでは、実際的な見地からすると十分ではない。というのは設計計算の段階で一定として取り扱われている流量、原料組成などの操作パラメータや 反応プロセスにおける反応速度式中のパラメータのような rate process に関するパラメータは、いずれにしても操業中に変化したり、アイ

デンプリケーションの段階で誤差が含まれていたりするものであるから(Ⅲ-264)式に含まれているパラメータ $P_i$ は ある程度変動するものとして取り扱わねばならない。従ってパラメータ $P_i$ の変動が(Ⅲ-264~268)式で定式化された最適設計の解に、どの程度の影響を与えるかを知ると同時に、それらのパラメータ変動があっても 建設されるプロセスシステムに要求されている能力が、低減しないように考えておかねばならない。すなわちパラメータ変動の悪影響を吸収させてしまうためには、各プラントの設計変数に、どの程度の余裕量ないしは安全率を見積もっておくことが必要であるのかを知らねばならない。

しかしこれらの点については、従来経験的にのみ決定されていた傾向があり、より合理的にこの余裕量を見積もっていくには、どのようにすべきかという点についての研究は、はなはだ少ないのが現状である。本節では、これらの問題をより定量的に取り扱うための一つの試みとして、感度解析の利用法について考察する。

今、第 $i$ 番目のプラントパラメータ $P_i$ が、その設計時の規準値から少し変動したとし、そのプラントパラメータ $P_i$ に対する感度係数を

$$y_{ij}^k = \frac{\partial x_i^k}{\partial P_i^j} \quad \begin{array}{l} i = 1, 2, \dots, N \\ j = 1, 2, \dots, S_i \\ k = 1, 2, \dots, n \end{array} \quad (\text{Ⅲ-269})$$

$$Y_i = \begin{pmatrix} y_{i1}^1, y_{i2}^1, \dots, y_{iS_i}^1 \\ \vdots \\ y_{i1}^n, y_{i2}^n, \dots, y_{iS_i}^n \end{pmatrix} \quad (n \times S_i) \text{ 行列}$$

とおくと、感度方程式は次のように与えられる。

$$\frac{dY_i}{dP_i} = F_i Y_i + G_i \quad (\text{Ⅲ-270})$$

$$Y_i(0) = 0 \quad (\text{Ⅲ-271})$$

$$F_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_i^1}{\partial x_i^1}, \frac{\partial f_i^1}{\partial x_i^2}, \dots, \frac{\partial f_i^1}{\partial x_i^n} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_i^n}{\partial x_i^1}, \frac{\partial f_i^n}{\partial x_i^2}, \dots, \frac{\partial f_i^n}{\partial x_i^n} \end{pmatrix} \quad (n \times n) \text{ 行列}$$

$$G_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_i^1}{\partial p_i^1} & \frac{\partial f_i^1}{\partial p_i^2} & \cdots & \frac{\partial f_i^1}{\partial p_i^{s_i}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_i^n}{\partial p_i^1} & \frac{\partial f_i^n}{\partial p_i^2} & \cdots & \frac{\partial f_i^n}{\partial p_i^{s_i}} \end{pmatrix} \quad (n \times s_i) \text{ 行列}$$

また第*i*番目のプラントに対する初期値の変動に対する状態変数の影響を示す感度係数を

$$Z_{ij}^k = \frac{\partial x_j^k}{\partial x_i^j(0)} \quad \begin{array}{l} i = 1, 2, \dots, N \\ j = 1, 2, \dots, n \\ k = 1, 2, \dots, n \end{array} \quad (\text{III-272})$$

$$Z_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_i^1}{\partial x_i^1(0)} & \frac{\partial x_i^1}{\partial x_i^2(0)} & \cdots & \frac{\partial x_i^1}{\partial x_i^n(0)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial x_i^n}{\partial x_i^1(0)} & \frac{\partial x_i^n}{\partial x_i^2(0)} & \cdots & \frac{\partial x_i^n}{\partial x_i^n(0)} \end{pmatrix} \quad (n \times n) \text{ 行列}$$

とおくと、

$$\frac{dZ_i}{dL} = F_i Z_i \quad (\text{III-273})$$

$$Z_i(0) = I \quad (n \times n) \text{ 単位行列} \quad (\text{III-274})$$

となり 1～*i*番目までのプラントパラメータの変動によって受ける第*i*番目のプラントの出力  $x_i(L_i)$  の変動量  $\Delta x_i(L_i)$  は

$$\begin{cases} \Delta x_i(L_i) = Y_i(L_i) \Delta p_i + Z_i(L_i) \Delta x_{i-1}(L_{i-1}) \\ \Delta x_i(L_{i-1}) = Y_{i-1}(L_{i-1}) \Delta p_{i-1} + Z_{i-1}(L_{i-1}) \Delta x_{i-2}(L_{i-2}) \\ \vdots \\ \Delta x_i(L_1) = Y_i(L_1) \Delta p_1 + Z_i(L_1) \Delta x_i(0) \end{cases} \quad (\text{III-275})$$

によって容易に知ることができる。

しかしこのようなパラメータ変動の影響を知るだけでなく、いかにしてその影響を吸収しうるプロセスシステムを設計するか、すなわちある程度の不確かさが含まれている情報からより信頼のおけるシステムを設計しうるかが

次に課せられた課題である。

そのために設計変数を設定値から少し異なって与えたとき、幾し番目のプラントにおける状態変数がどのように変化してくるかを示す感度係数を

$$w_{ij}^k = \frac{\partial x_i^k}{\partial M_i^j} \quad \begin{array}{l} i=1, 2, \dots, N \\ j=1, 2, \dots, m_i \\ k=1, 2, \dots, n \end{array} \quad (\text{III-276})$$

$$W_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_i^1}{\partial M_i^1} & \frac{\partial x_i^1}{\partial M_i^2} & \dots & \frac{\partial x_i^1}{\partial M_i^{m_i}} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial x_i^n}{\partial M_i^1} & \frac{\partial x_i^n}{\partial M_i^2} & \dots & \frac{\partial x_i^n}{\partial M_i^{m_i}} \end{pmatrix} \quad (n \times m_i) \text{ 行列}$$

とおくと、感度方程式は

$$\frac{d W_i}{d l} = F_i W_i + E_i \quad (\text{III-277})$$

$$W_i(0) = 0 \quad (\text{III-278})$$

$$E_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_i^1}{\partial M_i^1} & \frac{\partial f_i^1}{\partial M_i^2} & \dots & \frac{\partial f_i^1}{\partial M_i^{m_i}} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial f_i^n}{\partial M_i^1} & \frac{\partial f_i^n}{\partial M_i^2} & \dots & \frac{\partial f_i^n}{\partial M_i^{m_i}} \end{pmatrix}$$

となる。

さて幾し番目のプラントにおいて  $\Delta P_i$  なるパラメータ変動が考えられるとき、その影響を吸収するために、そのプラントの設計変数  $M_i$  に  $\Delta M_i$  なる余裕量を見込み、容積の大小を表わす設計変数とも考えられる  $L_i$  にも  $\Delta L_i$  なる余裕量を見込んだとすると、幾し番目のプラントの出力は設計変数に (III-264~268) で求まった設定値がはいっているときの状態変数の値から  $\Delta x_i(L_i)$  だけ変動する。この変動量と設計変数に対する余裕量、プラントパラメータの変動量との間には (III-269, 272, 276) 式で定義した感度係数を用いることによって次のように関係づけられる。

すなわち幾し番目のプラントにおいて

$$\Delta x_i(L_i) = Y_i(L_i)\Delta P_i + Z_i(L_i)\Delta x_{i-1}(L_{i-1}) + W_i(L_i)\Delta M_i + f_i(x_i(L_i), M_i, P_i)\Delta L_i \quad (\text{III-279})$$

と表わされる。従って今一定にしておきたい第N番目のプラントの出力 $x_N(L_N)$ の変動量は

$$\Delta x_N(L_N) = Y_N(L_N)\Delta P_N + Z_N(L_N)\Delta x_{N-1}(L_{N-1}) + W_N(L_N)\Delta M_N + f_N(x_N(L_N), M_N, P_N)\Delta L_N \quad (\text{III-280})$$

となり、(III-279)式を用いることによって、

$$\begin{aligned} \Delta x_N(L_N) = & f_N\Delta L_N + W_N(L_N)\Delta M_N + Y_N(L_N)\Delta P_N + Z_N(L_N)f_{N-1}\Delta L_{N-1} \\ & + Z_N(L_N)W_{N-1}(L_{N-1})\Delta M_{N-1} + Z_N(L_N)Y_{N-1}(L_{N-1})\Delta P_{N-1} + \dots \\ & \dots \\ & + Z_N(L_N)Z_{N-1}(L_{N-1})\dots Z_2 \left\{ f_1\Delta L_1 + Z_1(L_1)\Delta x_1(0) + W_1(L_1)\Delta M_1 \right. \\ & \left. + Y_{N-1}(L_1)\Delta P_1 \right\} \end{aligned} \quad (\text{III-281})$$

と得られる。従って一定にしておきたい第N番目のプラントの出力 $x_N(L_N)$ の変動量をその許容範囲内におさえ

$$|\Delta x_N(L_N)| \leq \delta\beta \quad (\text{III-282})$$

更に全システムで必要とされる余裕量を最小にする最も効果的な余裕量の見積もり方は(III-281, 282)式を束縛条件とし、

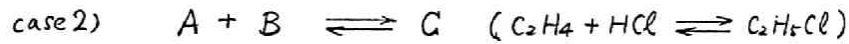
$$\sum_{i=1}^N \tau_i W_i \cdot \Delta \tilde{M}_i \longrightarrow \text{Min} \quad \Delta \tilde{M}_i = (\tau_i \Delta M_i, \Delta L_i) \quad (\text{III-283})$$

ただし $w_i$ はウェイトを表わすパラメーターにする $\Delta M_i$ ,  $\Delta L_i$ を見い出す線型計画法の問題として取り扱えることが示された。

### § 3-3 断熱型固定床管式反応器の触媒量余裕に対する考察

#### 1) 一段断熱反応装置の場合

§3-3 で述べた方法を具体的なプロセスに適用するための例として、まず次の問題を考察する。§III-2-4-2 でとりあげた



の2つの反応系において 所与の転化率をうるために必要な最適触媒量が決定されているとき 種々のパラメーターの変動が与える影響については すでに感度係数を利用することによって容易に知ることができしことを示してきた。しかしこのパラメーター変動の影響の大きさを知るだけでなく 如何にしてこの悪影響を防ぐか すなわちどのようにしてパラメーター変動に対してより安全な系になしうるかが問題となってくる。固定床管型反応器の場合には パラメーター変動の悪影響を防ぐために 所要触媒量に余裕を見積もっておく方法が当然考えられる。すなわち最小触媒量に何%かの余分な触媒量を加えて 種々の悪影響をうまく吸収させようというわけである。この触媒量の余裕が 前節で述べた方法を利用することによって より定量的に決定できることを示す。

§III-2-4-2 の結果から 出口転化率に最も大きい影響を与えるのは いずれの反応においても反応速度パラメーターであることがわかっており その中でも一番大きい影響を与えるのは Case 1 の場合はパラメーター-A Case 2 の場合はパラメーター-Eであるから。この2つのパラメーター変動の影響を小さくするには 触媒量余裕をどの程度みておけばよいかについて検討する。

ここで考察する問題の場合は プロセスの段数Nが1の場合であるから (III-275)式からも容易にわかるように 触媒量を $\Delta L$ だけ増せば 出口転化率の増加 $\Delta X_R$ は

$$\text{次式で表わされる。} \quad \Delta X_R = f|_L \Delta L \quad (\text{III-284})$$

またあるパラメーター $g$ に対する感度係数  $\frac{\partial X}{\partial g} = y$  は 触媒層が $\Delta L$ だけ増加した地点では

$$y|_{L+\Delta L} = y|_L + y'|_L \Delta L \quad (\text{III-285})$$

となり、パラメーター $g$ の変動 $\Delta g$ による出口転化率の減少 $\Delta X_D$ は次式で与えられる。

$$\Delta X_D = y|_{L+\Delta L} \cdot \Delta L = (y|_L + y'|_L \Delta L) \Delta g \quad (\text{III-286})$$

従って(Ⅲ-286)式で表わされるパラメータ変動の影響を消すために必要な触媒量余裕  $\Delta L$  は(Ⅲ-284,286)式から次式で与えられる。

$$\Delta L > \frac{-y|_L \Delta g}{f + y'|_L \Delta L} \quad (\text{Ⅲ-287})$$

§Ⅲ-2-4-2において用いた数値(TableⅢ-1,Ⅲ-2)を同一のものを用いて考察した結果 Case 1の場合、パラメータAがその規準の値から1%変動したときの影響を消すための触媒量余裕を(Ⅲ-287)式から計算してみると、 $\Delta L = 232 \text{ cm}$  (これは  $L_{min}$  の50%に相当する)となり、これだけの触媒層高さの余裕をみれば、パラメータAの変動の影響を打ち消せることになる。パラメータAが1%変動したときに、触媒層任意断面における転化率を直接計算した結果を示すのが Fig.Ⅲ-54の点線である。(この図の縦軸は  $465.6 \text{ cm}$  を1とした相対的な長さを示す) この図からみると(Ⅲ-287)式により計算した触媒量余裕を持つ反応器でも、パラメータAに1%の変動があると、 $x_{out}$  は  $0.787$  で所与の転化率  $0.8$  よりも悪くなっている。これは  $\text{SO}_2$  の酸化反応の場合には出口付近の反応速度がほとんど零すなわち平衡状態に近くなっているためにもはやいくら触媒量を増しても転化率の増加を望めないことに起因している。この結果パラメータAに1%の変動があっても所定の  $x_{out} = 0.8$  をうるには、触媒量に余裕をみるというだけでは不十分なことがわかる。その場合にパラメータに変動があっても出口転化率  $0.8$  を確保するために操作量の1つである入口温度をかえることが考えられる。しかも入口温度を変えた新しい操作はⅢ-242で述べたように新たな最適操作の状態になっていることが望ましい。そのような考え方をもとに計算した結果が Fig.Ⅲ-54に示す一点鎖線である。この曲線は  $x_{out} = 0.82$  に固定したときその最適入口温度は  $388.2^\circ\text{C}$  であり、所要触媒層高さが  $709.2 \text{ cm}$  ( $x_{out} = 0.8$  にしたときの最小所要触媒層高さを1としたとき  $709.2 \text{ cm}$  は  $1.53$  となる)になることを示している。感度解析の結果によると、その触媒量にさらに  $10 \text{ cm}$  の余裕をもたせるとパラメータAの1%変動に対する出口転化率の変動は、 $\Delta x_{out} = 0.014$  になる。すなわち入口温度  $388.2^\circ\text{C}$ 、触媒層高さ  $719.2 \text{ cm}$  という設計を行えば、パラメータAに1%の変動があったときに、出口転化率は  $x_{out} = 0.806$  となることがわかる。以上の結果 Case 1として選んだ例は、設計変数に余裕をみることがパラメータ変動の影響を防ぐ防禦政策に常になっているわけではないことを示している。

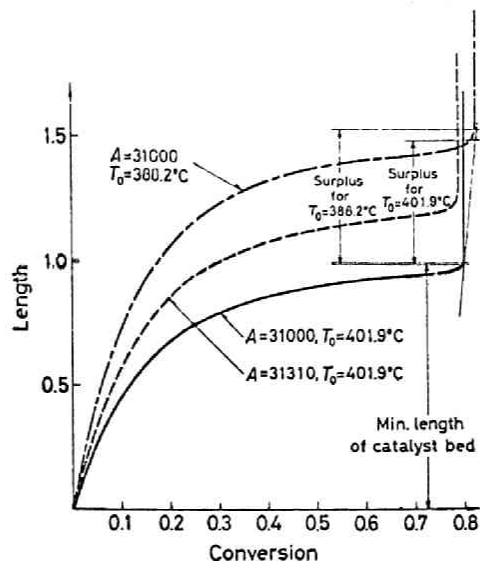


Fig. III-54 Surplus of catalyst volume  
for  $\text{SO}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{SO}_3$

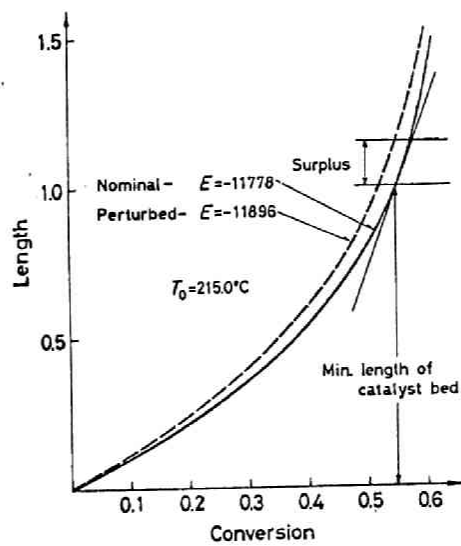


Fig. III-55 Surplus of catalyst volume  
for  $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{HCl} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5\text{Cl}$



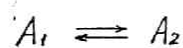
しかし Case 2 の反応の場合 最も大きい影響力をもつパラメーター  $E$  が 1% 変動したとき その影響を打ち消すのに必要な触媒量余裕を (III-287) 式から計算すると  $\Delta L = 19.8 \text{ cm}$  となり Fig. III-55 に示されている直接計算の結果と比較しても 適当な触媒量余裕が与えられていることがわかる。(この図の縦軸は  $153.4 \text{ cm}$  を 1 とした相対的な長さを示す)

このように一応感度解析の結果を用いて触媒量の余裕を決定することができるが (III-287) 式にはパラメーターの変動量  $\Delta \theta$  が含まれているために、この変動量そのものを知ることが、システムの設計に際して必要になってくる。しかし逆にある適当量の触媒余裕を見積もったときには、各パラメーターの変動としてはどの程度のものまで許せるのかは推定できる。

## 2) 多段断熱反応装置の場合

ここでは §3-2 で述べた方法を具体的なプロセスに適用するための第 2 の例として、化学工業で広く用いられている Fig. III-56 に示すような間接中間冷却型多段断熱反応器をとりあげ 所要転化率を得るのに要する全反応器容積を最小にする最適設計<sup>(10, 11, 12)</sup>について考察し、ついで種々のパラメーター変動の影響を消すために 各反応器の容積にのみ余裕量を見込むことにするとき (前節において  $\Delta M_i = 0$  とし  $\Delta L_i$  のみを考えることに相当する) どの程度の余裕量を見積もるべきかについて考察する。

Fig. III-56 に示す多段断熱反応器内で



なる 1 次可逆発熱反応を行なわせるものとする。すなわち 化学量論式は

$$\sum_{j=1}^2 \alpha_j A_j = 0 \quad \alpha_1 = -1, \quad \alpha_2 = 1 \quad (\text{III-288})$$

幾番目の反応器内任意断面  $\eta$  における  $j$  成分についての物質収支をとることに よって  $j$  成分濃度  $C_{ij}(\eta)$  は次の微分方程式をみたすことがわかる。

$$F \cdot \frac{1}{\alpha_j} \cdot \frac{dC_{ij}}{d\eta} = S \cdot r \quad (\text{III-289})$$

ここに  $F$ : 容積流量 [ $\text{m}^3/\text{sec}$ ]

$S$ : 反応器断面積 [ $\text{m}^2$ ]

$C_{ij}$ :  $j$ -成分濃度 [ $\text{kg}\cdot\text{mol}/\text{m}^3$ ]

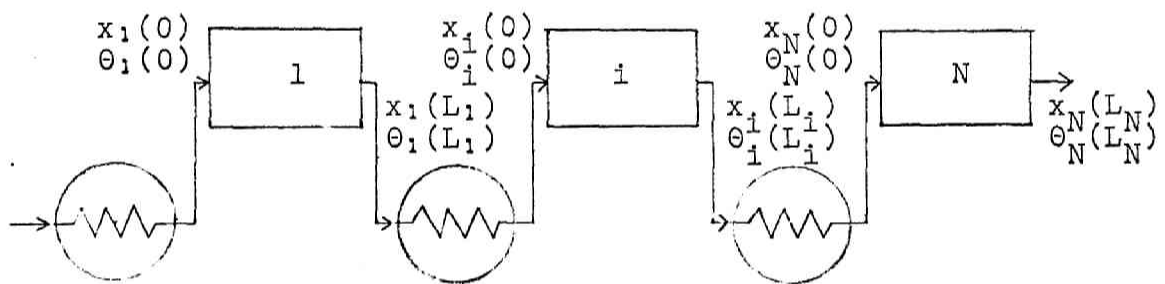


Fig. III-56 Schematic diagram of N-stage reactor



ただし

$$g(x_i) = 1 + \exp(-x_i)$$

$$h(x_i, \Theta_i) = \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{1}{\Theta_i} + c + x_i\right) \right\} \exp\left(-\frac{1}{(e^b - 1)\Theta_i}\right)$$

< 熱収支 >

$$\Theta_i(l) = \frac{\lambda}{1 + e^{-x_i}} + \Theta_{i0} \quad (\text{III-294})$$

ただし

$$\Theta_{i0} = \Theta_i(0) - \frac{\lambda}{1 + e^{-x_i(0)}}$$

したがって多段断熱反応器の第*i*番目の反応器でのプロセス方程式は(III-293, 294)式から次のようになる。

< プロセス方程式 >

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dl} &= f(x_i, \Theta_{i0}, b, c, \lambda) \\ &= g(x_i)h(x_i, \Theta_{i0}, b, c, \lambda) \end{aligned} \quad (\text{III-295})$$

< 境界条件 >

$$x_i(0) = \alpha \quad (\text{given}) \quad (\text{III-296})$$

$$x_{i-1}(L_{i-1}) = x_i(0) \quad (\text{III-297})$$

$$x_N(L_N) = \beta \quad (\text{given}) \quad (\text{III-298})$$

ここに  $L_i$ : 第*i*番目の反応器の無次元長さ

したがって所要転化率  $x_N(L_N) = \beta$  を得るために必要な全反応器容積を最小にする最適設計問題は

< 評価関数 >

$$L = \sum_{i=1}^N L_i = \sum_{i=1}^N \int_{x_{i-1}(L_{i-1})}^{x_i(L_i)} \frac{dx_i}{f(x_i, \Theta_{i0}, b, c, \lambda)} \rightarrow \text{Min.} \quad (\text{III-299})$$

をみたし かつ(III-295~298)式を満足する各反応器入口での反応物質温度の関数  $\Theta_{i0}$  を決定する問題となる。この問題に変分法を適用すると(III-299)式の第1変分は

$$\delta L = \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial x_i(L_i)} \delta x_i(L_i) + \sum_{i=1}^N \frac{\partial L}{\partial \Theta_{i0}} \delta \Theta_{i0} \quad (\text{III-300})$$

ここに

$$\frac{\partial L}{\partial x_i(L_i)} = \frac{1}{f(x_i, \Theta_{i0})} \Big|_{x_i = x_i(L_i)} - \frac{1}{f(x_{i+1}, \Theta_{i+1,0})} \Big|_{x_{i+1} = x_i(L_i)}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \Theta_{i0}} = \int_{x_{i-1}(L_{i-1})}^{x_i(L_i)} \frac{\partial}{\partial \Theta_{i0}} \left( \frac{1}{f(x_i, \Theta_{i0})} \right) dx_i$$

したがって \$L\$ が極値を持つための必要条件として次式がえられる。

$$\begin{aligned} g(x_i(L_i)) h(x_i(L_i), \Theta_{i0}, b, c, \lambda) \\ = g(x_i(L_i)) h(x_i(L_i), \Theta_{i+1,0}, b, c, \lambda) \end{aligned} \quad (\text{III-301})$$

$i = 1, 2, \dots, N-1$

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}(L_{i-1})}^{x_i(L_i)} \frac{1}{g(x_i) \Theta_i^2} \cdot \exp\left(\frac{1}{(e^b - 1) \Theta_i}\right) \\ \times \frac{1 - \exp(x_i + b + c - \frac{1}{\Theta_i})}{\left\{ 1 - \exp(x_i + c - \frac{1}{\Theta_i})^2 \right\}} dx_i = 0 \end{aligned} \quad (\text{III-302})$$

$i = 1, 2, \dots, N$

ただし

$$x_0(L_0) = x_1(0) = \alpha, \quad x_N(L_N) = \beta$$

$$\Theta_i = \frac{\lambda}{1 + e^{-x_i}} + \Theta_{i0}$$

したがって(III-301, 302)式を解くことによって最適な各段の入口温度は \$\Theta\_{i0}\$ から求められる。次にこのように最適設計された多段反応器においてパラメータ \$b, c, \lambda\$ の実際の値がその設計時に用いられた値からずれていたとき所要転化率にどれ程の違いがみられるかを調べる。そのためにはすでに述べたように感度係数を

$$y_{i1} = \frac{\partial x_i}{\partial b}, \quad y_{i2} = \frac{\partial x_i}{\partial c}, \quad y_{i3} = \frac{\partial x_i}{\partial \lambda}$$

$${}^T y_i = (y_{i1}, y_{i2}, y_{i3}), \quad {}^T p = (b, c, \lambda)$$

とおくとき感度方程式および境界条件はそれぞれ次のように与えられる。

$$\frac{dy_i}{dl} = \frac{\partial f}{\partial x_i} y_i + \frac{\partial f}{\partial p} \quad (\text{III-303})$$

$$y_i(0) = 0 \quad (\text{III-304})$$

また初期値の変動に対する感度方程式は

$$\frac{dx_i}{dl} = \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i \quad (\text{III-305})$$

$$x_i(0) = 1 \quad (\text{III-306})$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = -e^{-x_i} \cdot \exp\left(-\frac{1}{(e^b-1)\Theta_i}\right) \left\{ 1 - \exp\left(x_i + c - \frac{1}{\Theta_i}\right) \right\} \\ + (1 + e^{-x_i}) \exp\left(-\frac{1}{(e^b-1)\Theta_i}\right) \left[ \frac{\lambda e^{-x_i} \left\{ 1 - \exp\left(x_i + c - \frac{1}{\Theta_i}\right) \right\}}{(e^b-1)\Theta_i^2 (1 + e^{-x_i})^2} \right. \\ \left. - \left(1 + \frac{\lambda e^{-x_i}}{\Theta_i^2 (1 + e^{-x_i})}\right) \exp\left(x_i + c - \frac{1}{\Theta_i}\right) \right]$$

$$\frac{\partial f}{\partial P_1} = \frac{\partial f}{\partial b} = g(x_i) h(x_i, \Theta_i, b, c, \lambda) \frac{e^b}{(e^b-1)^2 \Theta_i}$$

$$\frac{\partial f}{\partial P_2} = \frac{\partial f}{\partial c} = -g(x_i) \exp\left(-\frac{1}{(e^b-1)\Theta_i}\right) \exp\left(x_i + c - \frac{1}{\Theta_i}\right)$$

$$\frac{\partial f}{\partial P_3} = \frac{\partial f}{\partial \lambda} = \exp\left(-\frac{1}{(e^b-1)\Theta_i}\right) \left\{ 1 - \exp\left(x_i + b + c - \frac{1}{\Theta_i}\right) \right\} / (e^b-1)\Theta_i^2$$

これらの式を解くことにより、第N番目の反応器出口濃度 $x_N(L_N)$ の目標値からのずれは

$$\begin{cases} \Delta x_N(L_N) = \sum_{j=1}^3 y_{Nj}(L_N) \Delta P_j + Z_N(L_N) \Delta x_{N-1}(L_{N-1}) \\ \vdots \\ \Delta x_i(L_i) = \sum_{j=1}^3 y_{ij}(L_i) \Delta P_j + Z_i(L_i) \Delta x_{i-1}(L_{i-1}) \\ \vdots \\ \Delta x_1(L_1) = \sum_{j=1}^3 y_{1j}(L_1) \Delta P_j + Z_1(L_1) \Delta x_1(0) \end{cases} \quad (\text{III-307})$$

の漸化式から容易に求められる。

さらにこのような多段断熱反応器において、パラメーター変動の影響を、各反応器容積に余裕量を見積もることによって打消そうとするとき、最も効果的な余裕量の配分の仕方について考えてみる。

パラメーター変動があっても、目的とする $x_N(L_N)$ の変動を、その許容範囲内におさえかつそのとき必要となる総余裕量を最小にするためには

$$|\Delta x_N(L_N)| \leq \delta \beta \quad (\text{III-308})$$

ただし

$$\Delta x_N(L_N) = f_N \Delta L_N + \sum_j y_{Nj}(L_N) \Delta P_j + Z_N(L_N) f_{N-1} \Delta L_{N-1} + Z_N(L_N) \sum_j y_{N-j}(L_{N-1}) \Delta P_j \\ + Z_N(L_N) Z_{N-1}(L_{N-1}) f_{N-2} \Delta L_{N-2} + Z_N(L_N) Z_{N-1}(L_{N-1}) \sum_j y_{N-2j}(L_{N-2}) \Delta P_j \\ + \dots + Z_N(L_N) \dots Z_2(L_2) Z_1(L_1) \Delta x_1(0)$$

$$\sum_{i=1}^N \Delta L_i \longrightarrow \text{Min.} \quad (\text{III-309})$$

	$c$			
$b=1.0$	4.0	5.0	6.0	7.0
	$b$			
$c=6.0$	0.5	1.5	2.0	

Table III-6 Nominal value of parameter

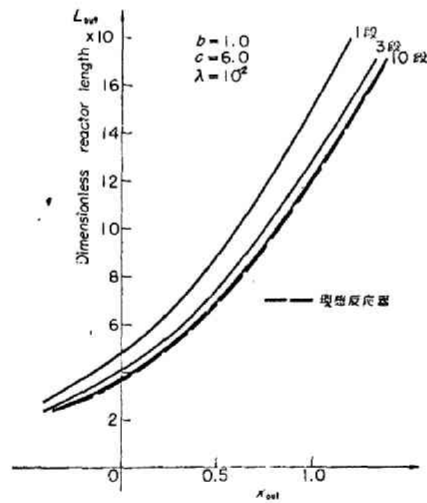


Fig. III-57 Dimensionless reactor length of optimal adiabatic reactor

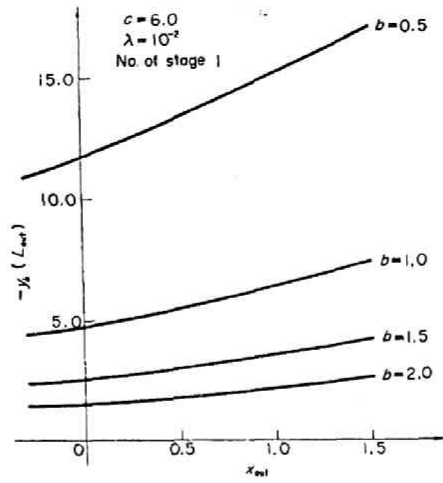


Fig. III-58 Effect of the change of parameter  $b$  on the sensitivity coefficient  $y_b$

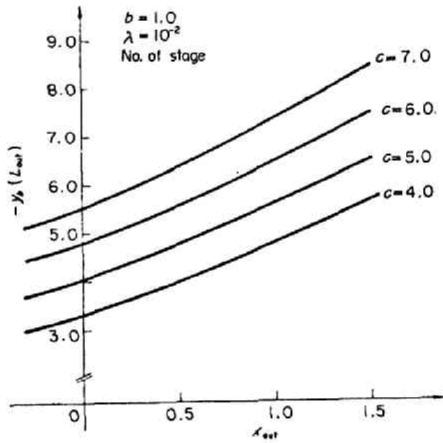


Fig. III-59 Effect of the change of parameter  $c$  on the sensitivity coefficient  $y_b$

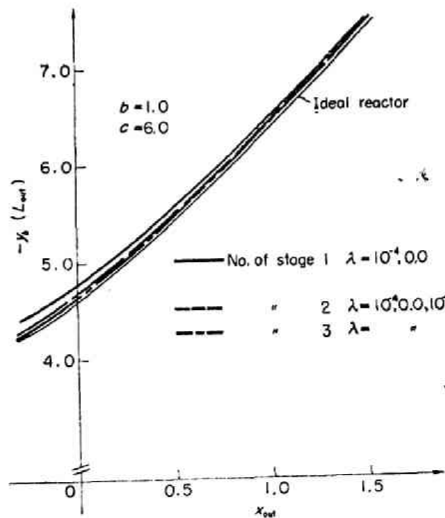


Fig. III-60 Effect of the change of parameter  $\lambda$  and the number of stages on the sensitivity coefficient  $y_b$



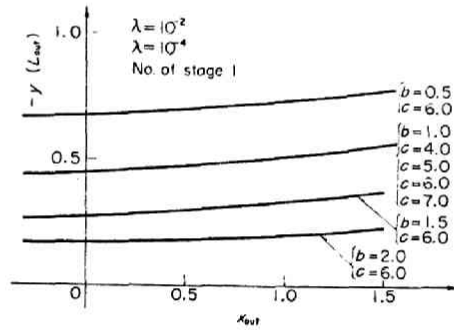


Fig. III-61 Effect of the change of parameter  $b$  and  $c$  on the sensitivity coefficient  $y_c$

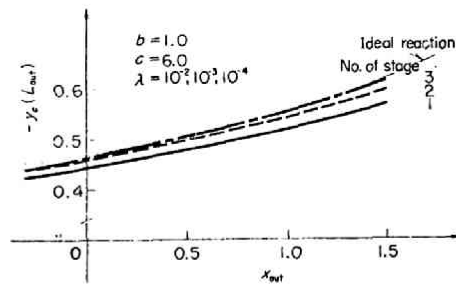


Fig. III-62 Effect of the change of parameter  $\lambda$  and the number of stages on the sensitivity coefficient  $y_c$

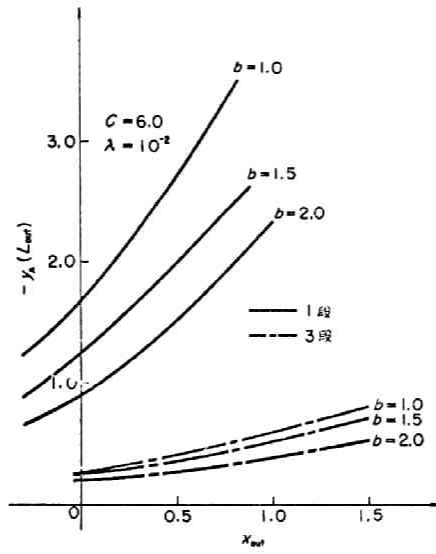


Fig. III-63 Effect of the change of parameter  $b$  on the sensitivity coefficient  $y_\lambda$

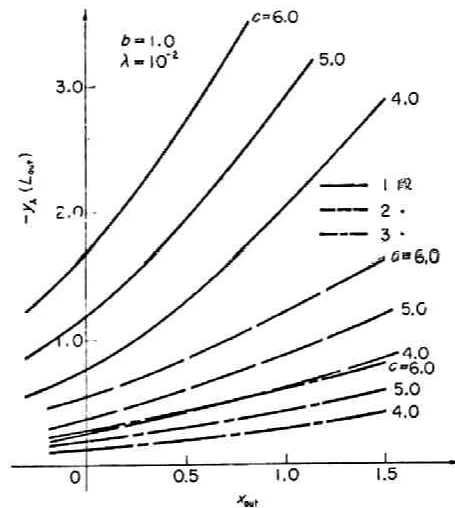


Fig. III-64 Effect of the change of parameter  $c$  on the sensitivity coefficient  $y_\lambda$

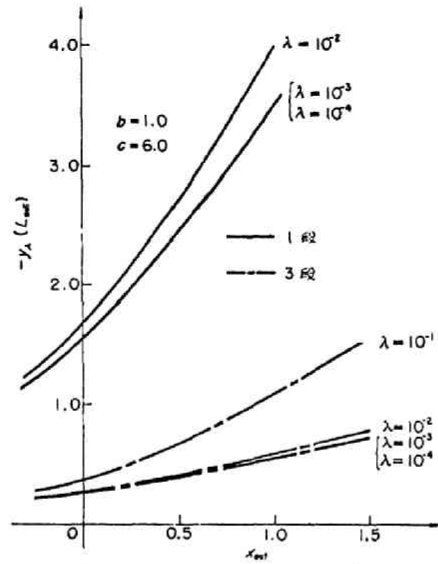


Fig. III-65 Effect of the change of parameter  $\lambda$  on the sensitivity coefficient  $y_\lambda$

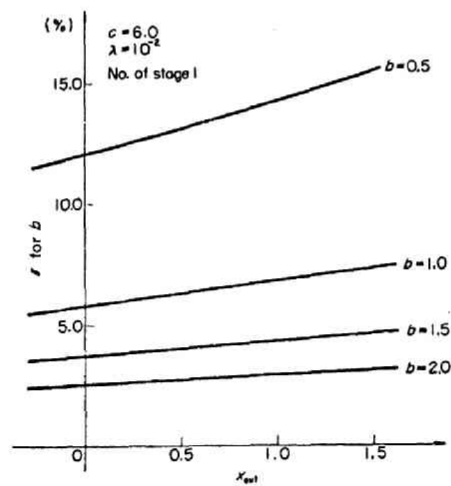


Fig. III-66 Design margin of reactor length to compensate the effect of parameter variation of  $b$  for various nominal value of  $b$

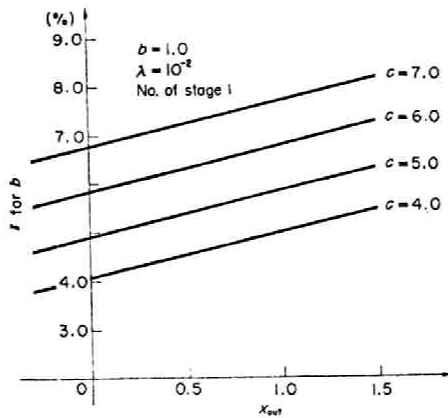


Fig. III-67 Design margin of reactor length to compensate the effect of parameter variation of  $b$  for various nominal value of  $\lambda$

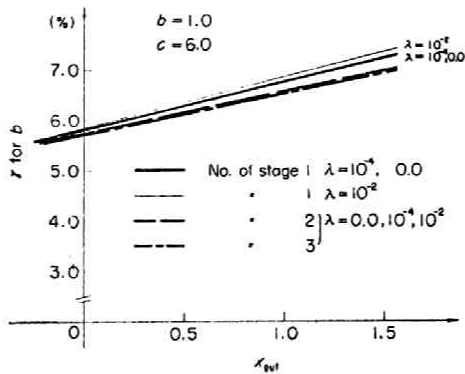


Fig. III-68 Design margin of reactor length to compensate the effect of parameter variation of  $b$  for various nominal value of  $c$

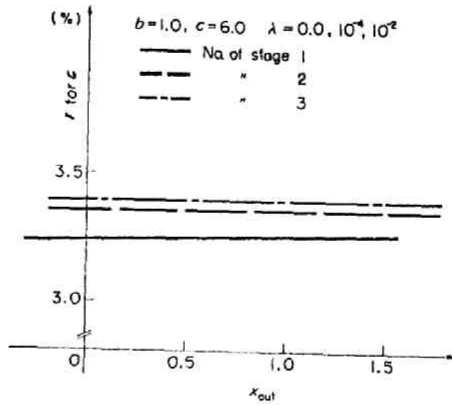


Fig. III-69 Design margin of reactor length to compensate the effect of parameter variation of  $c$  for various nominal value of  $\lambda$

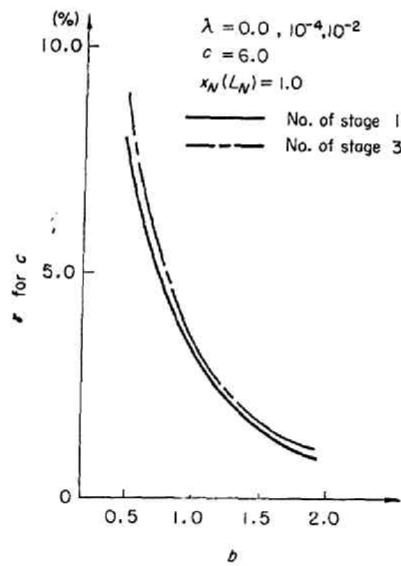


Fig. III-70 Design margin of reactor length to compensate the effect of parameter variation of  $c$  vs. nominal value of parameter  $b$

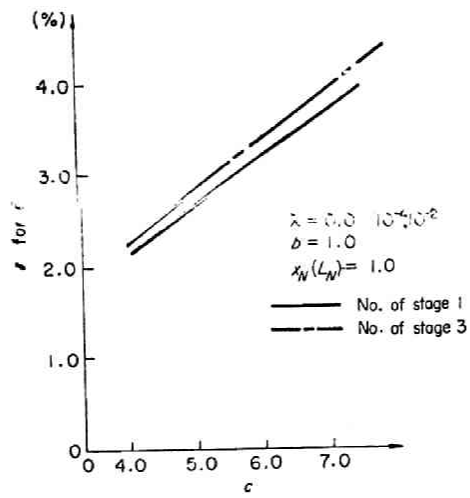


Fig. III-71 Design margin of reactor length to compensate the effect of parameter variation of  $c$  vs. nominal value of parameter  $c$

となる  $\Delta L_i$  を求めればよい。

### 数値計算結果と考察

数値計算に用いたパラメーター  $b, c, \lambda$  の値は Table III に示す。また断熱型反応器の温度を示すパラメーター  $\lambda$  については  $b, c$  の各値について  $\lambda = 10^4, 10^3, 10^2$  の3つの場合について計算を行なった。なお外部熱交換型反応器の特殊な例として等温反応器があるが この種の反応器については 解析上  $\lambda = 0$  の断熱型反応器と考えてもよく、その意味から  $\lambda = 0$  についても計算を行なった。パラメーター  $b$  は逆反応・正反応の活性化エネルギーの比の対数 また  $c$  は頻度因子の比の対数である。したがって  $b$  が小さく  $c$  が大きいほど逆反応の速度定数が大きく 可逆性の強い反応系になる。

多段断熱反応器によって、ある反応を行なわせて 所要の転化率を得るために、果して何段程度がよいのか また段数を増加することによって、全反応器容積をどの程度減少させるかを調べるために、 $b = 1.0, c = 6.0, \lambda = 10^2$  の場合に、すでに述べた最適設計を行なった結果を 横軸に所要出口転化率 縦軸に全所要反応器長さをとり 段数をパラメーターとして表示したのが Fig. III-57 である。また図中の点線で示してあるのは理想反応器（すなわち反応器任意断面  $(\partial r / \partial T = 0$  が満足されるように温度分布を持たせた反応器) についての所要反応器長さを示している。この図より、段数は3段以上にするによって、理想反応器に非常に近づけられることを示している。

Fig. III-58, III-59, III-60 はパラメーター  $b$  の変動による出口転化率の変動の程度を示す感度係数  $y_b(L_{out})$  が パラメーター  $b, c, \lambda$  および段数によってどのように変化するかを示したものである。 $y_b$  は正の符号を持ち  $b$  の値が実際の数値よりも小さく固定されている場合には、実際の出口転化率  $x_N(L_N)$  は計算より高くなることがわかる。Fig. III-58 III-59 は1段目の反応器に対する結果であるが  $b$  が小さく、 $c$  が大きいほど、すなわち反応の可逆性が強いほど、また所要転化率の設定値が高いほど、感度係数の値は大きくなる。Fig. III-60 によると 感度係数は  $\lambda$  の値にはほとんど影響されず、また段数が増加してもわずかに変化しない。また図中実線で示されているのは、理想反応器についての結果であるが、両者の反応器形式の違いは  $y_b$  にほとんど影響を与えていない。

Fig. III-61 III-62 は  $c$  の変動による出口転化率変動の程度を示す  $y_c(L_{out})$  が

パラメーター  $b$ ,  $c$ ,  $\lambda$  および段数によってどのように変化するかを示したものである。Fig. III-61 から  $\eta_c(L_{out})$  の値は  $b$  の値が大きいほど小さくなるが  $c$  の値の大小にはほとんど無関係であることがわかる。Fig. III-62 はパラメーター  $\lambda$  および段数  $N$  によって  $\eta_c(L_{out})$  がどのように変わるかを示したものであるが  $\eta_b$  と同様ほとんど変化しない。

Fig. III-63 III-64 より  $b$  の値が小さいほどかつ  $c$  の値が大きいほど、すなわち可逆性の強い反応系ほど  $\eta_\lambda$  の値は大きくなる。また Fig. III-65 は  $\eta_\lambda$  の値は  $\lambda$  の値が大きいほど大きいことを示しているが、いずれの場合も段数を増加させることはパラメーター  $\lambda$  に対する感度を著しく低下させることになることがわかる。

次にパラメーター変動による最終段出口濃度の目標値からのずれを打消すのに必要な各段における反応器長さの余裕量を §3-3 に従って決定するために  $(\Delta L_i)$  の係数を比較したところ、すべて等しくなり、いずれの段に余裕を見積もってもシステム全体としては全く同じ効果を持つことが明らかとなった。そこで各パラメーターが一定の割合で変動したとき、その影響を打消すのに必要な容積の余裕量がもとの反応器容積に対してどの程度になるかを検討した。

Fig. III-66 III-67 には、パラメーター  $b$  のみに1%の変動あるいは誤差が含まれているとき、その影響を完全に打消してしまうために、すなわちパラメーター変動による  $x_n(L_n)$  の変動量を  $\Delta x_n(L_n) = 0$  にするに必要な反応器長さに対する総余裕量を、最適反応器長さを基準にして %表示したものを  $r$  で表している。この場合もやはりパラメーター  $b$  が小さく、 $c$  が大きいほど、すなわち可逆性の強い反応系ほど、同じパラメーター  $b$  の変動量に対しても、それを打消すためには、大きい余裕量を必要とすることを示している。Fig. III-68 はパラメーター  $\lambda$ 、段数によって  $r$  がうける影響を示す図であるが  $\lambda$  はほとんど影響を与えず、段数が増加することによって、わずかに  $r$  が減少することを示している。

Fig. III-69, III-70, III-71 はパラメーター  $c$  のみに1%変動がある場合の  $r$  を示しているが、この場合も、パラメーター  $b$  が小さく、 $c$  が大きい反応系、すなわち可逆性の強い反応系ほど余裕量は大きくなることがわかる。



### § 3-4 結論

従来 経験的に見積もられてきた 設計変数に対する余裕量を より定量的に取扱うための一つの方法として 感度解析の概念を利用することを示し その結果を 1段および多段断熱反応器に適用した。種々のパラメータ変動の影響を打消すためには、どの程度の反応器容積に対する余裕量が必要であるかを感度係数を用いて ある程度知ることを示した。今後このような方法をさらに開発することによって 従来あまり定量的な考察のされてなかった設計変数の余裕量や安全率というものが もっと明確になると考えられる。またここでは多段直列系を中心として 議論を進めてきたが、任意に結合されたシステムについても一定と考えられる設計変数に対する余裕量については、本論文で示した方法が用いられる。しかし任意に結合されたシステムの最適設計を取扱う手法は、まだ発展途上であり 確定した手法がないので あえてどんな最適化手法でも取扱う直列多段結合システムを中心として 感度解析の利用について論じた。ここで述べた Design Margin という考え方の他に 感度 という概念を直接シミュレーションに組み込み パラメータ変動に対して 低感度なシステムを設計しようとする方法もいくつか研究されているが<sup>13~16)</sup> それも制御システムのための設計問題に限定されており 制御システムをも含んで プロセスシステムを最適かつ低感度なシステムに設計するためには、今後この方面の研究がより一層 発展することが望まれている。

(Ⅲ-3) 参考文献

- 1) Aris, R.;  
Is sophistication really necessary ?; I.E.C., Vol. 58,  
No. 9, pp. 32-37 (1966)
- 2) Ray, W.H. and R. Aris;  
Rationale for optimal reactor design; I.E.C. Fundamentals,  
Vol. 5, No. 4, pp. 478-483 (1966)
- 3) 高松武一郎 橋本伊織 島田晃顕  
固定床管式反応器の最適触媒量とその触媒量余裕に関する一考察  
制御工学 Vol. 12, No. 3, p137 (1968)
- 4) Takamatsu, T. and I. Hashimoto;  
Optimum design and operation of chemical process from the  
point of view of sensitivity analysis; I.F.A.C. Symposium,  
Dubrovnik, August (1968)
- 5) Takamatsu, T., I. Hashimoto and H. Ohno;  
Optimum design of a large complex system from the view-  
point of sensitivity analysis; I.E.C. Process Design and  
Development, Vol. 9, p368 (1970)
- 6) 高松武一郎 橋本伊織 島田晃顕  
結合された分布定数系の定常最適設計問題への感度解析の応用について  
制御工学 Vol. 13, No. 3, p225 (1969)
- 7) Chang, T.M. and C.Y. Wen;  
Sensitivity analysis in optimal systems based on the  
maximum principle; I.E.C. Fundamentals, Vol. 7, No. 3,  
pp. 422-429 (1968)
- 8) Tomovic, R.;  
Sensitivity Analysis of Dynamic Systems; McGraw-Hill Book  
Company Inc. (1962)

- 9) Radanovic, L.;
- Sensitivity Methods in Control Theory; Pergamon Press  
(1966)
- 10) 此木忠三
- 多段触媒反応装置設計の理論的研究 化学工学 Vol. 21,  
No. 7, p 408 (1957)
- 11) 此木忠三
- 温度制限のある多段反応装置について. 化学工学 Vol. 21,  
No. 12, p 780 (1957)
- 12) Aris, R.;
- Introduction to the Analysis of Chemical Reactors;  
Prentice-Hall Inc. (1965)
- 13) Tuel, W.G.Jr., I. Lee and P.M. Derusso;
- Synthesis of optimal control system with sensitivity  
constraints; Preprint of 3rd I.F.A.C. Congress at London,  
paper 24-B (1966)
- 14) Sawaragi, Y., K. Inoue and K. Asai;
- Optimum control synthesis by sensitivity consideration;  
Preprint of 2nd I.F.A.C. Symposium on System Sensitivity  
and Adaptivity, paper E-52, Yugoslavia (1968)
- 15) Chen, M.S.K., L.E. Erickson and L.T. Fan;
- Consideration of sensitivity and parameter uncertainty  
in optimal process design; private communication (1970)
- 16) Chen, M.S.K., L.E. Erickson and L.T. Fan;
- Sensitivity analysis and optimal design strategy with  
parameter uncertainty of the activated sludge system;  
private communication (1970)

## 謝 辞

本研究を行なうに際して 終始ご懇切なご指導を賜わった  
京都大学工学部高松武一郎教授 またご鞭達を賜わった京都大学  
工学部衛生工学、数理工学ならびに化学工学教室の諸先生方に深甚  
なる謝意を表します。

また 計算の際にご協力を得た 沢井 弥一郎 島田 晃顕 飛田 哲  
夫の諸兄 さらに有益なご討論をいただいた 岡山大学工学部 佐山  
隼敏 大井 紘 神戸大学工学部 中西 英二先生や、塩谷 捨明、  
大野 弘君をはじめとする高松研究室の各位に対して 心から  
お礼申し上げます。



