

新 制
工
1134

化学プロセスにおける状態量の推定と制御

1998 年

加 納 学

化学プロセスにおける状態量の推定と制御

1998 年

加納 学

目次

第 1 章 序論	5
1.1 プロセス制御の現状と課題	5
1.2 推定制御	8
1.3 モデル予測制御	10
1.4 本研究の目的と論文の構成	11
1.5 引用文献	13
第 2 章 線形回帰手法	21
2.1 緒言	21
2.2 最小二乗法と多重共線性	22
2.2.1 通常の最小二乗法 (OLS)	22
2.2.2 多重共線性	23
2.3 最小二乗法の拡張	23
2.3.1 最小ノルム解	24
2.3.2 主成分回帰 (PCR)	25
2.3.3 リッジ回帰 (RR)	26
2.4 Partial Least Squares Regression	27
2.4.1 PLS の基本概念	27
2.4.2 潜在変数の選択基準	28
2.4.3 潜在変数の導出	30
2.4.4 採用する潜在変数の決定	40
2.5 結言	43

2.6	記号説明	44
2.7	引用文献	45
第3章	ナフサ分解炉反応管外壁温度の推定	49
3.1	緒言	49
3.2	ナフサ分解炉の概要	51
3.3	物理モデルの構築	54
3.3.1	コーク成長速度モデル	54
3.3.2	スキン温度の伝熱モデル	57
3.3.3	物理モデルの離散化	60
3.3.4	物理モデルによるスキン温度の推定	61
3.4	物理モデルと統計モデルの統合	67
3.4.1	PLSモデルの構造	68
3.4.2	PLSモデルの構築	69
3.4.3	推定システムの検証	74
3.5	結言	74
3.6	記号説明	76
3.7	引用文献	78
第4章	多成分蒸留塔における製品組成の推定制御	81
4.1	緒言	81
4.2	蒸留塔組成推定制御に関する従来の研究	84
4.2.1	塔内温度制御	85
4.2.2	複数の塔内温度を利用した制御	87
4.2.3	Brosilow 推定器	88
4.2.4	PLS 推定器	89
4.3	問題設定	91
4.3.1	蒸留塔の設定	91
4.3.2	ダイナミックシミュレーションの設定	94
4.4	組成推定モデル	99

4.4.1	PLS	100
4.4.2	定常状態モデル	101
4.4.3	静的モデルおよび動的モデル	105
4.5	組成推定制御	124
4.5.1	塔内温度制御	124
4.5.2	組成推定制御	127
4.5.3	カスケード制御	130
4.6	結言	133
4.7	記号説明	134
4.8	引用文献	135
第 5 章	2 型モデル予測制御系の設計	139
5.1	結言	139
5.2	安定プロセスに対する 2 型モデル予測制御系の設計	141
5.2.1	アルゴリズム	141
5.2.2	コントローラ	145
5.2.3	閉ループ方程式	147
5.2.4	予測フィルタの設計条件	149
5.2.5	2 型制御系の設計	150
5.2.6	制御シミュレーション	162
5.3	積分要素を有するプロセスに対する 2 型モデル予測制御系の設計	178
5.3.1	アルゴリズム	181
5.3.2	コントローラ	184
5.3.3	閉ループ方程式	186
5.3.4	予測フィルタの設計条件	188
5.3.5	2 型制御系の設計	190
5.3.6	反射炉プロセスの制御	193
5.4	結言	198
5.5	記号説明	201
5.6	引用文献	203

第 6 章 総論

205

謝辞

209

第1章

序論

1.1 プロセス制御の現状と課題

21世紀を目前に控え、化学産業界では、省資源省エネルギー化および製品の高品質化へ向けた取り組みによって、装置自体はもとよりプロセス全体の構造が複雑化してきている。また、環境問題への意識の高まりは生産プラントに対する排出規制を厳しくし、環境負荷を低減できるプラントの設計および運転が強く求められている。このような状況下で、運転の高度化や情報の統合化など様々な対策が講じられるとともに、プラント全体を最適に運転するための知的運転支援システムの開発が必要となってきた。そして、次世代を担う知的運転支援システムにとって必要不可欠な要素技術の1つがプロセス制御である。

従来、プロセス制御と言えば、圧力、温度、液レベル、流量の定値制御がすべてであり、PID制御の調整が主要な問題であると思われがちであった。実際、計算機ハードウェアの向上や新しい制御理論の発展にもかかわらず、1960-70年代には、プロセス産業界において高度制御手法の導入はそれほど進まなかった。この理由として、以下のような点が指摘されている^[1,2]。

現代制御理論では、制御対象の動特性を十分な精度で表現できるモデルが必要不可欠である。しかし、化学プロセスを対象とする場合、現象が非常に複雑でモデル化が困難なことに加えて、モデルが得られたとしても、当時の計算機レベルではそのような複雑なモデルを制御系の設計に直接利用できないことが多かった

ため、精密なモデルに基づく制御系設計は決して実用的な方法ではなかった。また、プロセスの特性は運転中に徐々に変化していくことが多いばかりか、原料や製品仕様などの変更によっても大きく変化する。したがって、プロセスの特性を高い精度で長期間表現可能なモデルを構築することは困難であった。モデル化誤差を補償するために、コントローラを現場で適宜調整することも考えられるが、この調整作業の容易さという観点においても、現代制御理論はPID制御に大きく劣るものであった。さらに、現代制御理論が多変数系の制御応答の改善を重視したのに対して、制御変数と操作変数の選択やセンサーの選択など、制御性能を議論する以前の問題が現実にはより重要であった。これらの問題に加えて、現代制御理論を実装できるほどの能力を備えた計算機は大変高価であり、コスト的にプラントへ導入できないという問題もあった。

しかし、1970年代も後半になると、計算機の性能向上と低廉化は驚異的な速度で進むようになった。特に、1975年のHoneywellによる分散型制御システム(DCS)の開発によって、制御系の空間的分散化、情報処理機能の階層化が可能となった。一方、1970年代後半に誕生したモデル予測制御はプロセス産業界に急速に浸透し、プロセス制御の高度化に大きく貢献した。このDCSというハード面の技術革新とモデル予測制御というソフト面の技術革新によって、今日の階層的制御構造を有する大規模かつ高度な制御系が実現可能になった。

モデル予測制御は石油精製・石油化学産業を中心に適用が進んでいるが、中でも象徴的な適用事例がエチレンプラントに対する大規模多変数制御と最適化制御を実施したシステム事例である¹³⁾。このシステムは、

1. 全系最適化
2. ユニットプロセス最適化
3. 多変数制御
4. レギュラトリ制御

の4階層構造となっている。全系最適化は定常物理モデルに基づく逐次2次計画法、ユニットプロセス最適化は定常状態経験モデルに基づく線形計画法、多変数制御は経験モデルに基づくモデル予測制御、そしてレギュラトリ制御はPID制御によって実現されている。全系最適化に用いられる方程式は220000次元に達

しており、モデル予測制御には 200 入力 700 出力に及ぶ大規模なモデルが利用されている。この例のように産業界では、実用性を重視し、利用可能なあらゆる技術を組み合わせて目的を達成しようとしており、近年の計算機能力の向上はプロセス制御技術を大きく変化させつつある。

モデル予測制御の実用化と歩調を合わせるように、その理論面からの研究も盛んに行われた。その結果、特に線形制御に限定すれば、モデル予測制御は実用的な制御手法として完成の域に達したとみなされるまでに至っている。しかし、モデル予測制御の出現によってプロセス制御の問題がすべて解決されたわけではない。制御アルゴリズムの開発やコントローラの調整のみならず、計測、制御、監視などを総合的に捉えたプロセス制御システムの設計ができなければ、実用に供する制御系が構築できたとはいえない。実際、現場の技術者が多大な労力と時間を費やしているのは、プロセスの解析、操作変数および制御変数の選択、センサーの選択などであり、これらが適切に行われなければ、どのような制御アルゴリズムも机上の空論となってしまう。このことは、制御技術開発における主要な失敗要因として、制御対象の解析とセンサーの選定が指摘されていることからわかる^[2]。

現在の化学プラントは、装置ごとの制御系設計のみならず、プラント全体を対象とした運転管理システムの設計、さらには装置設計と制御系設計との統合を考えなければならない段階に達している。このような状況下で、プロセス制御システムを開発するために解決しなければならない問題は実に多岐にわたってきており、今後積極的な研究活動を必要とする課題として、

1. 推定制御
2. プラントワイド制御
3. 設計と制御の統合
4. オンライン動的最適化
5. 制御性能監視
6. システム同定（閉ループ同定）と制御系設計の統合

などが挙げられている^[4-7]。以下では、これらの課題すべてに言及することは避け、本研究と深く関係する推定制御およびモデル予測制御について述べる。

1.2 推定制御

化学プラントの状態量の計測数に関しては、圧力、温度、液レベル、流量の計測がその大部分を占めている。かつての化学産業界においては、これらの定値制御がプロセス制御そのものであり、また、それで十分であった。しかし、製品の高品質化に対する要求が高まるにつれて、製品品質そのものを制御変数とする必要性が生じている。この際、製品品質の制御に直接利用可能なセンサーの有無が大きな問題となる。センサーが存在しない場合や、測定結果が得られるまでにプロセス時定数の何倍もの時間を要するような場合には、測定値をフィードバック制御あるいはフィードフォワード制御に直接利用することはできない。このような場合には、オンラインで測定可能なプロセス変数から制御変数を推定し、その推定値に基づいて制御を行う方法が有効となる。このような制御手法を一般に推定制御という。

推定制御の代表的な例として、蒸留塔の製品組成制御がある。蒸留塔の運転目的は仕様を満たす純度の製品を得ることである。この目的を実現するためには、製品組成の測定値に基づいてフィードバック制御を行えばよい。しかし、現実には、製品組成の測定値が直接制御量として利用されることは希である。この理由として、ガスクロマトグラフに代表されるオンライン分析機器の設備費およびメンテナンス費が高いことが挙げられる。さらに、ガスクロマトグラフを利用する場合、サンプルを採取してから分析結果が出力されるまでに10分程度の時間を要するため、制御性能の低下を避けることができないという問題もある。オンライン分析機器を用いることなく製品組成を制御するために最も広く利用されている方法は、特定の塔内温度を製品組成の代替変数とする塔内温度制御であろう。塔内温度制御に関する研究および実用化の歴史は古く、温度測定段の選択方法や圧力補正などに関する研究をはじめとして数多くの研究が行われてきた^[8-19]。しかし、より高い精度で製品組成を制御するためには、ある変数を代替変数とするのではなく、製品組成を正確に推定する必要がある。そこで、塔内温度、流量や圧力などのオンラインで測定されている変数から製品組成を推定し、その推定値に基づいて制御を行う方法が注目を集めている^[20-31]。

他の例として、高分子重合反応プロセスにおける製品品質の制御がある。高分子製品の品質を特徴づける指標としては、分子量分布、密度、メルトインデックスなどがあるが、いずれもオンラインでの測定が困難な物理量である。例えば、溶融高分子の流れやすさを表す指標であるメルトインデックスは、品質検査室において数時間間隔で測定されるのが一般的である。重合反応プロセスの制御を行う際には、これらの高分子物性の推定システムを開発することが必要不可欠であり、多くのモデルが提案されている^[32]。

推定制御を成功させるためには、精度の高い推定モデルを構築しなければならない。推定モデルは、現象論に基づく物理モデルと運転データに基づく統計モデルの2種類に分類することができる。理想的には、プロセスの挙動を正しく理解するためにも、正確な物理モデルに基づいて推定システムを構築するべきであるが、複雑な化学反応を含み、様々な物性の影響を受ける化学プロセスは非常にモデル化が困難な対象である。一方、分散型制御システムの普及と計算機能力の向上によって、数多くのプロセス変数を測定し、その膨大な測定データを保存・処理できる環境は既に整備されている。したがって、物理モデルの構築が困難な対象については、運転データに基づく統計モデルの構築が有効であると考えられる。

運転データから統計モデルを構築する場合、最小二乗法による線形回帰モデルの構築が最も一般的な手法であろう。この場合、入力変数が互いに線形独立であることが前提となる。しかし、化学プロセスにおいては、非常に多くの変数が測定されており、しかもその中に相関の高い変数が含まれている場合が多い。このような相関の高い変数を入力変数として最小二乗法を適用すると、モデル構築に用いるデータにわずかな差異しかない場合でも、非常に異なる回帰係数の推定値が得られてしまうという問題が生じる。これがいわゆる多重共線性の問題である。この原因は、真に独立な要因の数に比べて入力変数の数が多いために、線形回帰モデルの回帰係数を一意に決定できない点にある。このような状況下で構築したモデルは、一般に、モデル構築用データに対しては非常に良く適合するが、別のデータに対しては予測誤差が大きくなるという欠点を有する。これは *over-fitting* あるいは *over-parametrization* と呼ばれる現象である。多重共線性の問題を回避して、精度の高い推定モデルを構築するためには、高い相関を持つ入力変数を取り扱うことのできる統計的手法が必要になる。このような優れた特徴を備えた

多変量解析手法として、主成分分析 (PCA; Principal Component Analysis) や PLS (Partial Least Squares) などがある^[33-47]。これらの多変量解析手法は、膨大なデータを扱うに際して非常に強力な道具となる。特に、入力変数間の相関関係を抽出し、入力変数の張る空間を低次元化できるという優れた性質を活かして、異常検出をはじめとする運転監視への適用を中心に、理論的研究と実用化が進んでいる^[48-64]。

1.3 モデル予測制御

化学プラントの主要な制御目的が、単なる安全性および安定性の確保から、製品の高品質化や省資源省エネルギー化に移行するのにもなって、従来の PID 制御だけでは不十分であることが認識されるようになった。このような状況下で、1970 年代後半にモデル予測制御が産業界から誕生し、新しい高度制御手法として注目を集めた。以後、米国の石油精製および石油化学プラントを中心に実用化が進み、それに追従する形で理論的な研究も盛んに行われるようになった。モデル予測制御のアルゴリズムやその歴史については、多くの優れた報告がなされている^[5,6,65-71]。

モデル予測制御は Receding Horizon Control の一種であり、対象プロセスの動的モデルに基づいて未来の制御量を予測し、予め設定した評価関数が最も良くなるように未来の操作量を決定するという作業を各時刻で繰り返す。したがって、モデル予測制御は、対象プロセスの動的モデルに基づく、有限区間の最適制御といえる。

モデル予測制御の実用化が化学プロセスを中心に急速に進められた理由として、

1. 制御アルゴリズムが直感的に理解しやすい。
2. インパルス応答モデルやステップ応答モデルなど、現場技術者が理解しやすいモデルが利用されている。
3. 各種制約条件をアルゴリズム中で直接取り扱うことができる。
4. 外乱のフィードフォワード機構を取り込んだ多変数フィードバック制御系を構築できる。

5. 操作変数と制御変数の数が一致していないプロセスも取り扱うことができる。
6. むだ時間系, 非最小位相系を含む種々の多変数系に対して同一のアルゴリズムで対応できる。
7. 設定値変更に対して定常偏差の残らない安定な制御系を実現しやすい。
8. 上位の最適化機構と連動させることにより, プラント全体の最適化運転を容易に実現することができる。

などが挙げられる。これらの特徴から, 実用的であること, すなわち現場技術者にとって使いやすいものであることがモデル予測制御の普及に大きく貢献していることがわかる。

モデル予測制御に関する理論的な研究が進むにつれ, 適応制御や最適制御との関係も明らかになってきた。特に線形制御に限定すれば, モデル予測制御は実用的な制御手法として完成の域に達したとみなされるまでに至っている。今後は, 高度制御手法として確固たる地位を築いたモデル予測制御の非線形プロセスやバッチプロセスへの適用が進むであろう。

1.4 本研究の目的と論文の構成

次世代化学プラントには, 製品の高品質化と同時に, 地球環境との調和が要求される。この流れの中で, プラント全体を最適に運転するための知的運転支援システムの開発が急務である。もちろん, そのようなシステムを構築するためには, 数多くの課題を克服していかなければならず, 中でもプロセス制御技術のさらなる発展が望まれる。化学プラントの運転をより高度なものにするためには, 膨大な測定データを如何に有効に利用するかが鍵になると考えられる。そして, データ処理の強力な道具として, 我々は多変量解析手法を利用することができる。

本研究では, プロセス制御技術の中でも特に, プロセスの状態量の推定と制御に着目し, 実用化を念頭に置いた推定システムと制御アルゴリズムの開発を行う。

本章に続く第2章では, 線形回帰手法について述べる。化学プロセスは非常に大規模な多変数系であり, 実に多くのプロセス変数が測定されているため, 各測

定変数が独立であることは希であり、相関の高い変数も多く含まれている。このように相関の高い変数を利用して線形回帰モデルを構築する場合には、通常の方法を用いてはいけないことが知られている。これは、多重共線性と呼ばれる問題が発生するためである。そこで、本論に入る前に、多重共線性の問題を指摘し、その問題を回避することのできる線形回帰手法を紹介する。特に、本研究で推定モデルの構築に利用するPLS (Partial Least Squares) については詳しく述べる。

第3章では、ナフサ分解炉反応管外壁温度の推定システムを構築する。エチレンプラントを効率的に運転するためには、ナフサ分解炉のデコーキング時期を適切に決定する必要がある。反応管外壁温度がその許容限界温度を越えてはならないため、反応管外壁温度はデコーキング時期を判断するために必要不可欠な情報である。しかし、今回対象とした大阪石油化学のナフサ分解炉では反応管外壁温度がオンラインで測定されていないため、反応管外壁温度をオンライン推定できるシステムの構築が強く望まれている。そこで、まず、物理モデルに基づく推定システムを提案する。さらに、物理モデルの補正を目的とする統計モデルをPLSを利用して構築し、物理モデルと統計モデルとを統合することによって、広範な運転状態に適用可能な推定システムを提案する。さらに、開発した推定システムを実操業データに適用し、その有効性を検証する。

第4章では、多成分蒸留塔を対象に、塔内温度やその他のオンライン測定可能なプロセス変数から、塔頂および塔底製品組成を推定できる動的PLSモデルを構築する。モデル構築に際しては、塔内温度以外のプロセス変数（還流量、リボイラー熱負荷、圧力）を入力変数とすることの効果、温度測定段数やサンプリング間隔が推定精度に及ぼす影響などについても幅広く検討する。さらに、モデル構築用データの性質が推定モデルの精度に大きな影響を及ぼすことを指摘し、構築した推定モデルに基づく組成推定制御系の設計方法について論じる。

第5章では、安定プロセスおよび積分要素を有するプロセスを対象として、ランプ状の設定値変更や外乱に対して定常偏差の残らない2型モデル予測制御アルゴリズムを提案する。従来のアルゴリズムを分析し、自然な形で拡張することによって、モデル予測制御の優れた性質を受け継いだアルゴリズムを開発する。また、未来の操作量の与え方や予測式中に新たに導入するフィルタの設計方法を具

体的に示し、アルゴリズムの有効性をシミュレーションによって検証する。

1.5 引用文献

1. 橋本伊織, “プロセス制御”, 化学工学, **52**, 4, 287-292 (1988)
2. Morari, M., “Process Control Theory: Reflections on the past decade and goals for the next”, *Advances in Chemical Engineering*, **16**, 525-534 (1991)
3. 伊藤利昭, “産業界から見たプロセス制御技術の現状と将来”, 化学工学, **62**, 2, 73-76 (1998)
4. 橋本伊織, 大嶋正裕, “プロセス制御技術の新しい展開—ユニット制御からプラントワイド制御システムへ—”, システム/制御/情報, **38**, 10, 519-526 (1994)
5. 橋本伊織, 大嶋正裕, 大野弘, “プロセス産業における制御技術の現状と将来”, システム/制御/情報, **40**, 11, 473-479 (1996)
6. 大野弘, 大嶋正裕, “プロセス制御の現状と将来”, 日本学術振興会プロセスシステム工学第143委員会20周年記念講演会報告書, 143-167 (1996)
7. 橋本伊織, 大野弘, 加納学, “プロセス制御に関する最新の話題と今後の問題点”, 化学工学, **62**, 2, 69-72 (1998)
8. Wood, C. E., “Tray selection for column temperature control”, *Chem. Eng. Prog.*, **64**, 1, 85-88 (1968)
9. Luyben, W. L., “Feedback control of distillation columns by double differential temperature control”, *I&EC Fundamentals*, **8**, 4, 739-744 (1969)
10. Luyben, W. L., “Control of distillation columns with sharp temperature profiles”, *AIChE J.*, **17**, 713-718 (1971)
11. Luyben, W. L., “Profile position control of distillation columns with sharp temperature profiles”, *AIChE J.*, **18**, 1, 238-240 (1972)
12. Rademaker, O, J. E. Rijnsdorp, and A. Maarleveld, “Dynamics and

- control of continuous distillation units”, Elsevier, Amsterdam (1975)
13. Boyd, D. M., “Fractionation column control”, *Chem. Eng. Prog.*, **71**, 6, 55-60 (1975)
 14. Tolliver, T. L. and L. C. McCune, “Finding the optimum temperature control trays for distillation columns”, *InTech*, **27**, 9, 75-80 (1980)
 15. Buckley, P. S., W. L. Luyben, and J. P. Shunta, “Design of distillation column control system”, 229-242, Instrument Society of America (1985)
 16. Moore, C., J. Hackney, and D. Canter, “Selecting sensor location and type for multivariable processes”, In: *Shell Process Control Workshop* (D. M. Prett and M. Morari, Ed.), 291-308, Butterworth, Boston (1987)
 17. Whitehead, D. B. and M. Parnis, “Computer control improves ethylene plant operation”, *Hydrocarbon Processing*, Nov., 105-108 (1987)
 18. Bozenhardt, H. F., “Modern control tricks solve distillation problems”, *Hydrocarbon Processing*, June, 47-50 (1988)
 19. 鈴木剛, “基礎講座 プロセス制御 第7回 蒸留塔の制御”, *Petrotech*, **17**, 4, 84-87 (1994)
 20. Weber, R. and C. B. Brosilow, “The use of secondary measurements to improve control”, *AIChE J.*, **18**, 3, 614-623 (1972)
 21. Joseph, B., C. B. Brosilow, J. C. Howell, and W. R. D. Kerr, “Multi-temps give better control”, *Hydrocarbon Processing*, March, 127-131 (1976)
 22. Joseph, B. and C. B. Brosilow, “Inferential control of processes: Part I. Steady state analysis and design”, *AIChE J.*, **24**, 3, 485-492 (1978)
 23. Brosilow, C. B. and M. Tong, “Inferential control of processes: Part II. The structure and dynamics of inferential control systems”, *AIChE J.*, **24**, 3, 492-500 (1978)
 24. Joseph, B. and C. B. Brosilow, “Inferential control of processes: Part III. Construction of optimal and suboptimal dynamic estimators”, *AIChE*

- J.*, **24**, 3, 500-509 (1978)
25. Kresta, J. V., T. E. Marlin, J. F. MacGregor, "A general method for the development of inferential control schemes using PLS", *Preprints of 4th International Symposium on Process Systems Engineering (PSE)*, **II**, 14.1-14.14, Quebec, Canada (1991)
 26. Mejdell, T. and S. Skogestad, "Composition estimator in a pilot-plant distillation column using multiple temperatures", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30**, 2555-2564 (1991)
 27. Mejdell, T. and S. Skogestad, "Estimation of distillation compositions from multiple temperature measurements using Partial-Least-Squares regression", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30**, 2543-2555 (1991)
 28. Mejdell, T. and S. Skogestad, "Output estimation using multiple secondary measurements: high-purity distillation", *AIChE J.*, **39**, 10, 1641-1653 (1993)
 29. Kresta, J. V., T. E. Marlin, J. F. MacGregor, "Development of inferential process models using PLS", *Comp. Chem. Engng*, **18**, 597-611 (1994)
 30. Shin, J., S. Park, and M. Lee, "Design of a composition estimator for inferential control of high-purity distillation columns", *Preprints of Chemical Process Control - V (CPC-V)*, Tahoe City, California (1996)
 31. Fujii, H., S. Lakshminarayanan, and S. L. Shah, "Application of the PLS technique to the estimation of distillation tower top composition", *Preprints of IFAC symposium on Advanced Control of Chemical Processes (ADCHEM'97)*, 529-534, Banff, Canada (1997)
 32. Ohshima, M. and M. Tanigaki, "Quality-oriented intelligent control for polymer production process", *Preprints of 5th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS-5)*, 195-204, Corfu, Greece (1998)
 33. Hoerl, A. E., "Optimum Solution of Many Variables Equations", *Chem. Eng. Prog.*, **55**, 11, 69-78 (1959)

34. Hoerl, A. E., "Application of Ridge Analysis to Regression Problems", *Chem. Eng. Prog.*, **58**, 3, 54-59 (1962)
35. Massy, W. F., "Principal components regression in exploratory statistical research", *J. of the American Statistical Association*, **60**, 234-256 (1965)
36. Webster, J. T., R. F. Gunst, and R. L. Mason, "Latent Root Regression Analysis", *Technometrics*, **16**, 4, 513-522 (1974)
37. Golub, G. H. and C. F. Van Loan, "An analysis of the total least squares problem", *SIAM J. Numer. Anal.*, **17**, 6, 883-893 (1980)
38. Wold, S., A. Ruhe, H. Wold, and W. J. Dunn III, "The collinearity problem in linear regression. The partial least squares (PLS) approach to generalized inverses", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **5**, 3, 735-743 (1984)
39. Geladi, P. and B. R. Kowalski, "Partial least-squares regression: A tutorial", *Analytica Chimica Acta*, **185**, 1-17 (1986)
40. Lorber, A., L. E. Wangen, and B. R. Kowalski, "A theoretical foundation for the PLS algorithm", *J. of Chemometrics*, **1**, 19-31 (1987)
41. Wold, S., P. Geladi, K. Esbensen, and J. Ohman, "Multi-way principal components- and PLS-analysis", *J. of Chemometrics*, **1**, 41-56 (1987)
42. Ricker, N. L., "The use of biased least-squares estimators for parameters in discrete-time pulse-response models", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **27**, 2, 343-350 (1988)
43. Glen, W. G., W. J. Dunn III, and D. R. Scott, "Principal component analysis and partial least squares regression", *Tetrahedron Computer Methodology*, **2**, 349-376 (1989)
44. Kramer, M. A., "Nonlinear principal component analysis using autoassociative neural networks", *AIChE J.*, **37**, 2, 223-243 (1991)
45. Qin, S. J. and T. J. McAvoy, "Nonlinear PLS modeling using neural networks", *Comput. Chem. Engng.*, **16**, 4, 379-391 (1992)
46. Frank, I. E. and J. H. Friedman, "A statistical view of some chemo-

- metrics regression tools”, *Technometrics*, **35**, 2, 109-135 (1993)
47. 大野弘, 加納学, 橋本伊織, “多変量解析のプロセス監視への応用”, 第6回制御技術シンポジウム資料, 99-104, 東京 (1998)
 48. MacGregor, J. F., P. Nomikos, and T. Kourti, “Multivariate statistical process control of batch processes using PCA and PLS”, *Preprints of IFAC Symposium on Advanced Control of Chemical Processes (AD-CHEM'94)*, 525-530, Kyoto (1994)
 49. Nomikos, P. and J. F. MacGregor, “Monitoring batch processes using multiway principal component analysis”, *AIChE J.*, **40**, 8, 1361-1375 (1994)
 50. Chen, J., A. Bandoni, and J. A. Romagnoli, “Robust statistical process monitoring”, *Comput. Chem. Eng.*, **20**, Suppl., S497-S502 (1996)
 51. Martin, E. B., A. J. Morris, M. C. Papazoglou, and C. Kiparissides, “Batch process monitoring for consistent production”, *Comput. Chem. Eng.*, **20**, Suppl., S599-S604 (1996)
 52. Zullo, L. “Validation and verification of continuous plants operating modes using multivariate statistical methods”, *Comput. Chem. Eng.*, **20**, Suppl., S683-S688 (1996)
 53. Dunia, R, S. J. Qin, T. F. Edgar, and T. J. McAvoy, “Use of principal component analysis for sensor fault identification”, *Comput. Chem. Eng.*, **20**, Suppl., S713-S718 (1996)
 54. Tong, H and C. M. Crowe, “Detecting persistent gross errors by sequential analysis of principal components”, *Comput. Chem. Eng.*, **20**, Suppl., S733-S738 (1996)
 55. Gallagher, N. B., B. M. Wise, and C. W. Stewart, “Application of multi-way principal components analysis to nuclear waste storage tank monitoring”, *Comput. Chem. Eng.*, **20**, Suppl., S739-S744 (1996)
 56. Kourti, T., J. Lee, and J. F. MacGregor, “Experiences with industrial applications of projection methods for multivariate statistical process control”, *Comput. Chem. Eng.*, **20**, Suppl., S745-S750 (1996)

57. Jaeckle, C. and J. F. MacGregor, "Product design through multivariate statistical analysis of process data", *Comput. Chem. Eng.*, **20**, Suppl., S1047-S1052 (1996)
58. Rigopoulos, A. and Y. Arkun, "Principal components analysis in estimation and control of paper machines", *Comput. Chem. Eng.*, **20**, Suppl., S1059-S1064 (1996)
59. Rothwell, S. G., E. B. Martin, and A. J. Morris, "Comparison of methods for handling unequal length batches", *Preprints of 5th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS-5)*, 66-71, Corfu, Greece (1998)
60. Wachs, A. and D. R. Lewin, "Process monitoring using model-based PCA", *Preprints of 5th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS-5)*, 86-91, Corfu, Greece (1998)
61. Martin, E. B., A. J. Morris, and C. Kiparissides, "Multivariate statistical control and process performance monitoring", *Preprints of 5th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS-5)*, 349-358, Corfu, Greece (1998)
62. Robertson, T., J. Chen, J. A. Romagnoli, and B. Newell, "Intelligent monitoring for quality control in a biological nutrient removal wastewater treatment pilot plant", *Preprints of 5th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS-5)*, 590-595, Corfu, Greece (1998)
63. Papazoglou, M., E. B. Martin, A. J. Morris, and C. Kiparissides, "Process performance monitoring of batch polymerization reactors by MSPC methods", *Preprints of 5th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS-5)*, 767-772, Corfu, Greece (1998)
64. Kesavan, P., J. H. Lee, and G. A. Krishnagopalan, "PLS based monitoring and control of batch digesters", *Preprints of 5th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS-5)*,

- 773-780, Corfu, Greece (1998)
65. Garcia, C. E., D. M. Preth, and M. Morari, "Model predictive control: Theory and practice — a survey", *Automatica*, **25**, 3, 335-348 (1989)
 66. Ricker, N. L., "Model-predictive control: State of the art", *Proceedings of the 4th International Conference on Chemical Process Control (CPC-IV)*, 271-296, Texas (1991)
 67. Morari, M. and J. H. Lee, "Model predictive control: The good, the bad, and the ugly", *Proceedings of the 4th International Conference on Chemical Process Control (CPC-IV)*, 419-444, Texas (1991)
 68. Rawlings, J. B., E. S. Meadows, and K. R. Muske, "Nonlinear model predictive control: A tutorial and survey", *Preprints of IFAC Symposium on Advanced Control of Chemical Processes (ADCHEM'94)*, 203-214, Kyoto (1994)
 69. Froisy, J. B., "Model predictive control: Past, present and future", *ISA Trans.*, **33**, 235-243 (1994)
 70. Lee, J. H. and B. Cooley, "Recent advances in model predictive control and other related area", *AIChE Symposium Series No.316*, **93**, 201-216 (1997); *Proceedings of the Fifth International Conference on Chemical Process Control (CPC-V)*, Tahoe City, California (1996)
 71. Qin, S. J. and T. A. Badgwell, "An overview of industrial model predictive control technology", *AIChE Symposium Series No.316*, **93**, 232-256 (1997); *Proceedings of the Fifth International Conference on Chemical Process Control (CPC-V)*, Tahoe City, California (1996)

第 2 章

線形回帰手法

2.1 緒言

線形回帰モデルを構築する際には、最小二乗法が通常利用される。最小二乗法とは、入力変数の線形結合として出力変数を表現し、出力の実測値と推定値の二乗誤差が最小となるように、結合係数を決定する方法である。こうして得られるモデルを線形回帰モデル、結合係数を回帰係数と呼ぶ。この線形回帰モデルを利用することにより、与えられた入力データから出力値を推定することができる。

最小二乗解が一意に存在するためには、入力変数が線形独立でなければならない。実際、入力変数が線形従属である場合には、正規方程式が不定となり、最小二乗解を一意に決定することはできない。現実のデータ解析においては、入力変数の測定値ベクトルが厳密に線形従属になることは考えにくいですが、線形従属に極めて近い状況は頻繁に生じる。このようなデータに対して通常の最小二乗法を適用すると、用いるデータによって大きく異なる回帰係数が得られてしまう。すなわち、回帰係数推定値の分散が大きくなり、結果の信頼性が低くなってしまう。この問題は多重共線性の問題と呼ばれ、入力変数間に強い相関関係が存在する場合に顕在化する。

線形回帰モデルを構築する際には、多重共線性の問題を認識し、それを回避するように注意しなければならない。多重共線性の問題を回避する最も単純な方法は、線形独立な少数の入力変数を選択し、それらの線形結合として出力変数を表

現する方法である。しかし、このような方法では、適切な入力変数を選択するという作業が必要になる。したがって、高い相関を持つ入力変数を直接扱うことのできるデータ解析手法が必要となる。

本章では、通常最小二乗法と多重共線性の問題について述べるとともに、多重共線性の問題を回避することのできる線形回帰手法についてまとめる。

2.2 最小二乗法と多重共線性

本節では、通常最小二乗法を用いて線形回帰モデルを構築する際に生じる問題を指摘する。その問題は多重共線性の問題と呼ばれ、入力変数間に強い相関関係が存在する場合に顕在化する。

2.2.1 通常最小二乗法 (OLS)

回帰係数の最小二乗推定値は、正規方程式の解として、次式で与えられる。

$$\boldsymbol{\theta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (2.1)$$

ここで、 \mathbf{X} は入力変数のデータ行列、 \mathbf{y} は出力変数のデータベクトルである。入力変数の数を P 、サンプル数を N とすると、 \mathbf{X} は N 行 P 列の行列、 \mathbf{y} は N 行の列ベクトルとなり、回帰ベクトル $\boldsymbol{\theta}$ は P 行の列ベクトルとなる。通常、データ行列 \mathbf{X} 、 \mathbf{y} の各要素には、入出力変数の測定値を正規化（平均0分散1）した値が用いられる。

以下では、この最も基本的な方法を、通常最小二乗法という意味で、OLS (Ordinary Least Squares) と略記する。もちろん、Eq. (2.1) の右辺が計算できるためには、行列 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ が正則でなければならない。この条件は $\text{rank}(\mathbf{X}) = P$ に等しい。すなわち、OLS は入力変数が線形独立であることを前提としている。

Eq. (2.1) を用いて回帰ベクトル $\boldsymbol{\theta}$ が決定されると、次式に基づいて入力変数から出力変数を推定することができる。

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X} \boldsymbol{\theta} \quad (2.2)$$

なお、 $\hat{\mathbf{y}}$ は出力データ \mathbf{y} の推定値である。

2.2.2 多重共線性

入力変数が線形従属である場合、行列 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ は正則になりえず、OLS によって回帰係数を決定することはできない。現実のプラントデータを利用する場合には、測定ノイズを含む様々な要因のために、入力変数が線形従属になる可能性は極めて低い。しかし、プラントで測定されている変数は物質収支や熱収支など様々な関係式を満たしながら変化するため、線形従属ではないにしても、入力変数間の相関が高い（線形従属に近い）状況は珍しくない。このような入力変数間の相関が高いデータに対して OLS を適用すると、用いるデータ毎に大きく異なる回帰係数が得られてしまう。このことは、回帰係数推定値が測定ノイズなどの影響を受けやすいことを意味している。言い換えると、入力変数が線形従属に近い場合、OLS を適用すると回帰係数推定値の分散が大きくなり、結果の信頼性が低くなってしまう。この問題は多重共線性の問題と呼ばれ、線形回帰モデルを構築する際には特に注意しなければならない問題である。

与えられた入力データについて、多重共線性がどの程度問題になるか、すなわち入力変数がどの程度線形従属に近いかを定量的に評価する指標として、条件数がある^[1-3]。データ行列 \mathbf{X} の条件数は \mathbf{X} の最大特異値と最小特異値との比として定義され、条件数が大きいほど、データ行列 \mathbf{X} の条件は悪く、入力変数は線形従属に近いと判断される。したがって、データ行列が悪条件である場合には、多重共線性の問題を回避するために、OLS に代わる手法によって回帰係数を決定しなければならない。

2.3 最小二乗法の拡張

本節では、多重共線性の問題に対応可能な線形回帰手法のいくつかについて説明する。

2.3.1 最小ノルム解

入力変数が線形従属である場合には、最小二乗解を一意に定めることができない。そこで、解を一意に決定するために、最小二乗解の中からノルムが最小となる解を選択する方法がある。この解を最小ノルム解と呼ぶ^[2]。

データ行列 \mathbf{X} の特異値分解を

$$\mathbf{X} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \quad (2.3)$$

とする。ここで、 \mathbf{U} は N 行 N 列直交行列、 \mathbf{V} は P 行 P 列直交行列、 $\mathbf{\Sigma}$ は N 行 P 列対角行列であり、 $\mathbf{\Sigma}$ の対角要素は行列 \mathbf{X} の特異値と呼ばれる。このとき、疑似逆行列 \mathbf{X}^+ は次式で与えられる^[1,2]。

$$\mathbf{X}^+ = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^+\mathbf{U}^T \quad (2.4)$$

ここで、 $\mathbf{\Sigma}^+$ は P 行 N 列対角行列であり、その対角要素は行列 \mathbf{X} の特異値の逆数である。この疑似逆行列を用いれば、最小二乗推定値は、

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbf{X}^+\mathbf{y} \quad (2.5)$$

で与えられる。この最小ノルム解は、

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^+\mathbf{U}^T\mathbf{y} \quad (2.6)$$

と表すこともできる。ここで、 \mathbf{V} の各列はデータ行列 \mathbf{X} の右特異ベクトルであるから、最小ノルム解は右特異ベクトルの線形結合として与えられることがわかる。

この方法の特徴は、入力変数が線形従属である場合にも回帰係数を一意に決定できる点にある。しかも、ノルムが最小となるように回帰ベクトルが決定されるため、構築した線形回帰モデルは測定ノイズなどの影響を受けにくいという優れた特徴を有する。

しかし、この方法を単純に適用することによって、多重共線性の問題を回避できるわけではない。なぜなら、最小二乗解を求める点で OLS と同一の手法であるため、入力変数が線形従属に近い場合には、用いるデータによって回帰係数の推定値が大きく異なってしまうからである。すなわち、データ行列 \mathbf{X} が悪条件であるという問題に対して、この方法は本質的な対策を施していないのである。

多重共線性の問題を回避するためには、データ行列 \mathbf{X} の条件数を良くする必要がある。このためには、データ行列 \mathbf{X} のゼロに近い特異値をゼロとみなすのが最も簡単である。非常に小さな特異値をゼロとみなすことにより、最大特異値と最小特異値との比として与えられる条件数を小さくすることができる。

非常に小さな特異値をゼロとみなす方法は、第 2.3.2 節で述べる主成分回帰手法と密接な関係がある。

2.3.2 主成分回帰 (PCR)

データ行列 \mathbf{X} とその共分散行列 $\frac{1}{N-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ については、以下の重要な性質がある。

1. \mathbf{X} の特異値は $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ の固有値の平方根に等しい。
2. \mathbf{X} の右特異ベクトルは $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ の固有ベクトルに等しい。
3. $\frac{1}{N-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ の固有値は、対応する固有ベクトルが張る空間（主成分）にデータを射影した際の射影値（主成分得点）の分散に等しい。

最後の性質から明らかなように、主成分得点の分散が大きな主成分ほど、元のデータをよく表現している。したがって、入力変数間に相関がある場合には、少数の支配的な主成分を用いることにより、元のデータの大部分を表現することができる。このような考え方に基づくデータ解析手法が主成分分析 (PCA; Principal Component Analysis) である。

さらに上記の性質から、主成分得点の分散は $\frac{1}{N-1}\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ の固有値に等しいと同時に、データ行列 \mathbf{X} の特異値を二乗した値とも比例することがわかる。したがって、主成分得点の分散が大きな主成分を選択するということは、データ行列 \mathbf{X} の大きな特異値を選択し、小さな特異値をゼロとみなすことに等しい。これはまさに第 2.3.1 節で述べた手法である。

主成分分析に基づいて線形回帰モデルを構築する手法が主成分回帰 (PCR; Principal Component Regression) である^[4]。PCR では、少数の支配的な主成分の線形結合によって回帰係数を与える。先に挙げた性質から、支配的な主成分は共分散行列の大きな固有値に対応する固有ベクトルで表現され、これらはデー

タ行列 \mathbf{X} の大きな特異値に対応する右特異ベクトルに等しいことがわかる。したがって、例えば K 個の主成分を選択する場合には、 $\sigma_k = 0$ ($k > K$) とみなすことにより、Eq. (2.6) を用いて回帰係数を求めることができる。

PCR の特徴は、支配的な K 個の主成分を選択することにより、入力変数の張る P 次元空間をより低次の K 次元空間で近似する点にある。さらに、主成分はこの K 次元空間の正規直交基底をなす。主成分の正規直交性は、主成分が右特異ベクトルとして与えられることから明らかであろう。

主成分は元の入力変数の線形結合として与えられるが、このような二次的に与えられる変数を潜在変数という。PCR では主成分得点の分散が最大となるように潜在変数を選択している。しかし、これが潜在変数の唯一の選択方法ではない。主成分得点の分散の代わりに出力変数と入力変数との内積を最大にするように潜在変数を選択する方法が PLS (Partial Least Squares) である。PLS については第 2.4 節で詳述する。

2.3.3 リッジ回帰 (RR)

入力変数が線形従属であり、共分散行列が特異となる場合、あるいは、入力変数が線形従属に近く、共分散行列の条件数が大きな場合に、より安定な (ばらつきの小さい) 解を得るための方法としてリッジ回帰 (RR; Ridge Regression) がある^[5,6]。リッジ回帰では、行列 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ にパラメータ λ で規定される対角行列を加えることにより、強制的に条件数を小さくし、安定な解を得る。リッジ回帰を数式で表現すると、次式のようなになる。

$$\boldsymbol{\theta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (2.7)$$

パラメータ λ は通常 $[0,1]$ の値をとる。

リッジ回帰は、OLS で用いられる評価関数

$$Q_{LS} = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta}\|^2 \quad (2.8)$$

の代わりに

$$Q_{RR} = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta}\|^2 + \lambda \|\boldsymbol{\theta}\|^2 \quad (2.9)$$

を評価関数として、 Q_{RR} が最小となるように回帰ベクトル θ を決定する方法であると解釈することができる。

2.4 Partial Least Squares Regression

本節では、多重共線性に対処するのに有効であるとの理由から、近年大変な注目を集めている線形回帰手法である PLS (Partial Least Squares / Projection to Latent Structures) ^[7-10] について詳述する。

2.4.1 PLS の基本概念

線形回帰モデルを構築する際、多重共線性の問題を回避するためには、入力変数として互いに線形独立な変数のみを採用すればよい。しかし、単に線形独立なだけでは不十分であり、安定した回帰係数を得るためには、できるだけ相関の低い入力変数を選択しなければならない。また、推定精度が高くなるように入力変数を選択することも要求される。これらのことを考慮すると、

1. 入力変数は互いに直交する。
2. 採用する入力変数によって予測誤差 (残差) は最小化される。

という条件を満たすような入力変数を選択することが望まれる。ところが、これらの条件を満たすような入力変数を元の入力変数から選ぶことができる可能性は極めて低いであろう。そこで、これらの条件を満たすような潜在変数を、元の入力変数の線形結合として作成することを考える。具体的には、

1. 元の入力変数のすべての 1 次式の中から出力変数と最も関係の強いものを第 1 潜在変数として採用する。
2. 採用した第 1 潜在変数と直交し、かつ第 1 潜在変数では表現できなかった出力変数の変動と最も関係の強いものを第 2 潜在変数として採用する。
3. 以下、出力変数の変動を十分に表現できるまで順次潜在変数を追加していく。

という手順に従って新しい潜在変数を作成し、それらの線形結合として出力変数を表現する。これが PLS の概念である。

いま、 P 個の入力変数 x_p ($p = 1, 2, \dots, P$) と 1 個の出力変数 y が与えられているとすると、 K ($K \leq P$) 個の新しい潜在変数 z_k ($k = 1, 2, \dots, K$) は一般に

$$z_k = \sum_{p=1}^P w_{pk} x_p \quad (k = 1, 2, \dots, K) \quad (2.10)$$

と表される。PLS では、潜在変数 z_k の線形結合として出力変数 y を表すため、その表現式は次のようになる。

$$\begin{aligned} y &= \sum_{k=1}^K r_k z_k \\ &= \sum_{k=1}^K r_k \left(\sum_{p=1}^P w_{pk} x_p \right) \end{aligned} \quad (2.11)$$

この式から明らかなように、出力変数 y を入力変数 x_p の線形結合として表すという点においては、PLS と OLS とは全く同じである。PLS が OLS よりも優れているのは、好ましい性質を持つ潜在変数を入力変数として利用する点においてである。

2.4.2 潜在変数の選択基準

PLS では、出力変数と関係の強い潜在変数を入力変数として線形回帰モデルを構築する。変数間の関係の強さを表す指標としてまず挙げられるのは相関係数であり、この相関係数を最大とする手法が OLS である。しかし、入力変数が線形従属に近い場合には、多重共線性の問題を避けることができず、回帰係数の推定精度は悪化してしまう。この多重共線性の問題は線形従属に近い入力変数を用いることに起因するので、完全に線形独立な (直交する) 潜在変数を新たな入力変数として用いることによって解決することができる。ところが、互いに直交する潜在変数の選び方は無数にあるため、その選択に際しては何らかの指標を導入する必要がある。潜在変数を導入する理由が入力変数の線形従属性にあるのであるから、潜在変数としては入力変数間に存在する線形関係を効果的に表現できるもの

が適していると言える。このような観点から、主成分を潜在変数とする方法が考えられる。実際、主成分はその分散が最大となるように決定されるため、入力変数間関係を表現するという点では適切な潜在変数である。しかし、出力変数の変動を表現することが目的である場合には、入力変数として主成分が必ずしも適切な潜在変数であるとは言えない。これは、主成分と出力変数との間に強い相関関係があるとは限らないためである。すなわち、潜在変数が入力変数間関係をよく表現しているとしても、出力変数と無関係である（相関が小さい）ならば、その潜在変数に価値はないのである。

以上の議論を簡単にまとめると以下のようになる。OLSは出力変数と潜在変数（入力変数の線形結合）との相関係数を最大にすることを目的としており、入力変数間相関関係を考慮できない。一方、PCRは潜在変数（主成分）の分散を最大にすることを目的としており、出力変数と潜在変数の相関関係を考慮していない。すなわち、潜在変数の選択という観点からは、OLSとPCRは対極に位置する手法であると言える。

これまでの議論から明らかなように、入力変数としての潜在変数は次の2つの性質を持つことが望まれる。

1. 入力変数間の相関関係をよく表す。
2. 出力変数との相関が高い。

この2つの性質を同時に満たす潜在変数を選択するための指標として、出力変数と潜在変数の内積が考えられる。実際、PLSでは、出力変数と潜在変数の内積が最大となるように潜在変数を決定する。出力変数 y と潜在変数 z の測定値（平均はゼロ）を要素に持つベクトル \mathbf{y} および \mathbf{z} が与えられているとき、それらの内積は

$$\langle \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle = \|\mathbf{y}\| \|\mathbf{z}\| \cos \theta \quad (2.12)$$

で与えられる。他方、出力変数 y と潜在変数 z の相関係数 r_{yz} は

$$\begin{aligned} r_{yz} &= \frac{\sigma_{yz}^2}{\sigma_y \sigma_z} \\ &= \frac{\langle \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle}{\sqrt{\langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle} \sqrt{\langle \mathbf{z}, \mathbf{z} \rangle}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\|\mathbf{y}\|\|z\| \cos \theta}{\|\mathbf{y}\|\|z\|} \\
 &= \cos \theta
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

によって、潜在変数 z の分散 σ_z^2 は

$$\sigma_z^2 = \frac{1}{N-1} \|z\|^2 \tag{2.14}$$

によって与えられる。Eq. (2.12) において、出力変数のノルム $\|\mathbf{y}\|$ は潜在変数の取り方に関係なく一定であるから、内積を最大にすることは、相関係数 r_{yz} と標準偏差 σ_z との積を最大にすることに等しいことがわかる。このことから、内積は潜在変数を決定するための指標として優れた性質を持っており、PLS は OLS と PCR とを組み合わせたような線形回帰手法であるとも言える。

2.4.3 潜在変数の導出

ここでは、PLS の計算方法を具体的に述べる。

準備

いま、 P 個の入力変数と 1 個の出力変数について N 個のサンプルがある場合を考え、測定値をそれぞれ $x_{np}^*, y_n^* (n = 1, 2, \dots, N; p = 1, 2, \dots, P)$ とする。以下の議論を簡単にするために、各変数についてその平均値 \bar{x}_p, \bar{y} からの偏差 x_{np}, y_n を導入する。すなわち、

$$x_{np} = x_{np}^* - \bar{x}_p \quad (n = 1, 2, \dots, N; p = 1, 2, \dots, P) \tag{2.15}$$

$$y_n = y_n^* - \bar{y} \quad (n = 1, 2, \dots, N) \tag{2.16}$$

とする。このとき、入力変数の測定データ全体は次の行列 \mathbf{X} で与えられる。

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1P} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2P} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{NP} \end{bmatrix} \tag{2.17}$$

一方，出力変数の測定データ全体は次のベクトル \mathbf{y} で与えられる。

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

第1潜在変数の導出

PLS では，入力変数のすべての1次式の中から出力変数との内積が最大となるものを第1潜在変数として採用する。その結合係数を

$$\mathbf{w}_1 = \begin{bmatrix} w_{11} \\ w_{21} \\ \vdots \\ w_{P1} \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

とすると，第1潜在変数 z_1 の値 t_1 は

$$t_1 = \mathbf{X}\mathbf{w}_1 \quad (2.20)$$

で与えられる。これより，出力変数 y と潜在変数 z_1 との内積 ϕ_1 は

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \langle \mathbf{y}, t_1 \rangle \\ &= \mathbf{y}^T \mathbf{X}\mathbf{w}_1 \end{aligned} \quad (2.21)$$

となる。

内積 ϕ_1 を最大にする潜在変数 z_1 を求めるためには，Eq. (2.21) に基づいて，内積 ϕ_1 を最大にする結合係数 \mathbf{w}_1 を求めなければならない。この最適化問題は Lagrange 乗数法を用いて容易に解くことができる。実際，結合係数 \mathbf{w}_1 のノルムが1であるという条件，すなわち

$$\|\mathbf{w}_1\| = 1 \quad (2.22)$$

を導入し，Lagrange 乗数 λ を用いて

$$J_1 = \mathbf{y}^T \mathbf{X}\mathbf{w}_1 - \lambda(\mathbf{w}_1^T \mathbf{w}_1 - 1) \quad (2.23)$$

とおくと、

$$\begin{aligned}\frac{\partial J_1}{\partial w_1} &= \mathbf{X}^T \mathbf{y} - 2\lambda w_1 \\ &= 0\end{aligned}\tag{2.24}$$

という条件式が得られる。Eqs. (2.21), (2.22), (2.24) より、

$$\begin{aligned}\phi_1 &= \mathbf{y}^T \mathbf{X} w_1 \\ &= 2\lambda w_1^T w_1 \\ &= 2\lambda\end{aligned}\tag{2.25}$$

という関係が成り立つので、Eq. (2.24) の Lagrange 乗数 λ を内積 ϕ_1 で置き換え、再度 Eq. (2.21) を用いると、

$$\phi_1^2 = \mathbf{y}^T \mathbf{X} \mathbf{X}^T \mathbf{y}\tag{2.26}$$

を得る。ここで、 \mathbf{X}, \mathbf{y} は共にデータ行列であり、内積 ϕ_1 を計算することができるので、

$$w_1 = \frac{1}{\phi_1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}\tag{2.27}$$

によって結合係数 w_1 を求めることができる。

より理解を深めるために、結合係数 w_1 の決定方法を別の角度から捉えてみる。ここまでに導出した条件をまとめると、Eqs. (2.24), (2.25) より

$$\mathbf{X}^T \mathbf{y} = \phi_1 w_1\tag{2.28}$$

$$\mathbf{y}^T \mathbf{X} w_1 = \phi_1\tag{2.29}$$

を得る。この2式は等価であるが、辺々を掛け合わせると

$$\mathbf{X}^T \mathbf{y} \mathbf{y}^T \mathbf{X} w_1 = \phi_1^2 w_1\tag{2.30}$$

となることから

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{y} \mathbf{y}^T \mathbf{X} - \phi_1^2 \mathbf{I}) w_1 = 0\tag{2.31}$$

という条件式が得られる。これは固有値問題に他ならず、内積 ϕ_1 の二乗および結合係数 w_1 はそれぞれ行列 $\mathbf{X}^T \mathbf{y} \mathbf{y}^T \mathbf{X}$ の固有値および固有ベクトルとして与え

られることがわかる。さらに、行列 $\mathbf{X}^T \mathbf{y} \mathbf{y}^T \mathbf{X}$ が非負定値行列であることから、最大にすべき内積 ϕ_1 は最大固有値の平方根に等しくなり、第1潜在変数 z_1 の結合係数 \mathbf{w}_1 は最大固有値に対応する固有ベクトルとして求めることができる。

ここまでの議論で、出力変数 y との内積が最大となる潜在変数 z_1 の向きを決定することができた。しかし、結合係数 \mathbf{w}_1 のノルムが1という条件を設定しているために、Eq. (2.20) を用いて計算される潜在変数 z_1 の値 t_1 が出力変数の測定値 \mathbf{y} を最もよく表現しているとは限らない。従って、 $r_1 t_1$ が \mathbf{y} を最もよく表すように、適切な定数 r_1 を決定する必要がある。 t_1, \mathbf{y} は共に N 次元ベクトルであるから、結局、残差 $\mathbf{y} - r_1 t_1$ のノルムが最小となるように定数 r_1 を決定すればよい。このための条件は、推定値 $r_1 t_1$ と残差 $\mathbf{y} - r_1 t_1$ が直交することであるので、内積を用いて

$$\langle r_1 t_1, \mathbf{y} - r_1 t_1 \rangle = 0 \quad (2.32)$$

と表現することができる。この条件式を r_1 について解くと、

$$r_1 = \frac{t_1^T \mathbf{y}}{\|t_1\|^2} \quad (2.33)$$

が得られる。

こうして求めた第1潜在変数によって出力変数の変動が十分に表現できる場合には、最終的な予測式は次のようになる。

$$\hat{y}_{new} = r_1 \mathbf{x}_{new} \mathbf{w}_1 \quad (2.34)$$

ここで、 \mathbf{x}_{new} は入力変数の新しい測定値ベクトル (P 次元行ベクトル) であり、 \hat{y}_{new} は対応する出力変数の推定値である。

第1潜在変数と入力変数との関係

より一般的な議論に入る前に、元の入力変数 $x_p (p = 1, 2, \dots, P)$ と第1潜在変数 z_1 の関係について述べる。ここでは、第1潜在変数 z_1 を特徴づける結合係数 \mathbf{w}_1 が Eq. (2.27) によって求められるという事実に基づいて議論を進める。まず、

各入力変数 x_p の測定値からなるベクトルを次のように定義する。

$$\mathbf{x}_p = \begin{bmatrix} x_{1p} \\ x_{2p} \\ \vdots \\ x_{Np} \end{bmatrix} \quad (p = 1, 2, \dots, P) \quad (2.35)$$

このとき、結合係数 w_1 の各要素を

$$\begin{bmatrix} w_{11} \\ w_{21} \\ \vdots \\ w_{P1} \end{bmatrix} = \frac{1}{\phi_1} \|\mathbf{y}\| \begin{bmatrix} \|\mathbf{x}_1\| \cos \theta_1 \\ \|\mathbf{x}_2\| \cos \theta_2 \\ \vdots \\ \|\mathbf{x}_P\| \cos \theta_P \end{bmatrix} \quad (2.36)$$

と表現することができる。ここで、 $\theta_p (p = 1, 2, \dots, P)$ は入力変数 x_p と出力変数 y のなす角である。Eq. (2.36) より、結合係数 w_1 の各要素が、対応する入力変数と出力変数の内積に比例することは明らかである。これは、結合係数 w_1 の各要素は対応する入力変数の測定値 x_p を出力変数の測定値 y が張る空間 (直線) に射影して得られるベクトルの長さ $\|\mathbf{x}_p\| \cos \theta_p$ に比例すると言い換えることもできる。あるいは、対応する入力変数と出力変数の共分散

$$\begin{aligned} \sigma_{x_p, y}^2 &= \frac{1}{N-1} \mathbf{x}_p^T \mathbf{y} \\ &= \frac{1}{N-1} \|\mathbf{x}_p\| \|\mathbf{y}\| \cos \theta_p \quad (p = 1, 2, \dots, P) \end{aligned} \quad (2.37)$$

に比例すると表現してもよい。

第 k 潜在変数の導出 (1)

第1潜在変数のみを用いて出力変数の変動を十分に表現できない場合には、採用する潜在変数の数を増やす必要がある。第2潜在変数以下の結合係数 $w_k (k = 2, 3, \dots, K)$ も第1潜在変数と同様な手順で求めることができる。ここでは、第2潜在変数 z_2 の決定方法を詳述した上で、一般的な第 k 潜在変数の決定方法を示す。

第2潜在変数 z_2 を導入する目的は、第1潜在変数 z_1 では表現できなかった出力変数 y の変動を表現することである。第1潜在変数の導出で述べたように、出力変数のデータベクトル \mathbf{y} のうち第1潜在変数 z_1 で表現できる部分は、

$$r_1 \mathbf{t}_1 = r_1 \mathbf{X} \mathbf{w}_1 \quad (2.38)$$

であるので、逆に表現できない部分 $\mathbf{y}^{(1)}$ は、

$$\mathbf{y}^{(1)} = \mathbf{y} - r_1 \mathbf{X} \mathbf{w}_1 \quad (2.39)$$

で与えられる。一方、入力変数のデータ行列 \mathbf{X} のうち第1潜在変数 z_1 で表現できる部分は、

$$\mathbf{t}_1 \frac{\mathbf{t}_1^T \mathbf{X}}{\|\mathbf{t}_1\|^2} \quad (2.40)$$

となる。これより、逆に表現できない部分 $\mathbf{X}^{(1)}$ は、

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^{(1)} &= \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^{(1)} & \mathbf{x}_2^{(1)} & \cdots & \mathbf{x}_p^{(1)} \end{bmatrix} \\ &= \mathbf{X} - \mathbf{t}_1 \frac{\mathbf{t}_1^T \mathbf{X}}{\|\mathbf{t}_1\|^2} \end{aligned} \quad (2.41)$$

で与えられる。

第1潜在変数 z_1 を採用することにより、各入力変数の z_1 軸方向成分によって出力変数の z_1 軸方向成分を表現することになる。従って、第2潜在変数 z_2 の決定に際しては、各入力変数と出力変数の z_1 軸方向成分については考慮する必要がなく、それぞれの z_1 軸と直交する成分のみを用いればよい。すなわち、新たな入力変数のデータ行列を $\mathbf{X}^{(1)}$ 、新たな出力変数のデータベクトルを $\mathbf{y}^{(1)}$ とし、第2潜在変数 z_2 と新たな出力変数 $\mathbf{y}^{(1)}$ の内積が最大となるように、第2潜在変数 z_2 の結合係数 \mathbf{w}_2 を決定すればよい。ただし、結合係数 \mathbf{w}_2 のノルムは1とする。なお、結合係数 \mathbf{w}_2 は \mathbf{w}_1 と同様な手順で求めることができる。

ここまでの議論では、結合係数 \mathbf{w}_2 のノルムが1という条件を設定しているために、潜在変数 z_2 の値 t_2

$$t_2 = \mathbf{X}^{(1)} \mathbf{w}_2 \quad (2.42)$$

が新たな出力変数 $\mathbf{y}^{(1)}$ を最もよく表現しているとは限らない。従って、 $r_2 \mathbf{t}_2$ が $\mathbf{y}^{(1)}$ を最もよく表すように、適切な定数 r_2 を決定する必要がある。このための条件は、残差 $\mathbf{y}^{(1)} - r_2 \mathbf{t}_2$ のノルムが最小となること、すなわち、 $r_2 \mathbf{t}_2$ と残差 $\mathbf{y}^{(1)} - r_2 \mathbf{t}_2$ が直交することであるので、内積を用いて

$$\langle r_2 \mathbf{t}_2, \mathbf{y}^{(1)} - r_2 \mathbf{t}_2 \rangle = 0 \quad (2.43)$$

と表現することができる。この条件式を r_2 について解くと、

$$r_2 = \frac{\mathbf{t}_2^T \mathbf{y}^{(1)}}{\|\mathbf{t}_2\|^2} \quad (2.44)$$

が得られる。

一般に第 k 潜在変数の決定に際しては、上記の手順を繰り返すだけでよい。なお、最終的に採用する潜在変数の数の決定方法は後で述べる。

第 k 潜在変数の導出 (2)

ここでは、数学的帰納法を用いて、別の観点から第 k 潜在変数の結合係数 \mathbf{w}_k を導出する方法を示す。いま、第 $k-1$ 潜在変数まで求められており、それらの結合係数 $\mathbf{w}_i (i = 1, 2, \dots, k-1)$ は条件

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{y} \mathbf{y}^T \mathbf{X} - \phi_i^2 \mathbf{I}) \mathbf{w}_i = \mathbf{0} \quad (2.45)$$

$$\mathbf{w}_i^T \mathbf{w}_j = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (2.46)$$

を満たしているとして、第 k 潜在変数の結合係数 \mathbf{w}_k を Lagrange 乗数法を用いて求める。すなわち、

$$J_k = \mathbf{y}^T \mathbf{X} \mathbf{w}_k - \lambda_k (\mathbf{w}_k^T \mathbf{w}_k - 1) - \sum_{i=1}^{k-1} \mu_i \mathbf{w}_k^T \mathbf{w}_i \quad (2.47)$$

とにおいて、 J_k を最大にするような \mathbf{w}_k を求めることにする。ここで、右辺第1項は第 k 潜在変数 z_k と出力変数 y の内積 ϕ_k であり、右辺最終項は第 k 潜在変数

$z_k (k = 2, \dots, K)$ と潜在変数 $z_{k'} (k' = 1, 2, \dots, k-1)$ のすべてが無相関となる (直交する) 条件を表している。 J_k を w_k で偏微分して $\mathbf{0}$ とおくと,

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_k}{\partial w_k} &= \mathbf{X}^T \mathbf{y} - 2\lambda_k w_k - \sum_{i=1}^{k-1} \mu_i w_i \\ &= \mathbf{0} \end{aligned} \quad (2.48)$$

となる。

まず, Eq. (2.48) に $w_j^T (j = 1, 2, \dots, k-1)$ を左から掛けて, Eq. (2.46) を用いると,

$$w_j^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} - \mu_j = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, k-1) \quad (2.49)$$

を得る。Eq. (2.45), (2.49) より

$$\begin{aligned} \phi_j^2 w_j &= \mathbf{X}^T \mathbf{y} \mathbf{y}^T \mathbf{X} w_j \\ &= \mathbf{X}^T \mathbf{y} \mu_j \end{aligned} \quad (2.50)$$

となり, さらに w_k^T を左から掛けると,

$$\begin{aligned} w_k^T \phi_j^2 w_j &= w_k^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} \mu_j \\ &= \phi_k \mu_j \end{aligned} \quad (2.51)$$

となる。潜在変数が直交するという条件よりこの左辺はゼロとなるが, 内積 ϕ_k はゼロではない (ゼロであればこれ以上潜在変数を採用する必要はない) ので, Lagrange 乗数 μ_j は

$$\mu_j = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, k-1) \quad (2.52)$$

でなければならない。この結果を Eq. (2.48) に代入すると

$$\mathbf{X}^T \mathbf{y} = 2\lambda_k w_k \quad (2.53)$$

が得られる。この両辺に w_k^T を左から掛けると,

$$\begin{aligned} \phi_k &= w_k^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} \\ &= 2\lambda_k \end{aligned} \quad (2.54)$$

となることから, Eq. (2.53) を

$$\mathbf{X}^T \mathbf{y} = \phi_k \mathbf{w}_k \quad (2.55)$$

と表すこともできる。

次に, Eq. (2.48) に \mathbf{w}_k^T を左から掛けて, Eq. (2.46) を用いると,

$$\mathbf{w}_k^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} = 2\lambda_k \quad (2.56)$$

すなわち

$$\mathbf{y}^T \mathbf{X} \mathbf{w}_k = \phi_k \quad (2.57)$$

を得る。ここで, 得られた2つの条件 Eqs. (2.55), (2.57) をまとめると,

$$\mathbf{X}^T \mathbf{y} \mathbf{y}^T \mathbf{X} \mathbf{w}_k = \phi_k^2 \mathbf{w}_k \quad (2.58)$$

となる。これは Eq. (2.45) と同一の式であり, 第 k 潜在変数 z_k と出力変数 y との内積 ϕ_k の二乗が非負定値行列 $\mathbf{X}^T \mathbf{y} \mathbf{y}^T \mathbf{X}$ の固有値に等しくなることがわかる。ただし, 大きい方から $k-1$ 個の固有値とそれに対応する固有ベクトルはすでに第 $k-1$ 番目までの潜在変数を表すのに使われているため, 内積 ϕ_k の二乗は非負定値行列 $\mathbf{X}^T \mathbf{y} \mathbf{y}^T \mathbf{X}$ の k 番目に大きい固有値に等しくなり, 第 k 潜在変数 z_k の結合係数 \mathbf{w}_k はその固有値に対応する固有ベクトルとして求めることができる。

上述の方法で結合係数 \mathbf{w}_k を求めることはできるが, 第 k 潜在変数 z_k を用いて出力変数を最もよく表現するためには, $k-1$ 番目までの潜在変数を用いて表現できなかった出力変数の成分 $\mathbf{y}^{(k-1)}$ を第 k 潜在変数 z_k の成分 $r_k t_k$

$$r_k t_k = r_k \mathbf{X}^{(k-1)} \mathbf{w}_k \quad (2.59)$$

が最もよく表現するように, 定数 r_k を決定しなければならない。この定数 r_k の決定方法は先に述べた通りである。なお, $\mathbf{X}^{(k-1)}$ は入力変数のデータ行列のうち $k-1$ 番目までの潜在変数を用いて表現されない部分である。

PLS モデルによる予測

P 個の入力変数について合計 N 個のサンプルからなる新しいデータ行列 \mathbf{X}_{new} が与えられた場合に, 既に求めた K 個の潜在変数を用いて出力変数を予測する

方法を示す。モデル構築用データを用いて第 K 潜在変数までを決定したことにより、潜在変数の結合係数 $w_k (k = 1, 2, \dots, K)$ および定数 $r_k (k = 1, 2, \dots, K)$ は既知である。まず、次の行列 (ベクトル) を定義しておく。

$$\mathbf{X}_{new}^{(0)} = \mathbf{X}_{new} \quad (2.60)$$

$$\hat{\mathbf{y}}^{(0)} = \mathbf{0}_N \quad (2.61)$$

ここで、 $\mathbf{0}_N$ はゼロを要素とする N 行列ベクトルである。

出力変数の予測値 $\hat{\mathbf{y}}$ を K 個の潜在変数を用いて計算するためには、以下の式を $k = 1$ から $k = K$ まで繰り返せばよい。

$$\mathbf{t}_{new}^{(k)} = \mathbf{X}_{new}^{(k-1)} w_k \quad (2.62)$$

$$\hat{\mathbf{y}}^{(k)} = \hat{\mathbf{y}}^{(k-1)} + r_k \mathbf{t}_{new}^{(k)} \quad (2.63)$$

$$\mathbf{X}_{new}^{(k)} = \mathbf{X}_{new}^{(k-1)} - \mathbf{t}_{new}^{(k)} \frac{(\mathbf{t}_{new}^{(k)})^T \mathbf{X}_{new}^{(k-1)}}{\|\mathbf{t}_{new}^{(k)}\|^2} \quad (2.64)$$

最終的に予測値 $\hat{\mathbf{y}}$ は

$$\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{y}}^{(K)} \quad (2.65)$$

で与えられる。

データの標準化

ここまでは、各変数の測定値をそのまま用いて、潜在変数を決定する方法について述べた。しかし、各変数が異なる単位で測定されている場合には、単位の取り方によって異なる潜在変数が得られることになる。また、たとえ単位が同じであったとしても、分散の大きく異なる変数に対してそのまま PLS を適用すれば、その結果は分散の大きな変数の影響を強く受けることになり、入力変数間の関係を正しくモデルに反映できない。従って、すべての変数を何らかの方法を用いて標準化する必要がある。

最も簡単で広く利用されている方法は、各変数を平均 0 分散 1 となるように標準化する方法である。具体的には、 P 個の変数について N 個のサンプルがある

場合、その測定値 x_{np}^* ($n = 1, 2, \dots, N; p = 1, 2, \dots, P$) を用いる代わりに、

$$\tilde{x}_{np} = \frac{x_{np}^* - \bar{x}_p}{\sigma_{x_p}} \quad (2.66)$$

を用いる。ここで、 \bar{x}_p, σ_{x_p} はそれぞれ p 番目の変数 x_p の平均値および標準偏差である。

上記の標準化を施すことによって、単位に依存しない分析を行うことが可能になる。しかし、実際の測定データは大きさや性質の異なる様々な誤差を含むため、誤差の影響を強く受けている変数を用いた分析は誤った結果を導く恐れがある。そこで、誤差の影響の程度に応じて各変数に異なる重みを付けるという方法が考えられる。重みの付け方としてはいろいろ考えられるが、誤差の影響を全く受けていない変数はすべて分散が1となるように、誤差のみによって変動している変数についてはその分散が0となるようにするのが直感的にも妥当であろう。このような重みの付け方として、測定値 x_{np}^* ($n = 1, 2, \dots, N; p = 1, 2, \dots, P$) の代わりに、

$$\tilde{x}_{np}^j = \frac{x_{np}^* - \bar{x}_p}{\sigma_{x_p}} \frac{\sigma_{x_p} - \sigma_{x_{pe}}}{\sigma_{x_p}} \quad (2.67)$$

を用いる方法がある。ここで、 $\sigma_{x_{pe}}$ は p 番目の変数 x_p に含まれる誤差の標準偏差である。現実には、誤差の標準偏差を正確に把握することは困難であるが、何らかの方法でその推定値が与えられている場合には、ここで述べたような重み付けが有効となる。

2.4.4 採用する潜在変数の決定

PLS や PCR のように潜在変数を利用する手法においては、採用する潜在変数の数を適切に選択することが極めて重要となる。ここでは、寄与率や累積寄与率について説明するとともに、広く利用されているクロスバリデーションについて述べる。

寄与率と累積寄与率

第 k 潜在変数の入力変数に対する寄与率 $C_x^{(k)}$ とは、第 k 潜在変数によって表される入力変数の分散の和が元の入力変数の分散の総和に占める割合であり、

$$C_x^{(k)} = \frac{\sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^P (x_{np}^{(k-1)})^2 - \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^P (x_{np}^{(k)})^2}{\sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^P x_{np}^2} \quad (2.68)$$

で与えられる。一方、第 k 潜在変数の出力変数に対する寄与率 $C_y^{(k)}$ とは、第 k 潜在変数によって表される出力変数の分散が元の出力変数の分散に占める割合であり、

$$C_y^{(k)} = \frac{\sum_{n=1}^N (y_n^{(k-1)})^2 - \sum_{n=1}^N (y_n^{(k)})^2}{\sum_{n=1}^N y_n^2} \quad (2.69)$$

で与えられる。

さらに、第 k 潜在変数までのすべての潜在変数によって表現される分散の割合を表すための指標として累積寄与率がある。入力変数に対する累積寄与率 $P_x^{(k)}$ および出力変数に対する累積寄与率 $P_y^{(k)}$ はそれぞれ

$$\begin{aligned} P_x^{(k)} &= \sum_{i=1}^k C_x^{(i)} \\ &= 1 - \frac{\sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^P (x_{np}^{(k)})^2}{\sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^P x_{np}^2} \end{aligned} \quad (2.70)$$

$$P_y^{(k)} = \sum_{i=1}^k C_y^{(i)}$$

$$= 1 - \frac{\sum_{n=1}^N (y_n^{(k)})^2}{\sum_{n=1}^N y_n^2} \quad (2.71)$$

で与えられる。

PLS を適用する際に常に問題となるのは、何個の潜在変数を採用すべきかということである。出力変数に対する累積寄与率を指標とする場合には、新たに加えることによる累積寄与率の増加量 (加えた潜在変数の寄与率) がある値以上になる潜在変数をすべて採用するという方法などが考えられる。しかし、このような決定方法は客観的な基準に基づいていないため、妥当な結果が得られる保証はない。実際、累積寄与率は採用する潜在変数の個数に対して単調に増加するが、必要以上に潜在変数を採用すると累積寄与率が高いにもかかわらず新しいサンプルに対する予測精度は低下してしまう。すなわち、(累積) 寄与率は単独では必ずしも適切な指標とならない。PLS の目的は一般に出力変数の予測であるので、モデル構築に利用していないデータに対する予測精度そのものを指標にする方法が考えられる。これが次に述べるクロスバリデーションである。

クロスバリデーション

与えられているデータすべてを使用して PLS モデルを構築すると、新たなサンプルに対する予測精度を把握できないだけでなく、採用すべき潜在変数の個数を決定することも困難になる。そこで、与えられたデータをいくつかのグループに分割し、そのうちの1グループを検証用データ、残りのすべてのグループをモデル構築用データとして、順次モデル構築と検証を繰り返し、予測誤差の二乗和が最小となる潜在変数の個数を求めるという方法がある。これがクロスバリデーションと呼ばれる方法である。

クロスバリデーションの具体的な手順は以下のようになる。

1. 合計 N 個のサンプルを G 個のグループに分割する。
2. $g = 1$ から $g = G$ まで以下の作業を繰り返す。

- (a) g 番目のグループを検証用データ X_g , それ以外のすべてのグループをモデリング用データとする。
- (b) $k = 1$ から $k = P$ まで以下の作業を繰り返す。
 - i. モデリング用データを用いて, 第 k 潜在変数までを採用する場合の PLS モデルを構築する。
 - ii. 検証用データ X_g に対して構築した PLS モデルを適用し, 予測誤差の二乗和 SE_{kg} を求める。
3. 各潜在変数に対して求めた予測誤差の二乗和 SE_{kg} を, 合計 G 個のグループについて積算する。

$$SSE_k = \sum_{g=1}^G SE_{kg} \quad (2.72)$$

4. 予測誤差の二乗和の総和 SSE_k が最小となる潜在変数の個数 K を求める。

このようにして決定した K 個の潜在変数を採用することによって, PLS モデルの予測精度が高くなることが期待できる。

クロスバリデーションは PLS モデルを構築する際に利用されるだけでなく, 主成分分析の際に主成分数を決定するためにも利用される。採用する潜在変数の数を適切に決定することは極めて重要な問題であるため, 単純な予測誤差以外の指標も提案されている^[11-14]。また, クロスバリデーションを用いずに潜在変数の数を決定するために, 最終予測誤差基準や AIC を評価基準として採用することもできる。

2.5 結言

線形回帰モデルを構築する際には, 多重共線性の問題に注意しなければならない。本章では, 多重共線性の問題を回避できる手法として, いくつかの線形回帰手法を紹介した。ここで扱った以外にも数多くの手法が提案されており^[2,15,16], 各手法の比較も行われている^[17-19]。さらに, PCA や PLS を多次元データ (通常は 2 次元) に適用する手法も提案されている^[20]。なお, 非線形手法については全

く言及しなかったが、ニューラルネットワークを利用した非線形 PCA や非線形 PLS も提案されている^[21,22]。

PLS をはじめとする数多くの手法について、どの手法が最も良いかを明言することは困難である。そのため、適用対象に応じて、各手法の特徴を考慮して判断せざるをえない。プロセスシステム工学の分野においては、PLS が特に注目を集め、モデル構築や制御、モニタリングなどに広く適用されている。膨大な運転データを利用して、より高度な運転を実現するために、PLS に代表される多変量解析手法は今後益々重要なツールとして活用されるであろう。

2.6 記号説明

Symbols

C	propotion
J	performance index
I	identity matrix
P	cumulative propotion
Q	sum of squared error
r_k	k -th coefficient
r_{yz}	correlation coefficient
SE	sum of squared error
SSE	sum of SE
t	score vector
U	left singular matrix
V	right singular matrix
w	coefficient vector
w	coefficient
X	input matrix
x	input variable

\bar{x}	mean value of x
\mathbf{y}	output vector
y	output variable
\bar{y}	mean value of y
$\hat{\mathbf{y}}$	estimate of output vector
\mathbf{z}	latent vector
z	latent variable

Greek Characters

λ, μ	Lagrange's multiplier
ϕ	inner product
Σ	diagonal matrix
σ_k	k -th singular value
σ	variance / covariance
θ	regression vector
θ	angle

Superscripts

T	transpose
$+$	pseudo inverse
$*$	measurement

2.7 引用文献

1. Strang, G. (山口昌哉, 井上昭 訳), “線形代数とその応用”, 産業図書 (1978)
2. 片山徹, “システム同定入門”, 朝倉書店, システム制御情報ライブラリー 9 (1994)
3. 大野弘, 橋本伊織, “特異値分解 —基礎編—”, 化学工学, **50**, 11, 819-824

- (1986)
4. Massy, W. F., "Principal components regression in exploratory statistical research", *J. of the American Statistical Association*, **60**, 234-256 (1965)
 5. Hoerl, A. E., "Optimum Solution of Many Variables Equations", *Chem. Eng. Prog.*, **55**, 11, 69-78 (1959)
 6. Hoerl, A. E., "Application of Ridge Analysis to Regression Problems", *Chem. Eng. Prog.*, **58**, 3, 54-59 (1962)
 7. Wold, S., A. Ruhe, H. Wold, and W. J. Dunn III, "The collinearity problem in linear regression. The partial least squares (PLS) approach to generalized inverses", *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **5**, 3, 735-743 (1984)
 8. Geladi, P. and B. R. Kowalski, "Partial least-squares regression: A tutorial", *Analytica Chimica Acta*, **185**, 1-17 (1986)
 9. Lorber, A., L. E. Wangen, and B. R. Kowalski, "A theoretical foundation for the PLS algorithm", *J. of Chemometrics*, **1**, 19-31 (1987)
 10. Glen, W. G., W. J. Dunn III, and D. R. Scott, "Principal component analysis and partial least squares regression", *Tetrahedron Computer Methodology*, **2**, 349-376 (1989)
 11. Wold, S., "Cross-validatory estimation of the number of components in factor and principal components models", *Technometrics*, **20**, 4, 397-405 (1978)
 12. Eastment, H. T. and W. J. Krzanowski, "Cross-validatory choice of the number of components from a principal component analysis", *Technometrics*, **24**, 1, 73-77 (1982)
 13. Krzanowski, W. J., "Cross-validatory choice in principal component analysis; Some sampling results", *J. Statist. Comput. Simul.*, **18**, 299-314 (1983)
 14. Krzanowski, W. J., "Cross-validation in principal component analysis", *Biometrics*, **43**, 575-584 (1987)

15. Webster, J. T., R. F. Gunst, and R. L. Mason, "Latent Root Regression Analysis", *Technometrics*, **16**, 4, 513-522 (1974)
16. Golub, G. H. and C. F. Van Loan, "An analysis of the total least squares problem", *SIAM J. Numer. Anal.*, **17**, 6, 883-893 (1980)
17. 大野弘, 加納学, 橋本伊織, "多変量解析のプロセス監視への応用", 第6回制御技術シンポジウム資料, 99-104, 東京 (1998)
18. Ricker, N. L., "The use of biased least-squares estimators for parameters in discrete-time pulse-response models", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **27**, 2, 343-350 (1988)
19. Frank, I. E. and J. H. Friedman, "A statistical view of some chemometrics regression tools", *Technometrics*, **35**, 2, 109-135 (1993)
20. Wold, S., P. Geladi, K. Esbensen, and J. Ohman, "Multi-way principal components- and PLS-analysis", *J. of Chemometrics*, **1**, 41-56 (1987)
21. Kramer, M. A., "Nonlinear principal component analysis using autoassociative neural networks", *AIChE J.*, **37**, 2, 223-243 (1991)
22. Qin, S. J. and T. J. McAvoy, "Nonlinear PLS modeling using neural networks", *Comput. Chem. Engng.*, **16**, 4, 379-391 (1992)

第3章

ナフサ分解炉反応管外壁温度の推定

3.1 緒言

Lummus 法エチレンプロセス^[1,2]の最初に位置するナフサ分解炉^[3]では、原料ナフサを熱分解することによってエチレン・プロピレンを主生成物として生産しているが、この際、副生成物であるコークが反応管内壁に層を形成（コーキング）し、管の総括伝熱係数を徐々に低下させる。一方、主生成物の収率を設定値に保持するために、反応管出口における分解ガス温度を一定に保つような制御が行われている。この操作の結果、コーク層の成長すなわち反応管の総括伝熱係数の低下に伴い、反応管外壁温度（スキン温度）が上昇する。ナフサ分解炉の運転においては、スキン温度が反応管の材質から定まる上限値を越えないようにしなければならない。したがって、スキン温度が許容限界温度に近づくと、反応管内壁に堆積したコーク層の除去（デコーキング）が行われる。分解炉の型式や運転状態にもよるが、デコーキングは数ヶ月ごとに行われる。

本研究で対象とする大阪石油化学のエチレンプラントには全 15 炉のナフサ分解炉があり、プラント全体の生産計画に基づいて各分解炉のデコーキング時期が決定されている。その際、多くの分解炉で同時にデコーキングを行うと全体としての生産量が確保できなくなるため、分解炉を同時期に停止させないように、かつ各分解炉のスキン温度が許容限界温度を越えないように、デコーキング時期を適切に決定しなければならない。さらに、分解炉を効率良く運転するという観点

からは、スキン温度が許容限界温度に達する直前にデコーキングを行うことが望まれる。このように、分解炉のデコーキング時期はエチレンプラントの運転効率に対して大きな影響を与えるため、正確にスキン温度をモニタリングし、その情報を運転計画に反映させることが極めて重要な課題となる。しかし、オペレータが現場でパイロメータを用いてスキン温度を測定していることや、多くの分解炉に対して測定を行う必要があることなどの理由から、頻繁にスキン温度を測定することは困難であり、およそ5日毎にスキン温度が測定されているのが実状である。このため、実際には、数少ないスキン温度実測値をもとに、オペレータが自分の経験に基づいて、将来におけるスキン温度の変化を予測し、その予測値を参考にしてデコーキングの開始時期が決定されている。

デコーキング時期がプラントの運転効率に大きな影響を与えることを考えると、現在のようなオペレータの経験に基づく開始時期決定方法は適切であるとはいえない。一方、プラントの自動化を推進するという観点からは、オペレータの負荷を軽減する必要があるが、現在以上に頻繁にスキン温度を測定することはできない。従って、より効率の高い分解炉の運転を実現すると同時に、オペレータの負荷を軽減するために、オンラインで測定されるプロセス変数からスキン温度を推定することが可能なスキン温度推定システムの開発が強く求められている。

スキン温度推定システムの開発に際しては、推定モデルの構築が必要不可欠である。分解炉内の反応現象は非常に複雑であり^[4]、詳細な物理モデルを構築するのは極めて困難な作業であると言える。これまでに提案されている物理モデルとしては、SPYRO (Simulation of Pyrolysis Operations)^[6]で利用されているものがある。SPYROを利用することにより、反応管出口組成、管内温度プロフィール、スキン温度プロフィール、圧力プロフィール、コーク成長速度などを求めることができる。しかし、詳細な反応モデルを利用するがゆえに、パラメータ推定に多大なデータと労力が必要になる。一方、経験的モデルとしては、線形回帰モデルやニューラルネットワークを用いた非線形モデルなどが考えられる。しかし、コーク層の成長に伴い運転状態が変化するため、線形回帰モデルなどの単純な統計モデルのみで信頼性の高い推定モデルを構築することは困難である。また、採取可能なデータ数や外挿精度の問題から、ニューラルネットワークの適用も難しいと考えられる。

このような特徴を持つ分解炉に対して、簡単なコーク成長速度モデルと基礎的な伝熱モデルを用いたスキン温度推定システムが Ohshima らによって提案されている^[6]。その推定システムでは、推定精度を向上させるために、拡張カルマンフィルタを用いてモデルに含まれるパラメータをオンラインで逐次更新するという方法が採用されている。しかし、この推定方法では、推定精度を向上させる、すなわちパラメータを更新するために、スキン温度の実測値が必要である。従って、推定精度の向上と測定頻度の低減という2種類の要求を同時に満たすことはできない。

本研究では、Ohshima らの用いた物理モデルを精密化するとともに、物理モデルでは表現しきれないスキン温度の挙動（物理モデルの推定誤差）を表現するための統計モデルを構築し、得られた物理モデルと統計モデルとを統合させることによって、広範な運転状態に対して適用可能なスキン温度推定システムを開発する。統計モデルの構築には、多変量解析手法の一種である PLS (Partial Least Squares) を利用する。さらに、開発したスキン温度推定システムを実操業データに適用し、その有効性を検証する。

3.2 ナフサ分解炉の概要

本研究で対象とするナフサ分解炉は、Lummus SRT-1,2,4,5 型炉 (Short Residence Time Cracking Furnace) である。その概略を Fig. 3.1 に示す。ナフサ分解炉は、コンベクション部・クロスオーバー部・ラジアント部の3つの部分から構成されている。原料となるナフサは4本の反応管に分けられた後、コンベクション部での予熱および希釈水蒸気との混合を経て、クロスオーバー部・ラジアント部に送られ、燃料ガスおよびガスタービン排ガスを利用して加熱される。ナフサと希釈水蒸気の比率はナフサの分解速度をあるレベルに保持するように決定される。さらに、収率を一定に保つために、反応管出口温度を一定に制御する必要がある。このために、4本の反応管へ流入するナフサの割合が調節され、加熱に必要な熱量から燃料ガスおよびガスタービン排ガス流量が決定される。測定されているプロセス変数のうち代表的なものを Fig. 3.1 に、各変数の説明を Table 3.1

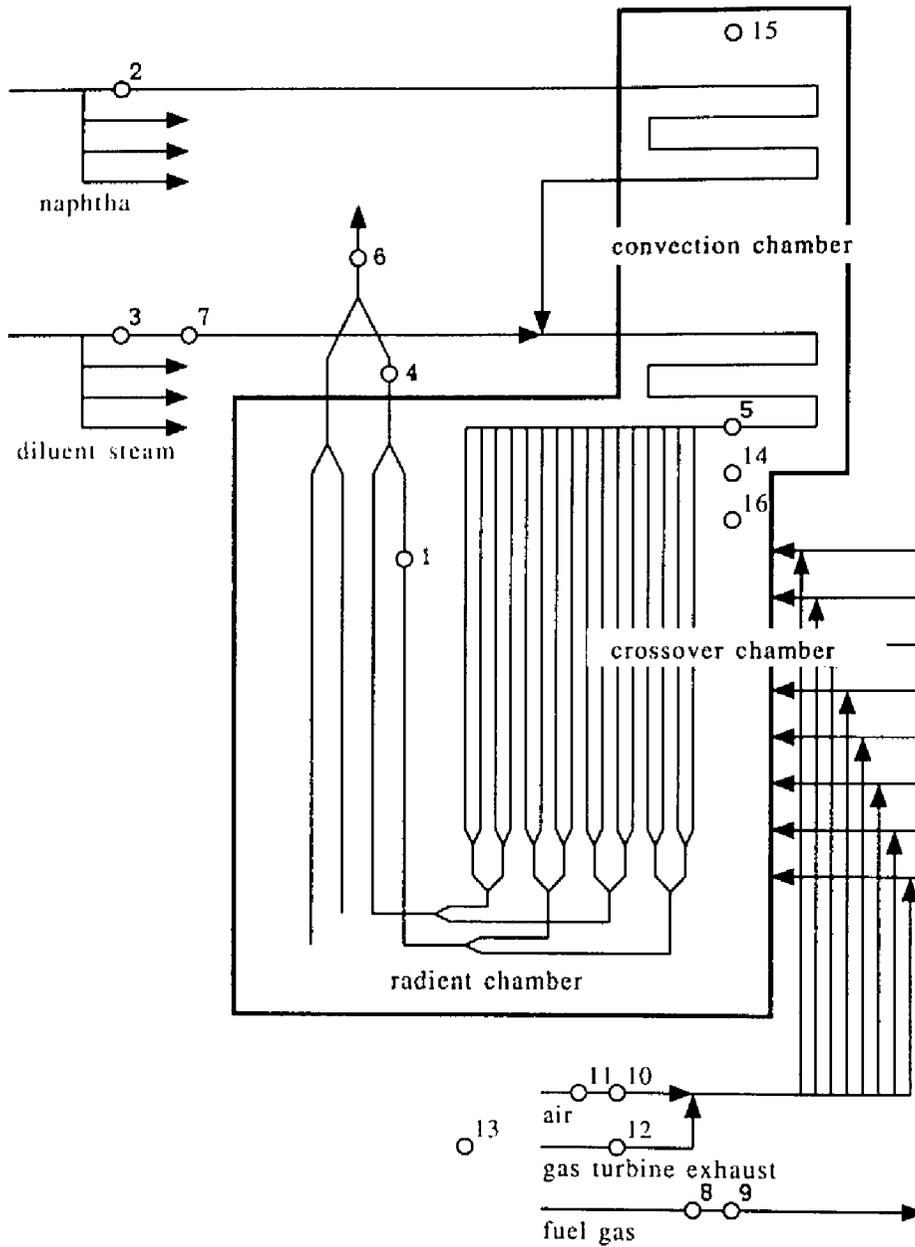


Fig. 3.1 Schematic diagram of pyrolysis (Lummus SRT-4).

Table 3.1 Measured process variables in Fig. 3.1.

No.	variable
1	skin temperature
2	flow rate of naphtha
3	flow rate of diluent steam
4	temperature of bulk flow at exit of tube
5	temperature of bulk flow at entrance of tube
6	pressure of bulk flow at exit of tube
7	pressure of diluent steam
8	molecular weight of fuel gas
9	flow rate of fuel gas
10	flow rate of gas turbine exhaust
11	temperature of gas turbine exhaust
12	flow rate of air
13	atomospheric temperature
14	temperature of combustion gas at crossover chamber
15	temperature of combustion gas at convection chamber
16	pressure at draft

に示す。

熱分解の進行に伴い、副生成物であるコークが反応管内壁に層を形成し、反応管の総括伝熱係数を低下させる。反応管出口温度を一定に保つような制御が行われているため、反応管の総括伝熱係数の低下に伴い、スキン温度が徐々に上昇する。そのため実プラントでは、スキン温度が管材質から定まる限界温度を越えてないことを確認するために、5日に1回程度の頻度でオペレータがパイロメータを用いてスキン温度を測定している。こうして測定されたスキン温度およびプラント全体の生産計画に基づいて、デコーキングの時期が決定される。

3.3 物理モデルの構築

分解炉内の反応現象は非常に複雑であるため、詳細な反応モデルを利用すると、パラメータ推定に多大なデータと労力が必要になる。一方、経験的モデルでは、コーク層が成長するにつれてプロセスの特性が変化することや、デコーキング後に反応管内壁に残存するコーク層の厚さが毎回異なることなどに適切に対応することは困難である。

本研究の目的はスキン温度の推定であるため、それほど詳細な反応モデルは必要ない。しかし、運転データのみに基づく統計モデルでは十分な精度での推定は困難である。そこで、本研究では、比較的単純な物理モデルを採用することにする。本節では、Ohshimaらによって提案されている簡単なコーク成長速度モデルと基礎的な伝熱モデルを用いたスキン温度推定モデル^[6]に改良を加え、精密化した物理モデルについて説明する。

3.3.1 コーク成長速度モデル

反応管壁におけるコーク層の成長機構を、

1. コーク前駆体のバルク流体から反応管壁への物質移動
2. コーク前駆体の反応管壁での化学反応によるコークの生成と堆積

の2段階で表現する物理モデルが提案されている^[7]。この簡単な物理モデルは次式で表される。

$$R_m = K_m(y_c - y_{ci}) \quad (3.1)$$

$$R_r = K_r \frac{y_{ci} P_t}{RT} \quad (3.2)$$

ここで、

K_m	ガス境膜物質移動係数	$[\text{kmol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}]$
K_r	反応速度定数	$[\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}]$
P_t	全圧	$[\text{Pa}]$
R	ガス定数	$[\text{J} \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$
R_m	物質移動速度	$[\text{kmol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}]$
R_r	反応速度	$[\text{kmol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}]$
T	管壁の絶対温度	$[\text{K}]$
y_c	管内流体中コーク前駆体モル分率	$[-]$
y_{ci}	管壁におけるコーク前駆体モル分率	$[-]$

である。反応管壁において擬定常状態

$$R_m = R_r \quad (3.3)$$

が成り立つと仮定すると、Eqs. (3.1),(3.2) より、

$$y_{ci} = \frac{K_m y_c}{K_m + \frac{K_r P_t}{RT}} \quad (3.4)$$

となる。さらに、擬定常状態では、コーク成長速度 R_c $[\text{kmol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}]$ は物質移動速度 R_m および反応速度 R_r に等しくなるため、次式で与えられる。

$$R_c = R_r = R_m = K_m y_c \left(1 - \frac{K_m}{K_m + \frac{K_r P_t}{RT}} \right) \quad (3.5)$$

分解炉では、反応管壁温度が管内流体温度よりもかなり高くなる。このような高温域では、反応速度定数 K_r が物質移動係数 K_m よりも非常に大きくなり、

$$\frac{K_m}{K_m + \frac{K_r P_t}{RT}} \rightarrow 0 \quad (3.6)$$

となるため、コーク成長速度 R_c は近似的に次式で与えられる。

$$R_c = K_m y_c \quad (3.7)$$

これより、コーキングは拡散律速プロセスであることがわかる。

一方、管内乱流移動現象に関する以下の式が成り立つ。

Koo の実験式^[8] :

$$f = 0.046 Re^{-0.2} \quad (3.8)$$

直管内の j-ファクター^[9] :

$$\frac{f}{2} = j_d = Sh Re^{-1} Sc^{-1/3} \quad (3.9)$$

ここで、

f	ファニングの流体摩擦係数	[-]
j_d	j-ファクター	[-]
Re	レイノルズ数	[-] (= $(Dv\rho)/\mu$)
Sc	シュミット数	[-] (= $\mu/(\rho\mathcal{D}_c)$)
Sh	シャーウッド数	[-] (= $(K_m M_w D)/(\rho\mathcal{D}_c)$)
D	反応管有効内径	[m]
M_w	管内流体の分子量	[kg·kmol ⁻¹]
v	管内流体の平均流速	[m·s ⁻¹]
μ	管内流体の粘度	[Pa·s]
ρ	管内流体の密度	[kg·m ⁻³]
\mathcal{D}_c	管内流体中におけるコーク前駆体の拡散係数	[m ² ·s ⁻¹]

である。流速 v と管内流体の質量流量 W_f [kg·s⁻¹] との間には

$$W_f = \frac{\pi}{4} D^2 v \rho \quad (3.10)$$

という関係が成り立つ。Eqs. (3.8),(3.9),(3.10) をまとめて、物質移動係数 K_m について整理すると、次式を得る。

$$K_m = 0.023 \left(\frac{4}{\pi} \right)^{0.8} \frac{(\rho\mathcal{D}_c)^{2/3} W_f^{0.8}}{M_w \mu^{7/15} D^{1.8}} \quad (3.11)$$

この式において、分子量 M_w 、粘度 μ 、密度 ρ 、拡散係数 D_c が運転状態に関わらずほぼ一定であると仮定すると、反応管有効内径 D が反応管内径 D_i およびコーク層厚さ d を用いて、

$$D = D_i - 2d \quad (3.12)$$

で与えられることから、物質移動係数 K_m は

$$K_m = K_1 \frac{W_f^{0.8}}{(D_i - 2d)^{1.8}} \quad (3.13)$$

$$K_1 = 0.023 \left(\frac{4}{\pi} \right)^{0.8} \frac{(\rho D_c)^{2/3}}{M_w \mu^{7/15}} \quad (3.14)$$

となる。ここで、 K_1 は定数である。Eq. (3.11) を Eq. (3.7) に代入すると、コーク成長速度 R_c は

$$R_c = K_1 \frac{W_f^{0.8}}{(D_i - 2d)^{1.8}} y_c \quad (3.15)$$

となる。

Solomon は Eq. (3.15) における管内流体中コーク前駆体モル分率 y_c をも定数 K_1 に含めたコーク成長速度モデルを提案し^[7]、Ohshima らはそのモデルを利用している^[6]。しかし、Solomon のモデルでは、コーク前駆体モル分率の変化に伴うコーク成長速度の変化を表現できない。そこで、コーク前駆体モル分率の変化がコーク成長速度に及ぼす影響をモデルに組み込むために、コーク前駆体モル分率が原料のナフサ濃度に比例すると考えて、最終的にコーク成長速度を

$$R_c = K_2 \frac{W_f^{0.8}}{(D_i - 2d)^{1.8}} \frac{W_n}{W_f} \quad (3.16)$$

で表現する。ここで、 W_n はナフサの質量流量 [$\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$] である。

3.3.2 スキン温度の伝熱モデル

反応管壁まわりの温度勾配は Fig. 3.2 のように表される^[6]。熱は、管壁・コーク層・ガス境膜の順に伝わる。従って、スキン温度 T_{skin} は、管内流体温度 T_p お

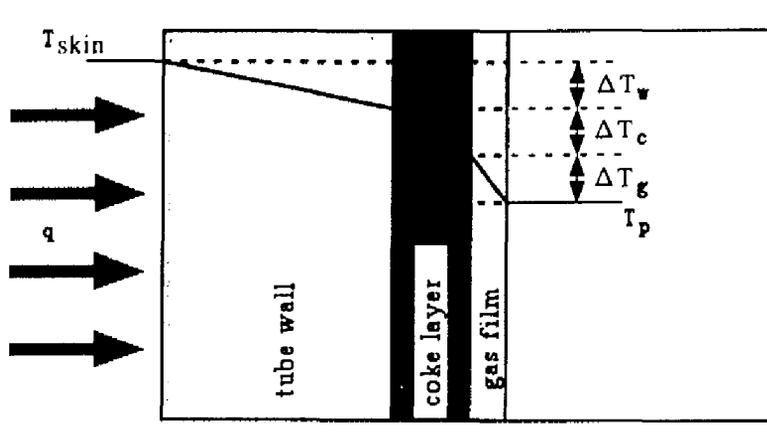


Fig. 3.2 Temperature gradients at the tube wall.

よび管壁・コーク層・ガス境界膜での温度降下 $\Delta T_w, \Delta T_c, \Delta T_g$ の和として次式で与えられる。

$$T_{skin} = T_p + \Delta T_g + \Delta T_c + \Delta T_w \quad (3.17)$$

円筒壁における定常熱伝導方程式は、半径方向の中心軸からの距離を r として

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) = 0 \quad (3.18)$$

で与えられる。いま、内半径 R_i 、外半径 R_o の円筒壁について、内面および外面の温度がそれぞれ T_i, T_o であるとして、すなわち

$$r = R_i : T = T_i \quad (3.19)$$

$$r = R_o : T = T_o \quad (3.20)$$

を境界条件として、Eq. (3.18) を解くと、

$$\frac{T - T_o}{T_i - T_o} = \frac{\ln(r/R_o)}{\ln(R_i/R_o)} \quad (3.21)$$

を得る。Eq. (3.21) を熱伝導に関するフーリエの法則

$$q_r = -k \frac{\partial T}{\partial r} \quad (3.22)$$

に代入すると,

$$q_r = -k \frac{T_i - T_o}{\ln(R_i/R_o)} \frac{1}{r} \quad (3.23)$$

となる。ここで、 k は熱伝導度 [$\text{J}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$] であり、 q_r は r 方向の熱流束 [$\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$] である。これより、円筒壁の単位長さについて、壁を単位時間あたりに通過する熱量 q [$\text{J}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$] は

$$q = 2\pi k \frac{T_o - T_i}{\ln(R_o/R_i)} \quad (3.24)$$

で与えられることがわかる。Eq. (3.24) を管壁およびコーク層に適用すると、

$$\Delta T_w = \frac{q}{2\pi k_w} \ln\left(\frac{D_o}{D_i}\right) \quad (3.25)$$

$$\Delta T_c = \frac{q}{2\pi k_c} \ln\left(\frac{D_i}{D_i - 2d}\right) \quad (3.26)$$

を得る。ここで、 k_w, k_c はそれぞれ反応管およびコーク層の熱伝導度である。

ガス境界膜は非常に薄く、平面として扱うことができると仮定すると、壁面における壁面から流体側への熱流束 q_w [$\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$] は

$$q_w = h \Delta T_g \quad (3.27)$$

で与えられる。ここで、 h はガス境界膜伝熱係数 [$\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$] である。これより、

$$\Delta T_g = \frac{q}{\pi h (D_i - 2d)} \quad (3.28)$$

を得る。なお、ガス境界膜を通過する熱量は Eqs. (3.25), (3.26) における熱量 q と等しくなる。

さて、Eqs. (3.25), (3.26) 中の熱伝導度 k_w, k_c は、反応管の材質やコークの物性によって定まる定数である。しかし、Eq. (3.28) 中のガス境界膜伝熱係数 h は定数ではなく、流体の種類や流れの状態によって定まる値である。円管内乱流については、次の無次元式が成り立つ¹⁰⁾。

$$\frac{hD}{k_p} = 0.023 Re^{0.8} Pr^{0.4} \quad (3.29)$$

ここで、

k_p	管内流体の熱伝導度	$[\text{J}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$
Pr	プラントル数	$[-] (= (C_p\mu)/k_p)$
C_p	管内流体の定圧比熱容量	$[\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$

である。Eqs. (3.10),(3.29) をまとめて、ガス境膜伝熱係数 h について解くと、次式を得る。

$$h = 0.023 \left(\frac{4}{\pi} \right)^{0.8} \frac{C_p^{0.4} k_p^{0.6}}{\mu^{0.4}} \frac{W_f^{0.8}}{(D_i - 2d)^{1.8}} \quad (3.30)$$

さらに、 C_p, k_p, μ が運転状態に関わらずほぼ一定であると仮定して、Eq. (3.30) を Eq. (3.28) に代入すると、

$$\Delta T_g = K_3 q \left(\frac{W_f}{D_i - 2d} \right)^{0.8} \quad (3.31)$$

$$K_3 = \frac{1}{0.0877} \frac{\mu^{0.4}}{C_p^{0.4} k_p^{0.6}} \quad (3.32)$$

を得る。ここで、 K_3 は定数である。

以上より、Eqs. (3.17),(3.25),(3.26),(3.31) を用いて、スキン温度は次式で表現される。

$$T_{skin} = T_p + q \left\{ K_3 \left(\frac{W_f}{D_i - 2d} \right)^{0.8} + \frac{1}{2\pi k_c} \ln \left(\frac{D_i}{D_i - 2d} \right) + \frac{1}{2\pi k_w} \ln \left(\frac{D_o}{D_i} \right) \right\} \quad (3.33)$$

なお、Olshima らが用いた伝熱モデルでは、ガス境膜での温度変化が無視されている^[6]。

3.3.3 物理モデルの離散化

スキン温度推定システムの適用対象となる大阪石油化学のナフサ分解炉においては、スキン温度の予測に、各プロセス変数の一日平均の値を利用することができる。従って、コーク成長速度モデル Eq. (3.16) および伝熱モデル Eq. (3.33) を次の差分方程式で表す。

$$d(t+1) = d(t) + C_1 \frac{W_f(t)^{0.8}}{(D_i - 2d(t))^{1.8}} \frac{W_n(t)}{W_f(t)} \quad (3.34)$$

$$T_{skin}(t) = T_p(t) + qC_2 \left\{ \alpha \left(\frac{W_f(t)}{D_i - 2d(t)} \right)^{0.8} + \ln \left(\frac{D_i}{D_i - 2d(t)} \right) + \beta \right\} \quad (3.35)$$

ここで、 t は時間を表し、単位時間は1日である。 C_1, C_2 はプロセスデータから推定すべきパラメータであり、炉ごとに固有の値を持つ。一方、 α, β は物性データと反応管径を用いて以下の式から算出される。

$$\alpha = \frac{2\pi k_c}{0.0877} \frac{\mu^{0.4}}{C_p^{0.4} k_p^{0.6}} \quad (3.36)$$

$$\beta = \frac{k_c}{k_w} \ln \left(\frac{D_o}{D_i} \right) \quad (3.37)$$

コーク成長速度モデルおよび伝熱モデルの導出に際して、 T_p は管内流体温度、 q はスキン温度測定点における反応管単位長さ単位時間あたりの伝熱量と定義した。しかし、いずれもオンラインで測定可能な変数ではない。このため、管内流体温度 T_p は、スキン温度測定点が反応管出口に近いことから、反応管出口温度で代用することとした。一方、伝熱量 q は、炉全体での流体の受熱量に比例すると仮定した。炉全体の受熱量は、燃料ガスの発熱量およびガスタービン排ガスが持ち込む熱量の和から燃焼後の排ガスが持ち出す熱量を差し引くことによって計算される。

3.3.4 物理モデルによるスキン温度の推定

前節で求めた物理モデルを用いてスキン温度を推定する場合、運転初日のコーク層厚さ $d(1)$ を初期値として与える必要がある。デコーキングが理想的に行われている場合には、 $d(1)$ はゼロとみなせるが、実際にはデコーキングの状況は毎回異なる。従って、運転初日コーク層厚さ $d(1)$ を、オンラインで測定されるプロセスデータおよびスキン温度の実測値から推定しなければならない。

物理モデルに基づくスキン温度推定の手順は以下のようになる。

[オフライン]

1. 分解炉の設計条件および物性値から、 α, β を求める。
2. 既存の運転データを用いて、炉毎に固有の値を持つパラメータ C_1, C_2 を決定する。

[オンライン]

1. 運転初期のスキン温度測定値とその推定値の誤差の二乗和が最小となるように、非線形最小二乗法を用いて、運転初日コーク層厚さ $d(1)$ を推定する。
2. オンラインで測定されるプロセスデータからスキン温度を推定する。

なお、本研究では、オフラインで決定すべきパラメータ α, β, C_1, C_2 を分解炉の型式 (SRT-1,2,4,5) ごとに定めた。フィッティングパラメータ C_1, C_2 および初日コーク層厚さ $d(1)$ が推定値に与える影響を Fig. 3.3 に示す。Fig. 3.3 より、パラメータ C_1 はスキン温度推定値の上昇速度に、パラメータ C_2 はスキン温度推定値のレベルに影響を与えることがわかる。さらに、初日コーク層厚さ $d(1)$ はパラメータ C_2 と同様の効果を有することもわかる。このような特徴を考慮して、以下の手順でパラメータを決定した。

[パラメータの決定手順]

1. スキン温度測定値の上昇傾向を的確に表現できるように、各炉型式ごとにパラメータ C_1 を決定する。
2. 初日コーク層厚さ $d(1)$ がゼロに近い正の値をとるように、各炉型式ごとにパラメータ C_2 を決定する。

このようにして決定したパラメータを用いて、SRT-4 型炉のスキン温度を推定した結果を Fig. 3.4, 3.5, 3.6 に示す。各図には、ナフサ流量、ガスタービン排ガス (GTE) 流量の実測値、およびコーク層厚さの推定値も示してある。この3ランのデータは、スキン温度推定システムの開発を目的として、ほぼ毎日スキン温度が測定されている貴重なものであり、今回モデル検証用として利用した。パラメータ C_1, C_2 の決定には別の運転データ (炉型式は同一) を用いている。すなわち、パラメータを決定するためのモデル構築用データと得られた物理モデルを検証するためのデータとを区別している。一方、初日コーク層厚さ $d(1)$ は運転初期の2点のスキン温度実測値から決定している。ただし、運転初日はスタートアップに伴いプロセス変数が特殊な値をとるため、初日の実測値は利用していない。すべてのランにおいて推定値は実測値の変動をよく表しており、構築した物理モデルは妥当なものであると判断できる。さらに、オンライン推定に必要なスキン

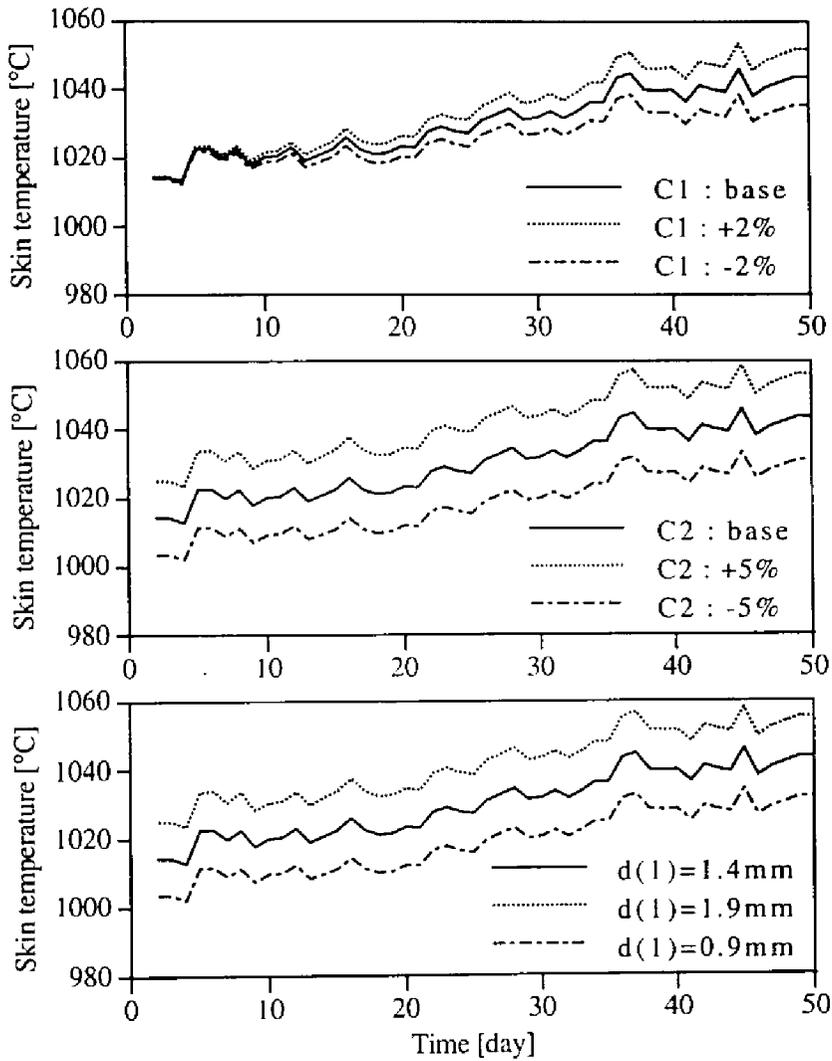


Fig. 3.3 Influence of the parameters on skin temperature estimates. : Influence of C_1 (top), C_2 (middle), and initial coke layer thickness $d(1)$ (bottom).

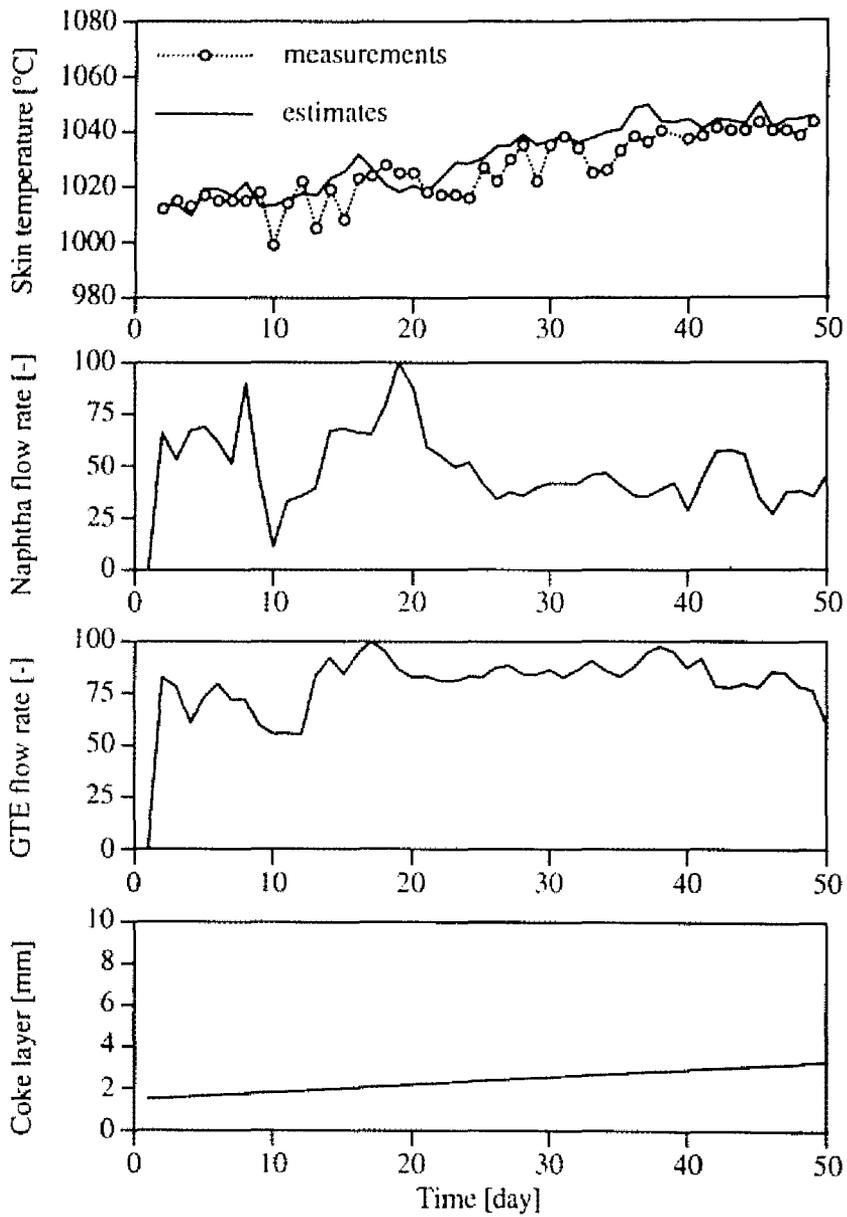


Fig. 3.4 Estimation result of skin temperature using physical model (Run 1).

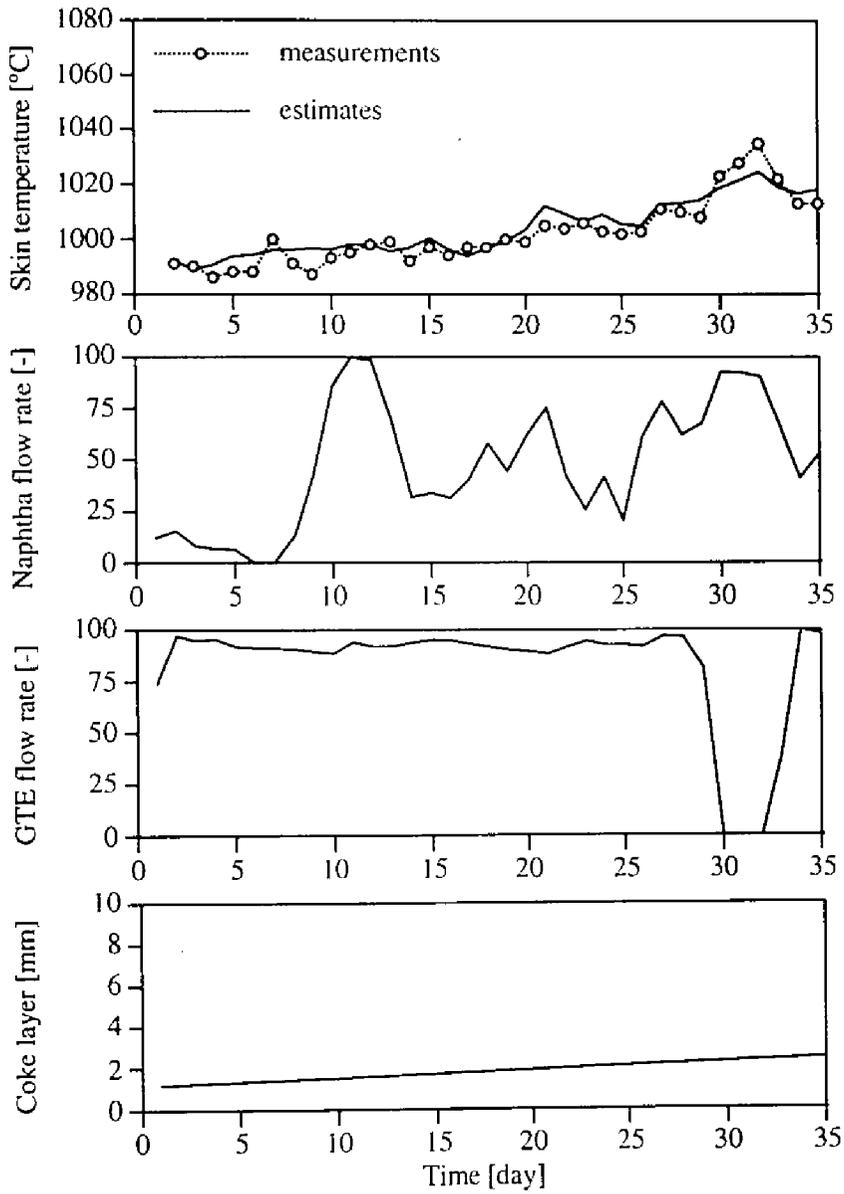


Fig. 3.5 Estimation result of skin temperature using physical model (Run 2).

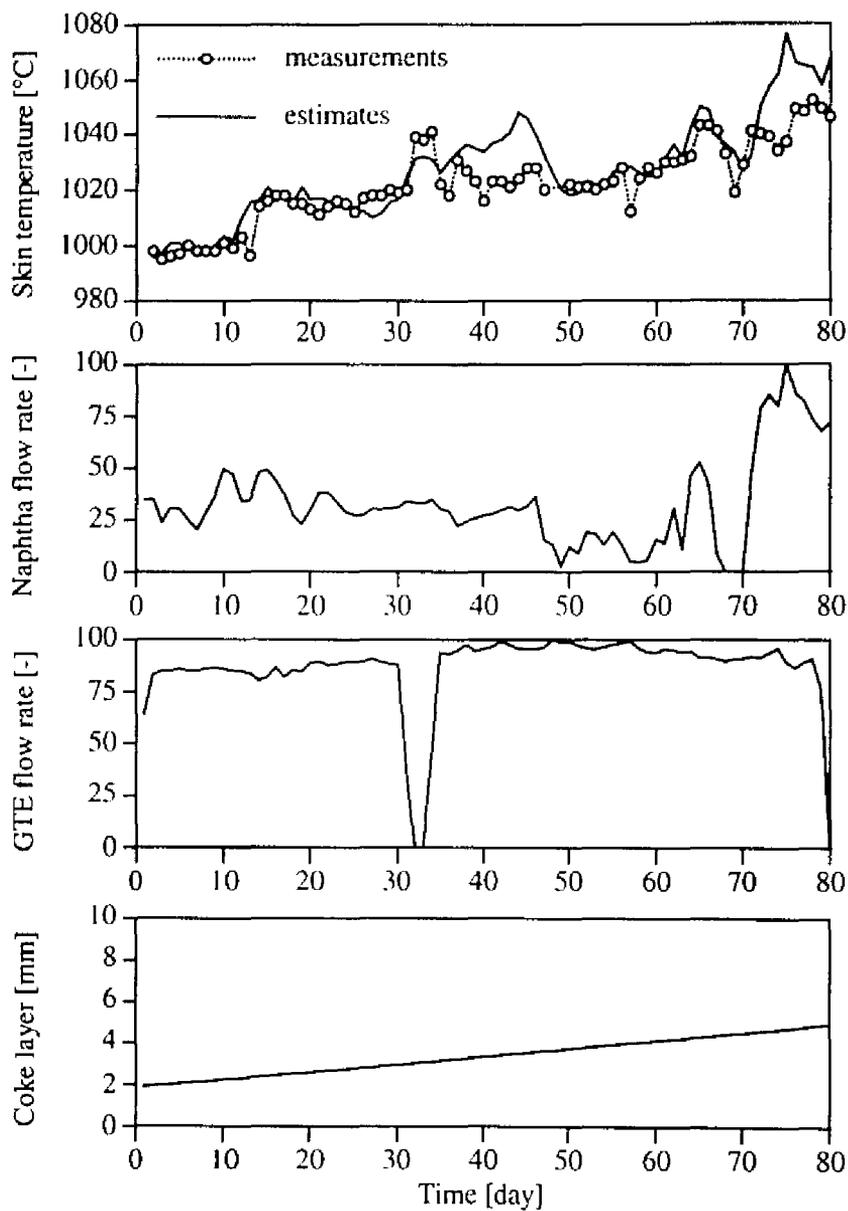


Fig. 3.6 Estimation result of skin temperature using physical model (Run 3).

温度の実測値が運転初期の2点のみで十分であるという事実は、スキン温度の測定頻度を削減するという目的にも合致するものである。

しかしながら、Fig. 3.5の30日以降に着目すると、スキン温度測定値の急激な変化を、物理モデルによって十分に表現できていないことがわかる。この急激な温度変化の原因は、炉の加熱に利用しているGTE流量の急激な変動である。過去の運転経験からGTE流量を大きく低下させるとスキン温度が上昇することが知られているが、この現象をFig. 3.5から確認することができる。同様な現象はFig. 3.6にも現れている。実際、図中の30～35日に着目すると、GTE流量の急激な低下と同時にスキン温度測定値が上昇し、その後のGTE流量の上昇に応じてスキン温度測定値が低下しているが、このスキン温度の変動を推定値は十分に表現できていない。

以上より、構築した物理モデルだけでは表現しきれない現象が存在することがわかる。ただし、運転状態が急激に変動していない部分では、精度の高い推定が行われていることから、構築した物理モデルはスキン温度の推定に対して有効であると結論できる。

3.4 物理モデルと統計モデルの統合

構築した物理モデルに基づくスキン温度推定を多くの実操業データに対して行った結果、物理モデルだけではスキン温度の変動を十分な精度で表現できない場合があることが明らかになった。さらに推定精度を向上させるためには、次の3種類の方法が考えられる。

1. 物理モデル中のパラメータを逐次更新する。
2. より正確な物理モデルを構築する。
3. 経験的あるいは統計的なモデルを用いる。

本研究で対象としているナフサ分解炉では、スキン温度の測定頻度を削減することが目的の一つであるため、パラメータの更新ごとに測定値が必要となる1)の方法を採用することは適切でない。2)の方法については、限られた測定データに基づいてパラメータを推定する必要があるため、物理モデルの精密化と推定す

べきパラメータ数の削減とを共に満たすような物理モデルを構築しなければならない。しかし、ここで対象としているナフサ分解炉において、パラメータ数を増加させることなく物理モデルをさらに精密化することは極めて困難である。3)の方法については、コーク層の成長による運転状態の変化を表現できるような統計モデルの構築は困難であると同時に、利用できるスキン温度の測定データが非常に少ないため、構築した統計モデルの信頼性が極めて低くなると考えられる。

以上のことから、本研究では、既に導出した物理モデルと新たに構築する統計モデルとを統合することによって、スキン温度を推定する方法を提案する。なお、スキン温度のおおまかな変動は今回導出した物理モデルで表現できるため、その推定誤差を表現するモデルとしては、線形モデルで十分であると考えられる。線形モデルの構築には、モデルの入力変数となるプロセス変数が互いに相関を持つことを考慮して、PLS (Partial Least Squares) を用いる。

3.4.1 PLS モデルの構造

物理モデルを作成する際に炉型式ごとにパラメータを決定したように、炉型式ごとに PLS モデルを構築する方法も考えられる。しかし、炉によってはスキン温度測定値のサンプル数が少ないことや、スキン温度のおおまかな変動は物理モデルで表現されており、運転状態が大きく変化した場合の補正が PLS モデルの主たる目的であることを考慮して、全 15 炉に共通の PLS モデルを構築することにした。

物理モデルによるスキン温度の推定誤差を表現できるモデルの構築が目的であるため、PLS モデルの出力データは次式から計算される値とする。

$$\text{(出力データ)} = \text{(実測値)} - \text{(物理モデルの推定値)}$$

この式は次のようにスキン温度を推定することを表している。

$$\text{(推定値)} = \text{(物理モデルの推定値)} + \text{(PLS モデルの推定値)}$$

一方、入力データはオンラインで測定されるプロセス変数をそれぞれ平均 0 分散 1 に正規化したものとする。本研究では、Fig. 3.1 および Table 3.1 に示した

Table 3.2 Measured process variables as inputs of PLS model.

No.	variable
2	flow rate of naphtha
3	flow rate of diluent steam
4	temperature of bulk flow at exit of tube
5	temperature of bulk flow at entrance of tube
8	molecular weight of fuel gas
9	flow rate of fuel gas
10	flow rate of gas turbine exhaust
11	temperature of gas turbine exhaust
12	flow rate of air
13	atomospheric temperature
14	temperature of combustion gas at crossover chamber
17	flow rate of ethane

16 種のプロセス変数の中から、Table 3.2 に示す 12 変数を入力変数として用いることにした。ただし、エタン流量は Fig. 3.1 および Table 3.1 には示されていない。これは、エタンをナフサと混合して使用する炉は少数（3 炉）であり、エタンを全く使用しない炉が多い（12 炉）ためである。一方、PLS モデルの入力変数として用いない変数は、予備検討の段階で推定精度の向上に対する寄与が小さいと判断された変数である。

3.4.2 PLS モデルの構築

PLS モデルの出力変数は物理モデルによる推定誤差であるから、PLS モデルを構築する前に物理モデルによる推定を行わなければならない。そのためには、初日コーク層厚さを推定する必要がある。ところが、初日コーク層厚さを推定する際には、PLS モデルによる補正の効果も考慮に入れなければならない。そのためには、PLS モデルを構築しておく必要がある。すなわち、物理モデルと PLS モデ

ルは同時に構築されなければならない。そこで、本研究では、以下のような繰り返し計算による推定モデルの構築を試みた。

[推定モデルの構築手順]

1. 物理モデルによる推定誤差が最小となるように初日コーク層厚さを推定し、物理モデルによる推定誤差 T_e を計算する。

$$T_e = T_{skin} - T_{phys} \quad (3.38)$$

ここで、 T_{phys} は物理モデルの推定値である。

2. 物理モデルによる推定誤差 T_e を出力とする PLS モデルを構築する。
3. PLS モデルを用いてスキン温度測定値 T_{skin} を補正し、

$$T_r = T_{skin} - T_{pls} \quad (3.39)$$

補正後のスキン温度 T_r に対する物理モデルの推定誤差が最小となるように、初日コーク層厚さを推定し、物理モデルによる推定誤差 T_e を計算する。

$$T_e = T_{skin} - T_{phys} \quad (3.40)$$

4. 初日コーク層厚さの推定値が収束するまで、手順 2,3 を繰り返す。

今回用いたデータに対しては、4回の繰り返し計算で初日コーク層厚さの推定値が収束したと判断した。

PLS モデルを構築する場合、採用する潜在変数の数を適切に決定する必要がある。ここでは、下記の手順でクロスバリデーションを行い、採用する潜在変数の数を決定した。

[クロスバリデーション]

1. 合計 N 組の入出力データから、1 組のデータを取り除く。
2. 残りの N-1 組の入出力データを用いて、PLS モデルを構築する。1) で取り除いたデータを検証用データとして、その出力を PLS モデルを用いて推定し、推定誤差を求める。この操作をすべての潜在変数の数 (1 ~ 12) に対して行う。

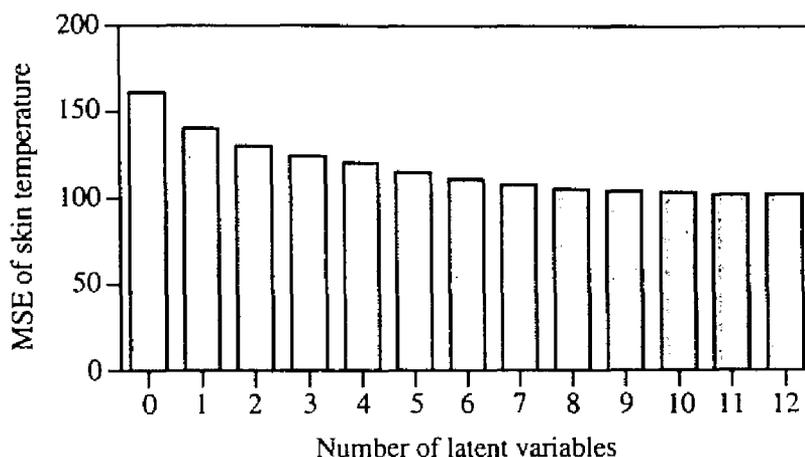


Fig. 3.7 Results of cross-validation. Mean Squared Error of estimates vs. number of latent variables.

3. 1, 2) の操作をすべての入出力データの組に対して繰り返し行い、各潜在変数の数に対して、推定誤差の二乗和を求める。
4. 推定誤差の二乗和が最小となる潜在変数の数を選択する。

繰り返し計算終了時のクロスバリデーションの結果を Fig. 3.7 に示す。なお、Fig. 3.7において、潜在変数の数がゼロであるとは、物理モデルのみによる推定であることを示している。Fig. 3.7 から、推定値の平均二乗誤差 (MSE) を最小にするという意味で最適な潜在変数の数は 12 であることがわかる。しかし、PLS モデルの入力変数には互いに強い相関を有する変数が含まれているため、潜在変数の数を必要以上に増やすとパラメータ推定値の精度が低下してしまう。また、モデル構築に使用していないランに対しても適切に機能する PLS モデルを構築するためには、データに含まれる本質的でない部分の影響を受けないようにする必要がある。以上の理由から、採用する潜在変数の数は少ない方が好ましい。このような観点から Fig. 3.7 に示す結果を検討すると、潜在変数の数が 8 より多い場合に推定精度の向上が顕著でないことから、採用する潜在変数の数としては 8 が適切であると判断される。この場合、PLS モデルを併用することにより、物理

Table 3.3 Results of PLS modelling

parameters in Eq. (3.41)	estimates	variable x_i in Eq. (3.41)
a_1	-0.5069	FR of naphtha
a_2	0.1675	FR of diluent steam
a_3	-0.5379	Temp. at exit of tube
a_4	-0.1614	Temp. at entrance of tube
a_5	-0.1370	MW of fuel gas
a_6	-0.5274	FR of fuel gas
a_7	0.6201	FR of GTE
a_8	0.4876	Temp. of GTE
a_9	1.3094	FR of air
a_{10}	-0.1794	atmospheric temp.
a_{11}	0.1339	Temp. at crossover chamber
a_{12}	-0.0634	FR of ethane

モデルのみの場合と比較して、MSE を評価基準とする推定精度が約 30%向上することがわかる。

PLS モデルは、最終的に次のような形で表される。

$$T_{pls}(t) = \left\{ \sum_{i=1}^{12} a_i \left(\frac{x_i(t) - \bar{x}_i}{\sigma_i} \right) \right\} \sigma_{T_e} + \bar{T}_e \quad (3.41)$$

ここで、 $T_{pls}(t)$ は PLS モデルの出力、すなわち物理モデルによる推定誤差の推定値であり、 x_i はオンラインで測定されるプロセス変数、 \bar{x}_i, σ_i はそれぞれ PLS モデルの構築時に用いた入力データの平均値および標準偏差、 \bar{T}_e, σ_{T_e} はモデル構築に用いた出力データの平均値および標準偏差である。また、 a_i は入出力データと採用する潜在変数の数から一意に決定されるパラメータであり、その推定結果と各パラメータに関連するプロセス変数を Table 3.3 にまとめた。Table 3.3 の結果から、物理モデルの補正に大きく寄与するプロセス変数は、ナフサ流量、反応管出口温度、燃料ガス流量、GTE 流量、燃焼空気流量などであることがわか

る。物理モデルと PLS モデルとを統合した場合のスキン温度推定値 T_{est} が

$$T_{est} = T_{phys} + T_{pls} \quad (3.42)$$

で与えられることを考慮すると、PLS モデルの結合係数の符号から、例えばナフサ流量が増加した場合には、物理モデルの推定値を低下させるように PLS モデルが機能することもわかる。この PLS モデルによる補正は、以下に示す理由で適切であると考えられる。

1. 対象としているナフサ分解炉では、ナフサ流量の増加に伴い反応管内流体の流速が上昇するため、反応管内流体温度およびスキン温度が低下することが知られている。
2. Fig. 3.6 の 70 日以降におけるナフサ流量の急激な増加に伴い、物理モデルによるスキン温度推定値が測定値よりも明らかに高くなっている。

一方、ガスタービン排ガス (GTE) 流量に着目すると、3.3.4 節において GTE 流量の急激な低下に伴いスキン温度が上昇することを指摘したにもかかわらず、PLS モデルによる補正は、GTE 流量が増加した場合にスキン温度推定値を上昇させる方向に働くことがわかる。この事実は構築した PLS モデルを否定するようにも見える。しかし、実際には、ナフサ分解炉に実装されている制御系の作用によって、GTE 流量と燃焼ガス (空気) 流量とは -0.83 程度の相関係数を持つ、すなわち GTE 流量と燃焼ガス (空気) 流量は逆向きに変動するため、この 2 変数に対する PLS モデルの補正効果を合わせると、GTE 流量が増加した場合にスキン温度推定値は低く修正される。

以上より、構築した PLS モデルは分解炉の特徴を非常に良く捉えており、物理モデルによる推定値を補正するのに有効であると判断できる。

物理モデルと PLS モデルとの統合モデルによる、スキン温度のオンライン推定手順は以下ようになる。

[オンライン推定手順]

1. Eq. (3.42) で計算されるスキン温度推定値と運転初期のスキン温度測定値との誤差の二乗和が最小となるように、非線形最小二乗法を用いて、運転初日コーク層厚さ $d(1)$ を推定する。

2. スキン温度をオンラインで測定されるプロセスデータから推定する。

3.4.3 推定システムの検証

開発したスキン温度推定システムを、モデリングには利用していない実操作データ (Run 3) に対して適用した結果を Fig. 3.8 に示す。PLS モデルを導入した結果、30 ~ 35 日における GTE 流量の急激な変動に伴うスキン温度の変化を、完璧に表現できるようになった。ラン後半で推定誤差が大きくなっているが、推定誤差は最大で 20 °C 程度であり、運転開始直後の 2 回のスキン温度測定値しか利用していないことを考慮すると、十分満足できる結果である。さらに、他の炉およびランにおける実操作データに対しても良好な推定結果を得た。以上より、本研究で対象としたナフサ分解炉のスキン温度推定に対して、物理モデルと PLS モデルとの統合は非常に有効な手段であることが示された。

3.5 結言

ナフサ分解炉のスキン温度を推定するために、1) 物理モデルの構築、2) 物理モデルでは表現しきれないスキン温度の挙動 (推定誤差) を表現するための統計モデルの構築、という 2 段階からなるモデリング手法を提案した。

物理モデルの構築に際しては、その目的がスキン温度の推定であることから、極めて詳細な反応モデルは採用せず、コーク成長速度モデルと伝熱モデルとからなる簡易モデルを導出した。この簡易な物理モデルを利用することにより、数少ない実測データに基づいて、高い精度でスキン温度を推定することが可能となった。ただし、運転状態が大きく変化する場合には、スキン温度の変化を物理モデルだけでは表現しきれないことが確認された。

物理モデルによる推定値を補正する目的で、統計モデルを構築した。ここで対象としたナフサ分解炉では、複数の制御系の影響により、プロセス変数が互いに高い相関を有する。このような状況下で採取されるデータに対して、通常の最小二乗法を適用すると、パラメータ推定値の分散が大きくなるという問題が生じる。この問題は多重共線性と呼ばれているが、本研究では、PLS を利用することによ

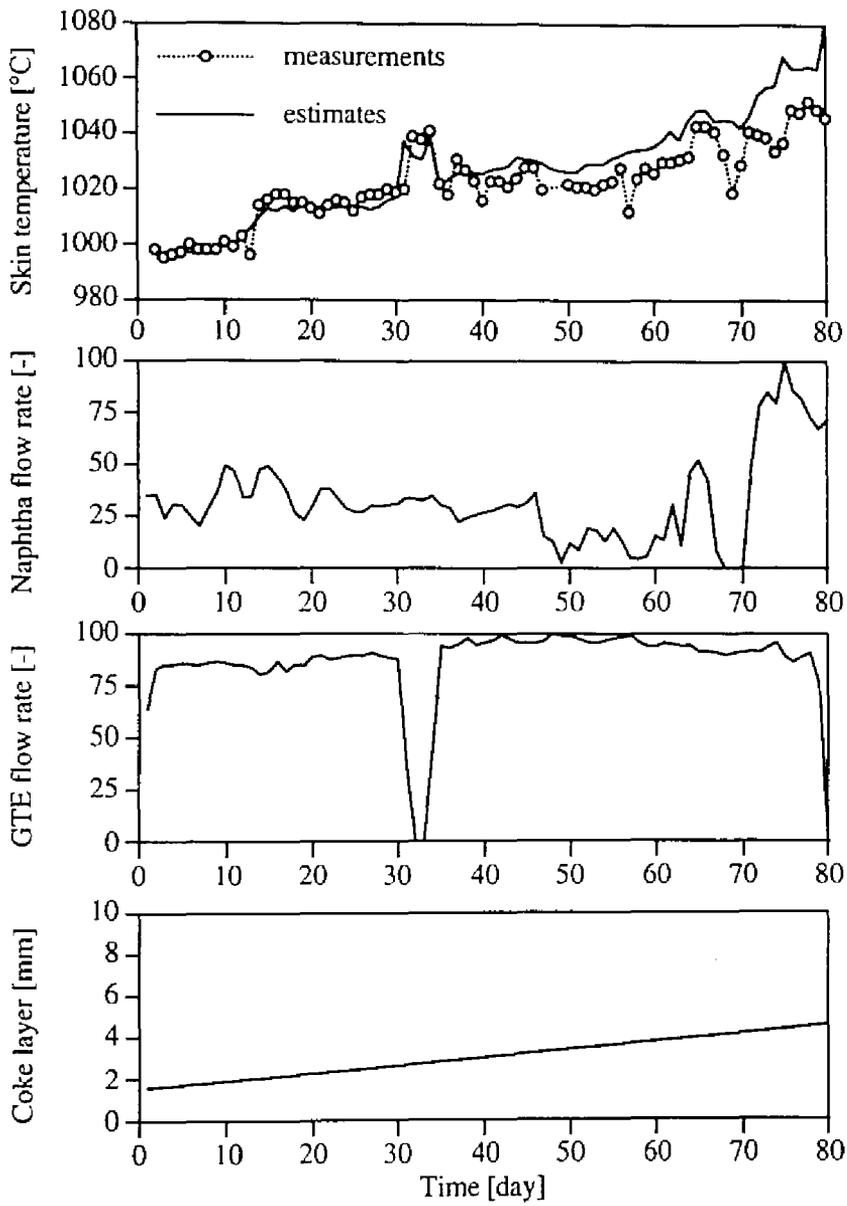


Fig. 3.8 Estimation result of skin temperature using physical and PLS model (Run 3).

り、この問題を回避することができた。

構築した推定モデルを実操業データに適用し、その有効性を確認した。このような2段階からなるモデリングを行うことによって、物理モデルと統計モデルの長所を併せ持ち、より広範な運転状態に対して適用可能なモデルの構築が可能となる。

3.6 記号説明

Symbols

a_i	parameter	
C_i	parameter	
C_p	heat capacity at constant pressure	$[\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$
D	effective inside diameter of the tube	$[\text{m}]$
D_c	diffusivity of coke precursor in bulk fluid	$[\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}]$
D_i	inside diameter of the tube	$[\text{m}]$
D_o	outside diameter of the tube	$[\text{m}]$
d	coke layer thickness	$[\text{m}]$
f	Fanning's friction factor	$[-]$
h	heat transfer coefficient of gas film	$[\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}]$
j_d	j-factor	$[-]$
K_i	parameter	
K_m	mass transfer coefficient	$[\text{kmol}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}]$
K_r	reaction velocity constant	$[\text{m}^3\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}]$
k	thermal conductivity	$[\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$
k_c	thermal conductivity of coke	$[\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$
k_p	thermal conductivity of bulk fluid	$[\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$
k_w	thermal conductivity of the tube	$[\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$
M_w	fluid molecular weight	$[\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}]$

Pr	Prandtl number	[-]
P_t	total pressure	[Pa]
q	rate of heat flow	[J·s ⁻¹]
q_r	energy flux	[J·m ⁻² ·s ⁻¹]
q_w	energy flux at the tube wall	[J·m ⁻² ·s ⁻¹]
R	gas constant	[J·kmol ⁻¹ ·K ⁻¹]
R_c	rate of coking formation	[kmol·m ⁻² ·s ⁻¹]
Re	Reynolds number	[-]
R_m	molar rate of mass transfer	[kmol·m ⁻² ·s ⁻¹]
R_r	chemical reaction rate	[kmol·m ⁻² ·s ⁻¹]
r	radial distance in cylindrical coordinate	[m]
Sc	Schmidt number	[-]
Sh	Sherwood number	[-]
T	temperature at the inside of the tube	[K]
T_c	estimation error of skin temperature using physical model	[K]
\bar{T}_c	mean of T_c	[K]
T_{est}	estimated skin temperature using physical and PLS models	[K]
T_p	temperature of bulk flow	[K]
T_{phys}	estimated skin temperature using physical model	[K]
T_{pls}	output of PLS model	[K]
T_{skin}	measured skin temperature	[K]
t	time	[day]
v	mean velocity of bulk flow	[m·s ⁻¹]
W_f	mass flow rate of bulk flow	[kg·s ⁻¹]
W_n	mass flow rate of naphtha	[kg·s ⁻¹]
x_i	input variable of PLS model	
\bar{x}_i	mean of x_i	
y_c	mole fraction of coke precursor in bulk fluid	[-]
y_{ci}	mole fraction of coke precursor at tube-wall	[-]

Greek Characters

α	parameter	
β	parameter	
ΔT_c	temperature drop at coke layer	[K]
ΔT_g	temperature drop at gas film	[K]
ΔT_w	temperature drop at the tube-wall	[K]
μ	viscosity	[Pa·s]
π	3.14159...	
ρ	density	[kg·m ⁻³]
σ_i	standard deviation of x_i	
σ_{T_c}	standard deviation of T_c	[K]

3.7 引用文献

1. "Ethylene — C-E LUMMUS", *Hydrocarbon Processing*, **60**, 11, 155 (1981)
2. 化学工学協会編, "化学プロセス集成", 481-485, 東京化学同人 (1970)
3. 化学工学協会編, "化学工学便覧 (改訂五版)", 1035-1041, 丸善 (1988)
4. 化学工学協会編, "化学工学便覧 (改訂五版)", 194-196, 丸善 (1988)
5. Goossens, A.G., M. Dente, and E. Ranzi, "Improve steam cracker operation", *Hydrocarbon Processing*, **57**, 9, 227-236 (1978)
6. Ohshima, M., H. Nakagawa, I. Hashimoto, U. Ohkamo, G. Suzuki, and Y. Kawabata, "On-line inference of tube-wall temperature in an industrial olefin pyrolysis plant", *J. Proc. Cont.*, **6**, 5, 309-315 (1996)
7. Solomon, S.M., "Developments in olefins production technology", *Inst. Chem. Eng. Symp. Ser.*, **50**, 99-120 (1977)
8. 水科篤郎, 荻野文丸, "輸送現象", 160, 産業図書 (1981)

9. 水科篤郎, 荻野文丸, “輸送現象”, 253, 産業図書 (1981)
10. 亀井三郎, “化学機械の理論と計算”, 94, 産業図書 (1975)

第4章

多成分蒸留塔における製品組成の推定制御

4.1 緒言

蒸留塔の運転目的は仕様を満たす純度の製品を得ることである。この目的を実現するためには、製品組成の測定値に基づいてフィードバック制御を行えばよい。しかし、現実には、製品組成の測定値が直接制御量として利用されることは希である。この理由として、ガスクロマトグラフに代表されるオンライン分析機器の設備費およびメンテナンス費が高いことが挙げられる。しかし、オンライン制御を実現する上で、さらに問題となるのは、サンプリング間隔の長さである。ガスクロマトグラフを利用する場合、サンプルを採取してから分析結果が出力されるまでに10分程度の時間を要する。この遅れのために、ガスクロマトグラフを用いる組成制御では、制御性能の低下を避けることができない。近年、近赤外線を利用した分析機器が様々な分野で普及しており、製品組成のオンライン測定も可能な状況になっている。近赤外分析装置のサンプリング間隔は20秒程度であり、その遅れはほとんど問題にならない。しかし、費用面での問題は依然として残る。

分析機器を用いたオンライン分析制御に代わる製品組成の制御方法として、これまでに様々な方法が提案されている。中でも、最も広く普及しているのは、製品組成の代わりに塔内のある段（箇所）の温度を制御する、いわゆる塔内温度制

御であろう。例えば、定圧で運転されている2成分蒸留塔を対象とする場合、塔内温度は塔内組成と1対1に対応するため、製品組成を制御する代わりに塔端の温度を制御すればよい。しかし、塔内圧力が変化する場合や、多成分系を対象とする場合には、たとえ塔内温度を完全に設定値に保持できたとしても、製品組成はその設定値からずれてしまう。このような問題を解決するために、圧力測定値による温度補正、塔内温度差の利用、塔内温度平均値の利用など、オンラインで測定可能な複数のプロセス変数を利用する制御手法が数多く提案され、実用化されている^[1]。

塔内温度制御などの制御手法は、温度や圧力などから計算される製品組成の推定値を制御する手法であるとみなすことにより、すべて推定制御の範疇に属するものであると捉えることができる。このように考えると、各手法の制御性能の差は推定精度の差に起因するものであり、結局、精度の高い製品組成推定モデルを構築できるかどうか成功の鍵となる。

製品組成を推定するための最も堅実な方法は、物理モデルを利用する方法であろう。オンラインで使用するために許容される範囲の計算時間で、十分な精度の計算結果を出力できるような物理モデルが利用可能であるならば、物理モデルを利用すべきである。しかし、多くの化学プロセスでは、プロセスが本来有する複雑さのために、詳細な物理モデルを得ることが困難な場合が多い。近年のシミュレーション技術の進歩により、様々な化学プロセスを精密にシミュレートできるようになってきてはいるが、実プラントの動的な挙動を忠実に表現できるようにシミュレータを調整するためには多大な労力を要する。蒸留塔も例外ではなく、物理モデルの利用が困難な場合には、オンライン組成制御を実現するために、運転データに基づく統計モデルを利用する必要がある。

運転データから統計モデルを構築する場合、最小二乗法による線形回帰モデルの構築が最も一般的な手法であろう。この方法では、製品組成の実測値と推定値の二乗誤差が最小となるように線形回帰モデルを構築する。この際、入力変数が互いに線形独立であることが前提となる。しかし、化学プロセスにおいては、非常に多くの変数が測定されており、しかもその中に相互相関の高い変数が含まれている場合が多い。蒸留塔を例にとると、還流量の増加やリボイラー熱負荷の減少は塔内温度を低下させる方向に働く。このため、複数の塔内温度を測定してい

る場合には、塔内温度と操作量との間は無論のこと、隣接する塔内温度の間にも強い相関関係が存在する。このような相関の高い変数を入力変数として最小二乗法を適用すると、モデルのパラメータ推定値の分散が非常に大きくなる、すなわち僅かに異なるデータを用いてモデルを構築した場合に非常に異なるパラメータ推定値が得られてしまうという問題が生じる。これがいわゆる多重共線性の問題である。

パラメータ推定値の分散が大きくなる原因は、データ行列の共分散行列が特異行列に近くなる（悪条件になる）ことにある。このような状況下で構築したモデルは、一般に、モデル構築用データに対しては非常に良く適合するが、別のデータに対しては予測誤差が大きくなるという特徴を有する。これは over-fitting あるいは over-parametrization と呼ばれる現象である。

over-parametrization は自己回帰モデルなどに代表される時系列モデルを構築する際にも問題となる。この問題を避けて、予測精度の高いモデルを構築するためには、パラメータ数を可能な限り減らし、低次のモデルを構築する必要がある。この単純な原則はケチの原理という名で広く知られており、最適な次数を決定するための定量的な指標として、赤池情報量基準 (AIC) や最終予測誤差 (FPE) 基準がある^[2]。

先に述べたように、蒸留塔で測定される変数は互いに高い相関を有するものが多い。このため、組成推定モデルを構築する際には、多重共線性が問題となる。この問題を回避する最も簡単な方法は、相関がゼロに近い少数の入力変数に基づいてモデルを構築する方法である。入力変数の選択方法に関する研究は数多くの研究者によって手掛けられている。例えば、Brosilow らは、モデル化誤差に対する感度の指標となる条件数を小さくすると同時に推定誤差を小さくする入力変数を選択する方法を提案している^[3,4]。また、Keller と Bonvin は、対象を蒸留塔に限定せず、標準化されたモードとの関係が強い入力変数を採用し、弱い入力変数を除去するという方法を提案している^[5]。これらの方法の共通点は、特異値分解を利用していることである。

少数の互いに独立なプロセス変数を推定モデルの入力変数として選択することにより、多重共線性の問題を回避することはできる。しかし、測定されているプロセス変数は互いに高い相関を有するとしても、それぞれに固有の情報も備えて

いるはずである。したがって、入力変数の数を減らすことで、推定精度の向上に役立つ情報を切り捨ててしまう可能性がある。このような観点からは、推定モデルを構築する際にできるだけ多くの入力変数を利用すべきであり、このために、高い相関を持つ入力変数を取り扱うことのできる統計的手法が必要になる。このような優れた特徴を備えた多変量解析手法の1つが PLS である。

本章では、統計モデルを便宜上次の3種類に分類する。

定常状態モデル：定常状態データに基づくモデル。

静的モデル：時系列データに基づくモデルであるが、過去のデータを利用しない（動特性を考慮しない）。

動的モデル：時系列データに基づくモデルであり、過去のデータも利用する（動特性を考慮する）。

蒸留塔製品組成の推定に PLS を適用した従来の研究には、定常状態 PLS モデルの構築に関するものが多い^[6-10]。Fujii らは、PLS による組成推定モデルの実プラントへの適用について報告しているが、動特性は無視できると仮定しており、静的モデルの適用についてのみ検討している^[11]。しかしながら、外乱の影響が大きい場合や、操作条件の変更がある場合には、プロセスの動特性を無視した定常状態モデルあるいは静的モデルでは十分ではないと考えられる。

本研究では、多成分蒸留塔を対象に、塔内温度やその他のオンライン測定可能なプロセス変数から、塔頂および塔底製品組成を推定できる動的 PLS モデルを構築する。モデル構築に際して問題となる、塔内温度以外のプロセス変数（還流量、リボイラー熱負荷、リボイラー圧力）を入力変数として利用することの効果、温度測定段数やサンプリング間隔が推定精度に及ぼす影響などについても検討する。さらに、モデル構築用データの性質が推定モデルの精度に大きな影響を及ぼすことを指摘し、構築した推定モデルに基づく組成推定制御系の設計方法を示す。

4.2 蒸留塔組成推定制御に関する従来の研究

本節では、これまでに提案されている蒸留塔製品組成推定制御手法について簡単に説明する。まず、塔内温度制御に代表される、陽には組成推定を行わない制

御手法について、続いて、組成推定モデルに基づく制御手法について述べる。なお、組成推定モデルの中から、特に Brosilow 推定器と PLS 推定器を取り上げることにする。

4.2.1 塔内温度制御

オンライン分析制御に代わる制御手法として、最も広く普及しているのは、製品組成の代わりに塔内のある段（箇所）の温度を制御する、いわゆる塔内温度制御であろう。この場合、塔頂製品と塔底製品の相対的な重要さによって、温度制御段の位置が決定される。すなわち、留出液組成が重要である場合には濃縮部に温度制御段を配置し、逆に、缶出液組成が重要である場合には回収部に温度制御段を配置する^[1]。濃縮部および回収部の双方に温度制御段を設け、2つの温度を同時に制御する場合もあるが、制御ループ間の干渉による制御系の不安定化を避けるために、一方の温度のみを制御する場合が多い^[12]。

塔内温度制御を行う場合、温度制御段を適切に選択することが極めて重要である。定圧で運転されている2成分蒸留塔を対象とする場合、製品流れの温度は製品組成と原則として1対1に対応するため、塔端の温度を制御すればよい。しかし、高純度蒸留塔では、塔端の温度変化は非常に小さいため、測定ノイズの影響と本来の温度変化とを区別できない可能性がある。さらに、多成分系では、塔端に近づくほど高沸あるいは低沸の非鍵成分が多く存在するため、塔端の温度は非鍵成分の影響を受けやすい。そこで、測定ノイズや非鍵成分の影響を抑制するために、温度変化が比較的大きく、かつ非鍵成分が少ない塔中央に近い段を温度制御段として選択することが推奨されている^[13]。

製品組成に対する感度が高い温度制御段を選択するために、定常状態での塔内温度プロファイルを描き、温度勾配の大きな領域から温度制御段を選択するという簡単な方法がある。一方、制御段の温度は操作量に対する感度が高くなければならないことから、操作量に対する感度が最大となる段を選択する方法も広く利用されている。Tolliver と McCune は、留出液組成を制御する目的で、留出液流量 D と原料流量 F の比 D/F に対する塔内温度の感度を解析し、 D/F に対する感度が高くかつ線形性の強い（対称に変化する）段を選択する方法を提案してい

る^[14]。さらに、制御の主要な目的の1つは外乱抑制であるから、定常状態において外乱の影響が製品組成に最も現れにくくなるように、温度制御段を選択する必要もある。Wood は定常状態シミュレーションを利用して、原料外乱に対する製品組成の変化を最小にする温度制御段の選択方法を提案している^[15]。

塔頂あるいは塔底製品組成のいずれか一方を制御する場合には、上記のように、外乱や操作量に対する感度が最大となる段を温度制御段として選択すればよい。しかし、双方の製品組成を同時に制御する場合には、感度のみを評価関数とすると、通常、塔中央部から2つの温度制御段が選択され、制御ループ間の干渉が強くなってしまう。そこで、Mooreらは、感度を高くすることと干渉を弱くすることとの妥協点を探る方法として、定常ゲイン行列の左特異ベクトルを利用する方法を提案している^[16]。さらに彼らは、特異値が感度を、条件数が干渉の程度を表すことに着目して、最小特異値と条件数の比として定義される‘intersivity’を指標として用いる方法を提案している。すなわち、すべての組み合わせに対して‘intersivity’を計算し、その値が最大となる配置を最適であると判断する。

上記の手法はいずれも、定常特性に着目したものであるが、温度制御段は、外乱および操作変数に対する応答が速くなければならない。外乱が付加される位置あるいは操作端に最も近い温度センサーが最も速く応答すると一般に考えられているが、これは必ずしも正しくない。Tolliver と McCune は、 D/F の変化に対する塔内温度のステップ応答から時定数を計算し、定常状態での変動が最も大きくかつ対称的な段の温度が、最も速くかつ線形な動特性を示すこと、および塔端に近い段ほど非線形性が強くなることを確認した^[14]。

塔内温度制御では、製品組成は次の線形モデルを用いて推定できることが前提となっている。

$$x = a_0 + a_1 T \quad (4.1)$$

ここで、 x は留出液中の重質鍵成分組成あるいは缶出液中の軽質鍵成分組成、 T は塔内温度、 a_0, a_1 は定数である。蒸留塔の非線形性が無視できない場合には、非線形性を除去する方法として、製品組成の対数変換がよく利用される^[4,9,17,18]。この場合、推定モデルは

$$\ln x = a_0 + a_1 T \quad (4.2)$$

で与えられる。また、制御量である塔内温度と操作量である炊き上げ蒸気流量との間の非線形性を取り扱うために、コントローラゲインを適応的に変化させる方法も提案されている^[19]。

いずれにせよ、塔内温度制御では、塔内のある1箇所の温度のみから製品組成が推定できることが前提となっている。このため、塔内圧力が変動する場合や、原料条件が変動する場合、さらには操作条件の変更などにより塔他端の製品組成が変化する場合には、たとえ塔内温度が完全に設定値に保持できたとしても、製品組成はその設定値からずれてしまう。

4.2.2 複数の塔内温度を利用した制御

圧力変動の影響を補償する方法として、塔内の2点の温度を測定し、その温度差を制御する方法がある。通常は、塔端と中央よりの段の温度が利用される^[15]。Whitehead と Panis は、脱メタン塔および脱エタン塔に対する、塔内温度制御および温度差制御の適用事例を報告している^[20]。さらに彼らは、複数の塔内温度の荷重平均値を制御量とすることによって、外乱が製品組成に影響を与える前に、その外乱を検出・補償できることを示した。温度の荷重平均値を求めるに際して、各段の温度を留出液温度からの差として定義することにより、圧力補償も行われている。

絶対圧力の変化のみならず、塔内の液あるいは蒸気流量の変動に伴う圧力損失の変化をも補償する方法として、塔内温度の二階差分を利用する方法も提案されている^[21,22]。

Luyben は、複数の塔内温度を測定することにより、塔内温度が急激に変化する領域（‘temperature break’）を見付けだし、その領域を塔内の適切な位置に保持する制御方法を提案している^[23]。後に Bozenhardt は、アルコール／水／エーテル系共沸蒸留塔を運転するに際して、塔内組成プロファイルの制御が極めて重要であることを指摘し、‘temperature break’を塔内の適切な位置に保持するために、計8段における塔内温度測定値の差を求め、その温度差が最大となる領域が目標とする位置に一致するように制御を行っている^[24]。

4.2.3 Brosilow 推定器

Brosilow らは、ある定常点近傍を表現可能なプロセスの定常状態線形モデルから、組成推定器を導出した^[3,4]。

まず、次のような線形モデルを考える。

$$y = G_u u + G_d d \quad (4.3)$$

$$x = F_u u + F_d d \quad (4.4)$$

ここで、 y は測定される出力、 x は推定すべき製品組成、 u は操作量および測定される外乱、 d は測定されない外乱である。

Eq. (4.3) において、出力 y および操作量 u は測定されており、行列 G_u および G_d はモデルとして与えられているのであるから、出力 y と外乱 d の数が等しく、かつ G_d^{-1} が存在する場合には、次式から外乱の推定値 \hat{d} を求めることができる^[9]。

$$\hat{d} = G_d^{-1}(y - G_u u) \quad (4.5)$$

外乱の数が出力の数よりも少ないような、より一般的な場合に対応するためには、最小二乗法を用いて外乱 d を推定すればよい^[9]。この場合、外乱の推定値 \hat{d} は次式で与えられる。

$$\hat{d} = (G_d^T G_d)^{-1} G_d^T (y - G_u u) \quad (4.6)$$

さらに一般的には、すなわち $G_d^T G_d$ の逆行列が存在しないような場合にも対応するためには、疑似逆行列を用いればよい。 G_d の疑似逆行列を G_d^+ とすれば、 \hat{d} は次式で与えられる^[26,27]。

$$\hat{d} = G_d^+(y - G_u u) \quad (4.7)$$

なお、疑似逆行列を用いた Eq. (4.7) は、Eqs. (4.5), (4.6) を一般化したものである。

最小二乗法を用いる場合には、行列 G_d の条件数に注意しなければならない。条件数が非常に大きく、無視できない数値誤差を生じる可能性がある場合には、

この多重共線性の問題を回避するために、行列 G_d のゼロに近い特異値をゼロとみなして疑似逆行列 G_d^+ を求めるなどの工夫が必要になる^[25]。

得られた外乱の推定値を用いることにより、すなわち、Eqs. (4.4), (4.7) から、製品組成の推定値 \hat{x} を得ることができる。

$$\begin{aligned}\hat{x} &= F_u u + F_d \hat{d} \\ &= F_d G_d^+ y + (F_u - F_d G_d^+ G_u) u\end{aligned}\quad (4.8)$$

これが Brosilow 推定器である。

この推定器は定常状態推定器であり、プロセスの動特性は考慮されていない。Brosilow と Tong は、この推定器を推定制御に利用するための動的補償について述べている^[28]。そこで提案されている動的補償は、プロセスの動特性を一次遅れに限定しているため、最適なものではない。ところが、より複雑な構造を有する最適な推定器と大差ない精度で組成推定が可能であると報告されている^[29]。

Mejdell と Skogestad は、定常状態 Brosilow 推定器、カルマンフィルタ、および定常状態 PCR 推定器とを比較し、悪条件のプラントを対象とする場合、Brosilow 推定器がモデル化誤差の影響を受けやすいことを指摘している^[25]。

4.2.4 PLS 推定器

蒸留塔においては、製品組成以外に、温度、圧力、流量など実に多くの変数が測定されている。ところが、物質収支や熱収支、さらには気液平衡関係などの物理的な等号制約条件によってすべての変数は関連づけられており、真に独立な変数の数は少ない。実際、原料条件が一定であるとすれば、典型的な蒸留塔の自由度は3程度である。したがって、従来の最小二乗法を用いて組成推定モデルを構築しようとするなら、多重共線性の問題を回避するために、少数の独立な変数を入力変数として選択せざるをえない。しかし、測定変数が互いに高い相関を有するとしても、それぞれに固有の情報も備えているはずである。したがって、入力変数の数を減らすことで、推定精度の向上に役立つ情報を切り捨ててしまう可能性がある。このような観点からは、推定モデルを構築する際にできるだけ多くの入力変数を利用すべきであり、そのために、高い相関を持つ入力変数を取り扱う

ことのできる統計的手法が必要になる。このような優れた特徴を備えた多変量解析手法の1つがPLSである。

蒸留塔製品組成の推定にPLSを適用した従来の研究では、多重共線性を取り扱うことができるというPLSの優れた特徴を利用して、すべての段の温度を利用したものが多い。全段の温度を利用することにより、入力変数の選択という重大な問題を回避できる。さらに、測定ノイズの影響を軽減することができると共に、あるセンサーが故障したような場合に、正常に測定されているデータから欠損データをより適切に補完することもできる^[9]。

すべての塔内温度を用いる場合、次に検討すべき事柄は、圧力や流量などを入力変数とするべきか否かである。Krestaらは、塔内温度に加えて、操作量であるリボイラー熱負荷と留出液流量、主要な外乱として系に付加される原料流量を入力変数とした^[8,9]。一方、MejdellとSkogestadは、

1. 流量を入力変数として利用しても、定常状態における製品組成の推定精度がそれほど改善されなかった。
2. 流量を入力変数として利用すると、動的な製品組成の推定精度が低下した。

という2つの結果に基づいて、流量を入力変数に組み込まなかった^[6,7]。

蒸留塔の定常状態が少数の独立変数で表現可能なことを考慮すると、結果1は極めて当然と言える。実際、MejdellとSkogestadの例では、計41段の温度が入力変数として利用されており^[9]、それらの変数は蒸留塔の定常状態を規定するのに十分な情報を有していると考えられる。なお、圧力変化を考慮していない2成分蒸留塔を主な対象としている点にも注意しておかなければならない。このような蒸留塔では、圧力変動を伴う多成分蒸留塔に比べて、真に独立な変数の数は少なくなる。したがって、より一般的な蒸留塔を対象とする際には、圧力や流量などの変数を用いることにより、推定精度が大幅に改善される可能性もある。

一方、結果2に関しては、定常状態データから構築した推定モデルを動的な運転状況での推定に利用できるかどうかを考える必要がある。Brosilowらは、あたかも複数の定常状態を通して運転しているかのように、運転状態が緩やかに変化するプロセスに対しては、定常状態推定器が動的にも良い推定値を与えると主張している^[3,4]。しかし、動的な運転状況での推定、特に運転状態が比較的激しく変

化するような場合の推定においては、動的補償を施した推定器が定常状態推定器よりも優れている^[28]。このような観点から、結果 2 は、定常状態モデルを利用していることに起因するものと考えられる。操作量などを入力変数に組み込んだ定常状態 PLS モデルを構築すると、操作量が組成推定に大きく寄与していることがわかる^[8,9]。ところが、動的な運転状況、特にフィードバック制御が行われている状況では、操作量は制御量に基づいてコントローラが与えるものであるため、操作量と製品組成との関係は定常状態における関係とは全く異なったものになる。したがって、定常状態推定器を動的な運転状況に適用する場合には、操作量に関する情報は推定精度を低下させてしまう恐れがある。

以上の考察から、プロセスの動特性を考慮した推定器の構築が重要であると結論づけることができる。ところが、従来の研究には、定常状態 PLS モデルの構築に関するものが多い。本研究では、動的 PLS モデルの構築に焦点を当て、入力変数の選択など広範な問題を取り扱う。

4.3 問題設定

本節では、対象とする多成分連続蒸留塔の設定およびシミュレーションの設定について述べる。

4.3.1 蒸留塔の設定

今回対象とした蒸留塔の概略図を Fig. 4.1 に示す。リボイラーと還流槽を含めて全 30 段（理論段）の塔である。原料はメタノール、エタノール、プロパノールおよびブタノールを等モル含有し、 128kmol/h ($1.15 \times 10^5\text{Pa}$, 358K) で、第 15 段（還流槽を第 1 段とする）に供給される。製品組成の設定値は、塔頂プロパノールモル分率と塔底エタノールモル分率がともに 0.0010 とする。シミュレーションには、物質収支および熱収支を考慮した詳細モデルを用いており、各段での流れの動特性は Francis の堰方程式に従うとする。塔内圧力に関しては、全縮器内の圧力が $1.013 \times 10^5\text{Pa}$ で正確に保たれていると仮定し、各段の圧力損失は蒸気流量に依存するものとする。基準となる定常状態の設定条件を Table 4.1 に

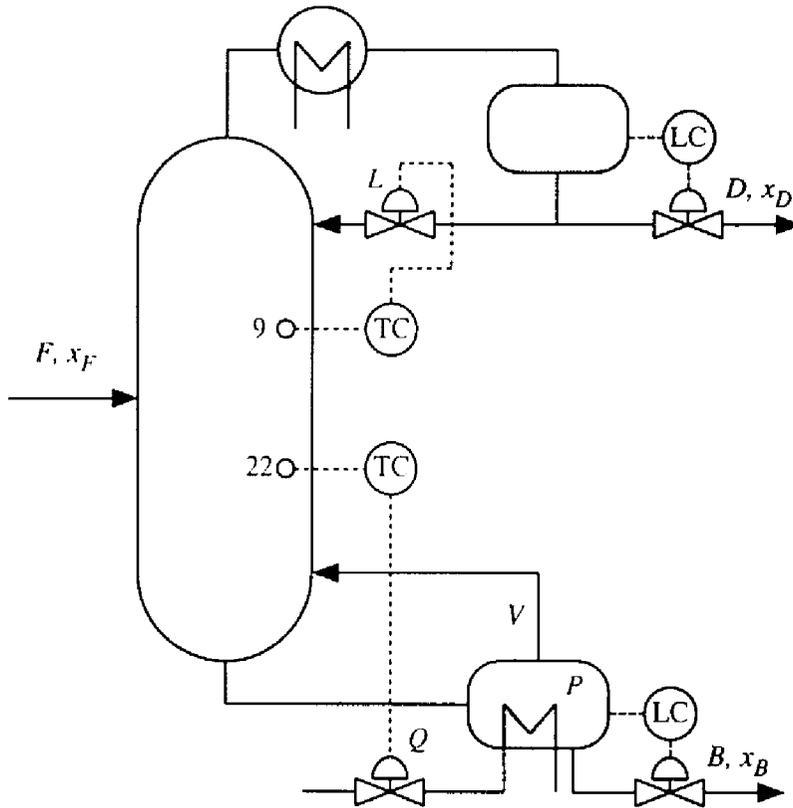


Fig. 4.1 Schematic diagram of the example column.

Table 4.1 Base steady-state condition for the example distillation column.

Feed		
F	128.00	kmol/h
T	358.15	K
P	1.150×10^5	Pa
x_F	0.25/0.25/0.25/0.25	
Reflux Drum		
L	110.66 (5.899)	kmol/h (m^3/h)
D	64.00 (3.112)	kmol/h (m^3/h)
T	343.77	K
P	1.013×10^5	Pa
$x_D^{(PrOH)}$	0.0010	-
Reboiler		
V	160.26	kmol/h
B	64.00 (5.965)	kmol/h (m^3/h)
Q	6.755	GJ/h
T	386.47	K
P	1.332×10^5	Pa
$x_B^{(EtOH)}$	0.0010	-

示す。

外乱としては原料の組成と流量の変動を想定し、このような外乱の存在下で製品組成をその設定値付近に保持するために、塔頂と塔底の双方において温度制御を行う。制御量は第9段と第22段の温度であり、操作量はそれぞれ還流量、リボイラー熱負荷である。温度制御に利用する段は運転状態に対する感度が高いところを選択した。具体的には、還流量およびリボイラー熱負荷を変化させた場合に、温度の変動量が最大となる段を選択した。なお、温度制御にはPI制御を用いる。チューニングに際しては、積分時間を0.5hに固定し、比例ゲインを試行錯誤により調整した。

また、還流槽とリボイラーの液レベルは、それぞれ留出液流量、缶出液流量によって制御する。ここでもPI制御を用いるものとし、二項係数標準型規範モデルに基づくモデルマッチング法^[30]を用いてチューニングを行った。

塔内温度や圧力などのプロセス変数は1分間隔で測定されているものとする。一方、塔頂プロパノールモル分率および塔底エタノールモル分率は10分間隔で測定されているものとする。

4.3.2 ダイナミックシミュレーションの設定

組成推定モデル構築用時系列データを作成するために、以下の条件でダイナミックシミュレーションを行った。まず、外乱として原料流量の変化を考慮するために、原料流量を2時間毎にステップ状に定常値の $\pm 10\%$ 変化させた。ただし、変化幅は最大で定常値の $\pm 20\%$ とした。さらに、外乱として原料組成を変化させるために、原料の各成分流量がランダムに変動（定常値の最大 $\pm 10\%$ の範囲内で徐々に増減）するようにした。シミュレーション時間は計20時間とした。原料流量および各成分流量をFig. 4.2に、還流量、リボイラー熱負荷、リボイラー圧力をFig. 4.3に、塔内温度をFig. 4.4に、さらに留出液流量と缶出液流量をFig. 4.5に示す。

構築した組成推定モデルを評価するために、以下のような設定でモデル検証用時系列データを作成した。基本的なダイナミックシミュレーションの設定はモデル構築用データ作成時と同一であり、各成分流量のランダムな変動を決定する乱

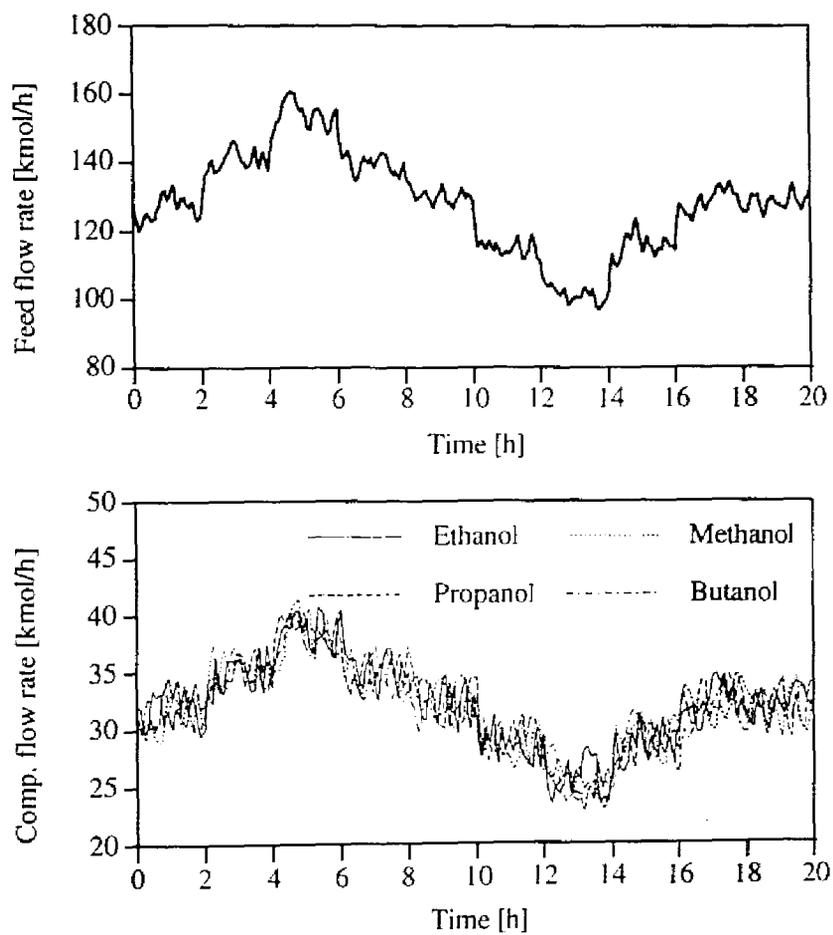


Fig. 4.2 Time series data for modeling (1). Total feed and each component flow rate.

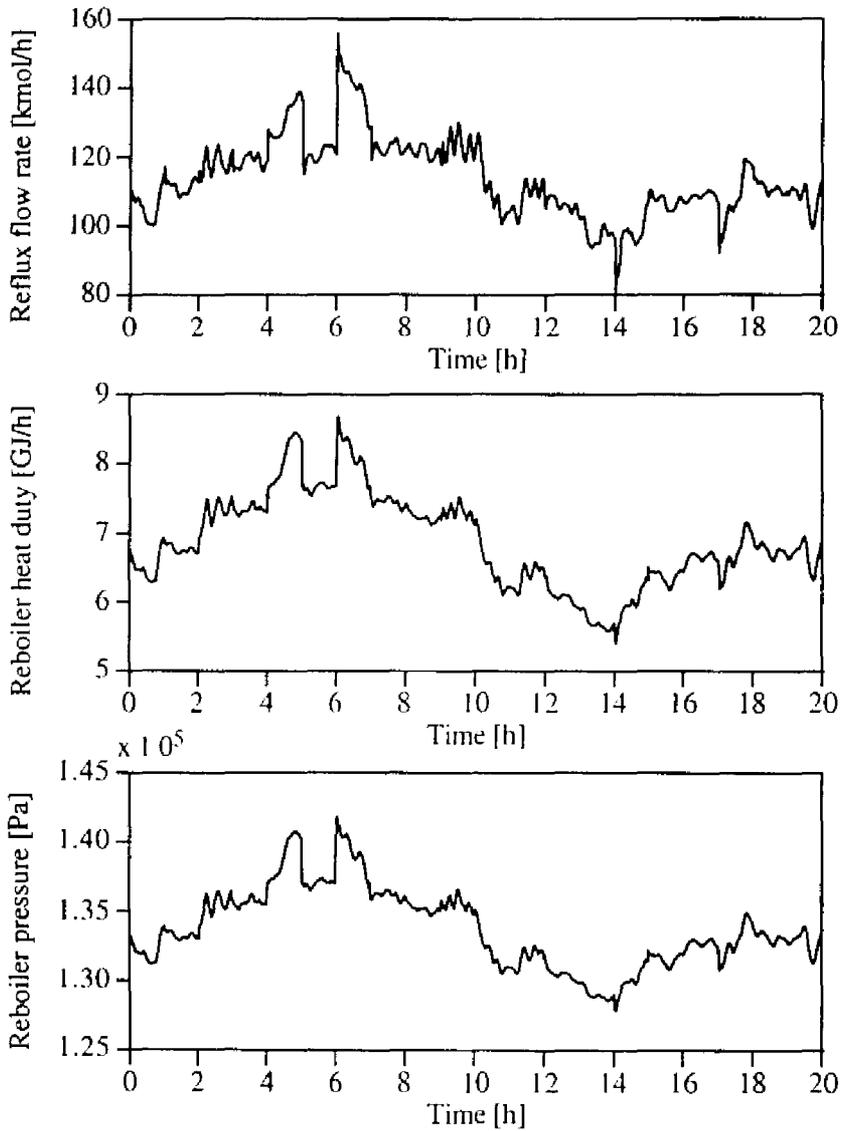


Fig. 4.3 Time series data for modeling (2). Reflux flow rate, reboiler heat duty, and reboiler pressure.

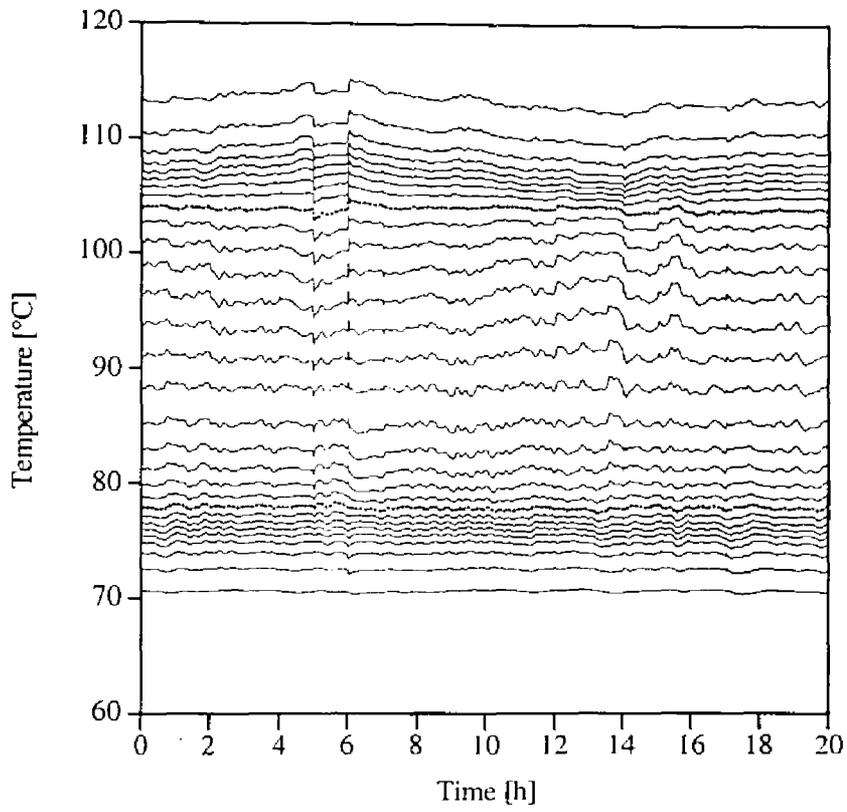


Fig. 4.4 Time series data for modeling (3). All tray temperatures.

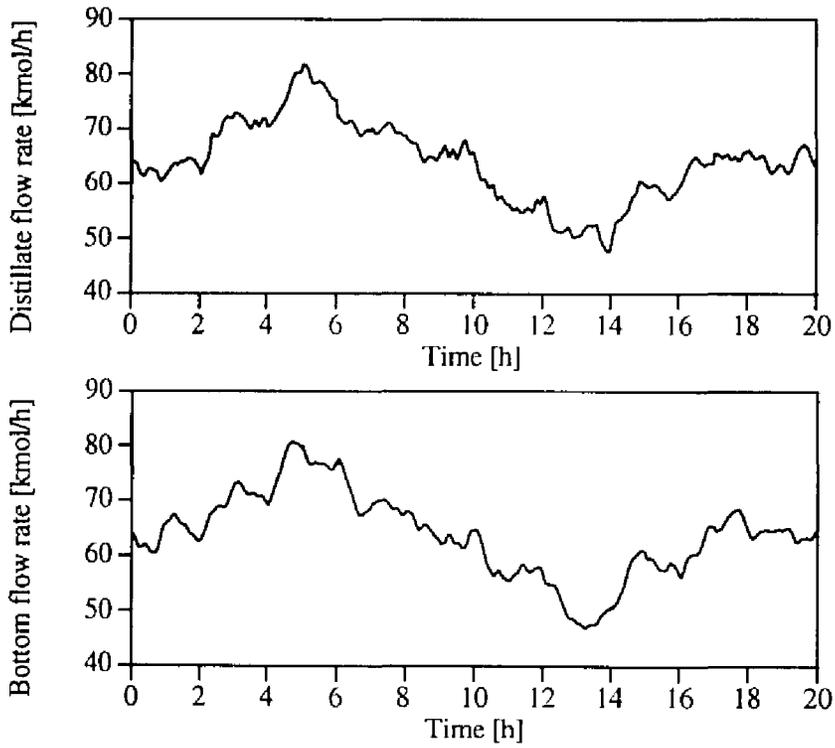


Fig. 4.5 Time series data for modeling (-1). Distillate and bottom flow rate.

数の種のみを変化させた。シミュレーション時間は計 20 時間とした。

ダイナミックシミュレーションを行う際に、塔内温度制御を機能させていけば、温度制御段の温度はほとんど変化しない。したがって、塔内温度制御下で時系列データを採取する場合には、そのデータに制御段の温度が大きく変化するような運転状態は含まれないことになる。しかし、温度制御の代わりに組成制御を適用する場合、温度制御段の温度はより大きく変化すると考えられる。これは、温度をその設定値に一致させるのではなく、製品組成をその設定値に一致させることが制御目的となるためである。このため、塔内温度制御下で得られた時系列データから構築した組成推定モデルを組成推定制御に利用すると、推定モデルをモデル構築時とは異なる運転状態に対して適用することになり、推定精度が低下する可能性がある。

推定精度を向上させるためには、適切なデータを用いて推定モデルを構築しなければならない。推定モデルを推定制御に利用するのであれば、温度制御下での時系列データではなく、塔内温度がより大きく変化している時系列データに基づいて、推定モデルを構築する必要がある。このために、温度制御の比例ゲインを 1 時間毎に $0.5K$ から $1.5K$ の範囲で変化させてシミュレーションを行った。なお、 K は基準となる温度制御の比例ゲインである。この比例ゲインの変化が操作量に与える影響については、Fig. 4.3 から知ることができる。

モデル構築用データの作成に際しては、実プラントでオフライン組成分析を行う状況を想定して、組成のサンプリング間隔を 10 分とした。一方、推定モデルの評価に関しては、サンプリング間隔を意識する必要がない。そこで、モデル検証用データとしては、温度と同じく 1 分間隔の組成データを利用する。

4.4 組成推定モデル

本節では、定常状態データあるいは時系列データに基づいて組成推定モデルを構築し、それらの比較を行う。また、入力変数およびサンプリング間隔の選択が推定精度に及ぼす影響について検討する。構築した推定モデルの評価には平均二乗予測誤差 (MSEP; Mean Squared Error of Prediction) および EPV

(Explained Prediction Variance) を利用する。

MSEP は推定モデルを検証用データに適用することによって次式で計算される。

$$\text{MSEP} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (x(n) - \hat{x}(n))^2 \quad (4.9)$$

ここで、 x は製品組成の測定値、 \hat{x} はその推定値であり、 N はサンプル数を表す。一方、EPV は次式で与えられる。

$$\text{EPV} = \left\{ 1 - \frac{\sum_{n=1}^N (x(n) - \hat{x}(n))^2}{\sum_{n=1}^N (x(n) - \bar{x})^2} \right\} \times 100 \quad (4.10)$$

ここで、 \bar{x} は組成測定値の平均値である。推定が完全であれば EPV は 100% となり、推定精度が低くなるにつれて EPV も小さくなる。

4.4.1 PLS

蒸留塔においては、物質収支や熱収支、さらには気液平衡関係などの物理的な等号制約条件によって製品組成、温度、圧力、流量など多くの変数が関連づけられており、真に独立な変数の数は少ない。したがって、従来の最小二乗法を用いて組成推定モデルを構築しようとするならば、多重共線性の問題を回避するために、少数の独立な変数を入力変数として選択せざるをえない。しかし、高い相関を持つ入力変数を取り扱うことのできる統計的手法を利用することによって、入力変数の数を減らすことなく、精度の高い推定モデルを構築することができる。このような優れた特徴を備えた多変量解析手法の1つが PLS である。

蒸留塔製品組成の推定に PLS を適用した従来の研究では、すべての段の温度を利用したものが多い。全段の温度を利用することにより、入力変数の選択という重大な問題を回避できる。しかし、現実の蒸留プロセスへの適用を視野に入れると、必要以上に多くの段の温度を測定する方法はコスト的に問題がある。したがって、高い精度で組成を推定するのに必要かつ十分な温度測定段を選択すべきである。さらに、圧力や流量などを入力変数とするべきか否かについても検討しなければならない。

本研究では、組成推定モデルの構築に PLS を利用する。モデル構築に際して、すべての変数は平均 0 分散 1 に正規化する。なお、入力変数と製品組成との間の非線形性を取り扱うために、変数の非線形変換などは行わない。非線形性が無視できない場合には、製品組成の対数変換が有効である^[6,17,18]。

4.4.2 定常状態モデル

定常状態データを用いて組成推定モデルを構築する。推定すべき出力変数は塔頂プロパノールモル分率および塔底エタノールモル分率である。一方、第 4.2.4 節で述べたように、蒸留塔の定常状態は少数の独立変数で表現可能であり、多くの段の温度を入力変数とする場合には、還流量やリボイラー熱負荷などを入力変数に加えても推定精度はそれほど改善されない。そこで、全 30 段の塔内温度を入力変数とする。なお、本研究で対象とする蒸留塔では、塔内の圧力変動を考慮しているため、入力変数としてリボイラー圧力を利用する場合についても検討する。すなわち、定常状態モデルとしては、以下の 2 種類について検討する。

A1. 全 30 段の温度を利用

A2. 全 30 段の温度とリボイラー圧力を利用

定常状態モデルを構築するために、原料の流量と組成および製品組成を変化させて、合計 99 種類の定常状態データを作成した。設定条件を Table 4.2 に示す。ここで、 F 、 $F^{(MeOH)}$ 、 $F^{(EtOH)}$ 、 $F^{(PrOH)}$ 、 $F^{(BuOH)}$ は原料流量および原料中の各成分（メタノール、エタノール、プロパノール、ブタノール）流量であり、 $x_D^{(PrOH)}$ と $x_B^{(EtOH)}$ はそれぞれ塔頂プロパノールモル分率および塔底エタノールモル分率である。この表に示されている通り、原料条件について 11 種類、製品組成について 9 種類、合計 99 種類の定常状態データを作成した。

作成した定常状態データを用いて、PLS モデルを構築する。クロスバリデーションの結果を Figs. 4.6, 4.7 に示す。A1, A2 のいずれにおいても、潜在変数の数を増加させることにより、MSE が小さくなる傾向にある。しかし、蒸留塔の状態は少数の独立変数で表現可能であることや、できるだけ安定なパラメータを選択すべきであることなどの理由から、採用する潜在変数の数を少なくする

Table 4.2 The steady-state training data. Feed flow rate and component flow rate (top) and product composition (bottom).

F	$F^{(MeOH)}$	$F^{(EtOH)}$	$F^{(PrOH)}$	$F^{(BuOH)}$
[kmol/h]	[kmol/h]	[kmol/h]	[kmol/h]	[kmol/h]
102.4	25.6	25.6	25.6	25.6
115.2	32.0	25.6	25.6	32.0
121.6	32.0	25.6	32.0	32.0
128.0	32.0	25.6	38.4	32.0
121.6	32.0	32.0	25.6	32.0
128.0	32.0	32.0	32.0	32.0
134.4	32.0	32.0	38.4	32.0
128.0	32.0	38.4	25.6	32.0
134.4	32.0	38.4	32.0	32.0
140.8	32.0	38.4	38.4	32.0
153.6	38.4	38.4	38.4	38.4

$x_D^{(PrOH)}$	$x_B^{(EtOH)}$
[-]	[-]
0.0005	0.0005
0.0005	0.0010
0.0005	0.0020
0.0010	0.0005
0.0010	0.0010
0.0010	0.0020
0.0020	0.0005
0.0020	0.0010
0.0020	0.0020

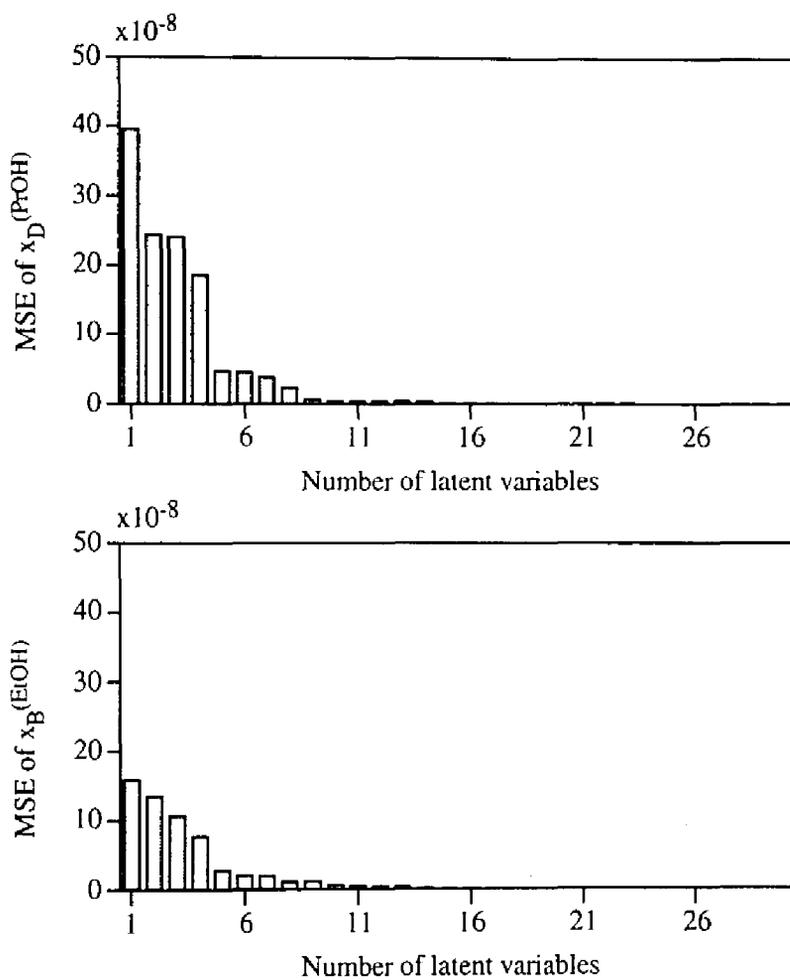


Fig. 4.6 Results of cross-validation test (Case A1).

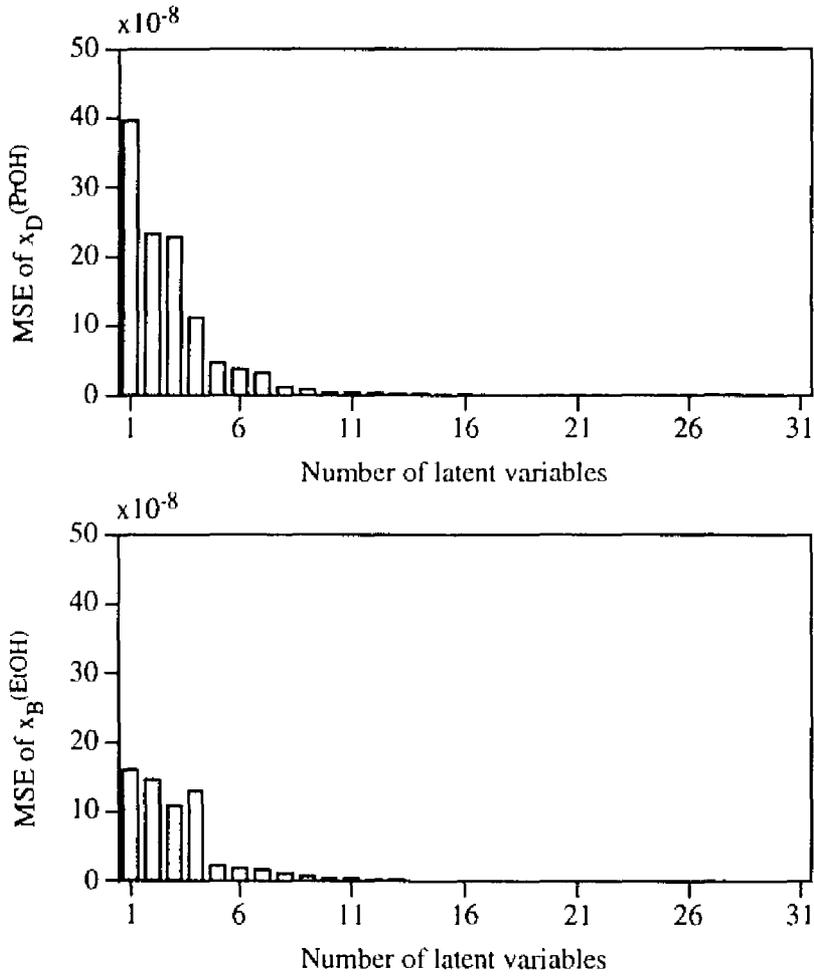


Fig. 4.7 Results of cross-validation test (Case A2).

Table 4.3 Comparison of steady-state inferential models.

Case	MSEP $\times 10^8$ (EPV [%])	
	$x_D^{(PrOH)}$	$x_B^{(EtOH)}$
A1	3.75 (-5.4)	1.39 (85.6)
A2	1.45 (59.2)	1.26 (86.9)

必要がある。この観点から Figs. 4.6, 4.7 を見ると、潜在変数の数が 5 以下では MSE が急激に低下するが、それ以上潜在変数を増加させても、極端には MSE が小さくならないことがわかる。

当然ながら、5 という数字は主観的な判断の結果である。Figs. 4.6, 4.7 に示した結果から、潜在変数の数を 9 あるいは 10 とするべきであると結論づけることも不可能ではない。そこで、潜在変数の数が異なる複数の定常状態 PLS モデルを構築し、それらを検証用データに適用することによって、適切な潜在変数の数を決定する。検証用データに対する組成推定値の MSE を Figs. 4.8, 4.9 に示す。前述のクロスバリデーションの結果と異なり、A1, A2 のいずれにおいても、潜在変数の数と MSE は単調な関係にはなく、潜在変数を増加させても MSE を小さくできないことがわかる。さらに、潜在変数の数が 5 程度のときに、MSEP が局所的に最小となっており、全体を考慮しても、潜在変数の数を 5 前後に設定することが妥当であると判断できる。以上の結果をふまえて、定常状態 PLS モデルで採用する潜在変数の数は 5 とする。

構築した定常状態 PLS モデルを検証用データに適用した結果を Table 4.3 および Fig. 4.10 に示す。この結果より、塔内温度に加えてリボイラー圧力を入力変数として用いることによって、推定精度を大幅に改善できることがわかる。

4.4.3 静的モデルおよび動的モデル

ここでは、時系列データを用いて PLS モデルを構築する。過去のデータを利用しない（動特性を考慮しない）静的モデルと過去のデータも利用する（動特性を考慮する）動的モデルとを構築し、それらの比較を行う。利用する時系列デー

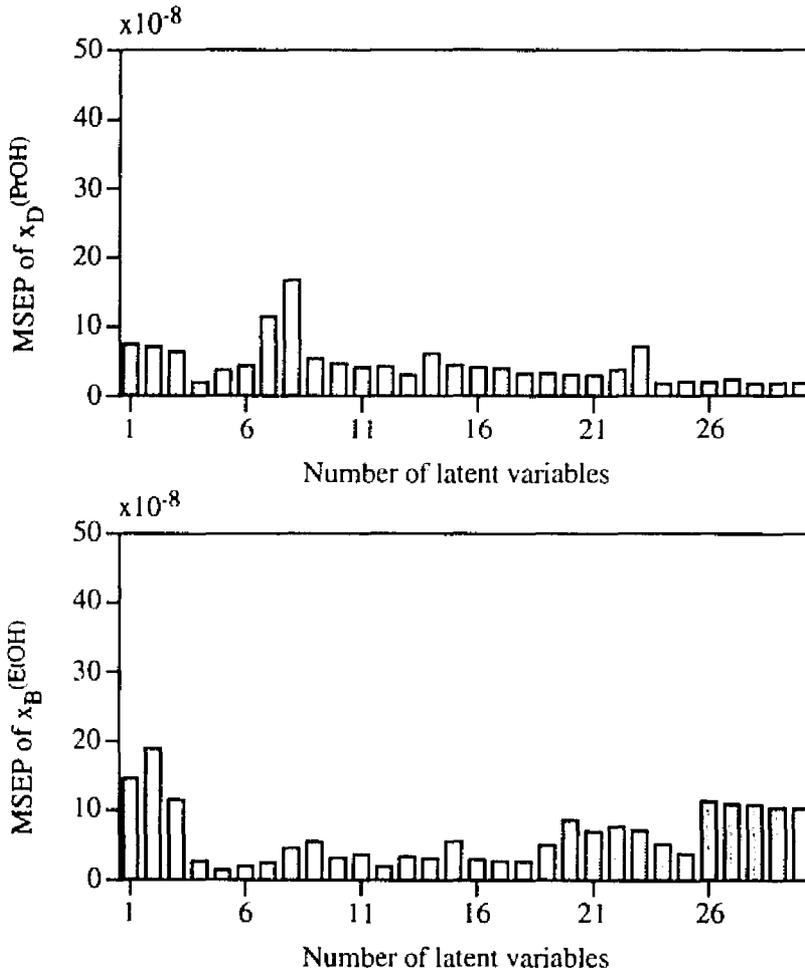


Fig. 4.8 Estimation results of applying steady-state models to validation data (Case A1).

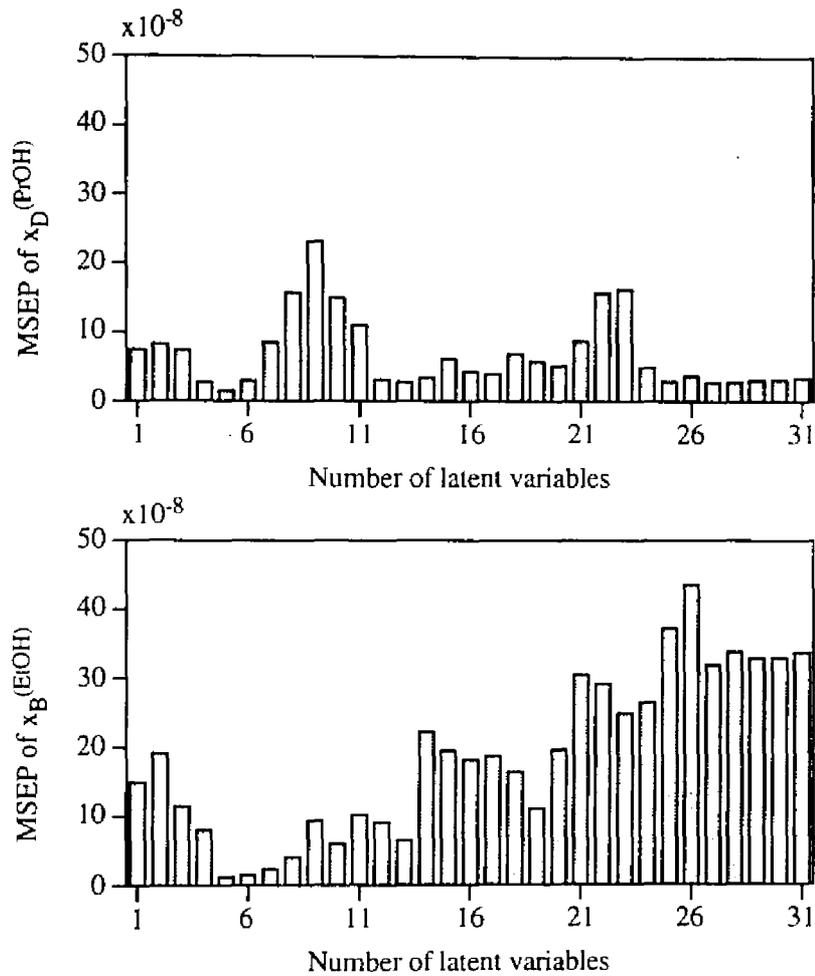


Fig. 4.9 Estimation results of applying steady-state models to validation data (Case A2).

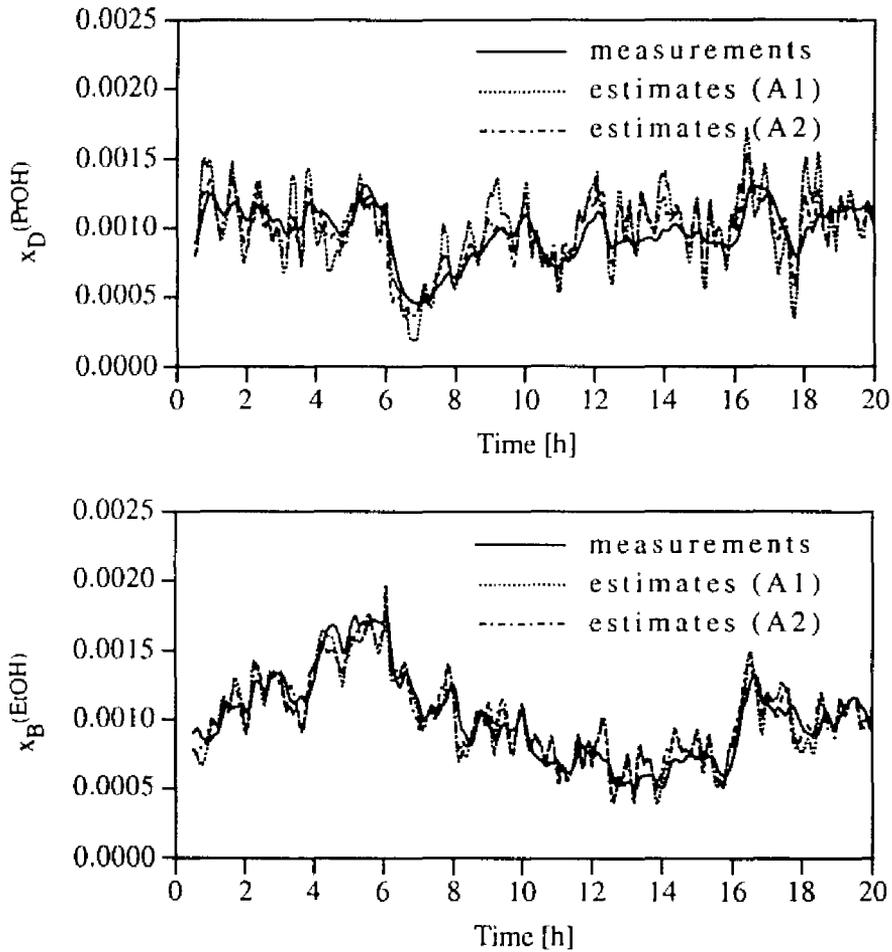


Fig. 4.10 Estimation results of product compositions by using steady-state PLS models.

タの作成方法は第 4.3.2 節で述べた通りである。

PLS による組成推定モデルの構築に関する従来の研究では、すべての段の温度を利用しているものが多い。これは、多重共線性の問題を回避して安定なパラメータを決定することができるという、PLS の優れた特徴を示すためであると考えられる。別の理由としては、すべての段の温度測定値を利用することにより、温度測定段の選択という困難な問題を回避できることが挙げられる。しかし、実プロセスへの適用を視野に入れると、設備費やメンテナンス費の問題から、すべての段の温度を利用するというのはあまり現実的ではない。そこで、少数の塔内温度に加え、還流量、リボイラー熱負荷、リボイラー圧力を入力変数として、製品組成推定モデルを構築する。

組成推定モデルの実用化を図るためには、製品組成を推定するのに最低限必要な温度測定段数を決定する必要がある。そのために、以下に示す 7 種類の設定について検討する。

- B1. 2 段利用 (塔頂側:4, 11 段, 塔底側:20, 27 段)
- B2. 3 段利用 (塔頂側:4, 9, 22 段, 塔底側:9, 22, 27 段)
- B3. 4 段利用 (4, 9, 22, 27 段)
- B4. 5 段利用 (4, 9, 18, 22, 27 段)
- B5. 6 段利用 (4, 9, 13, 18, 22, 27 段)
- B6. 9 段利用 (3, 6, 9, 12, 15, 19, 22, 25, 28 段)
- B7. 全 30 段利用

ここで、塔頂側とは塔頂プロパノールモル分率を推定するために利用する温度測定段を、塔底側とは塔底エタノールモル分率を推定するために利用する温度制御段を表している。なお、同一の塔内温度を用いて塔頂および塔底の製品組成を推定すること、温度制御段 (9, 22 段) は温度測定段として利用することを原則とした。しかし、温度測定段をわずか 2 段とする場合 (B1) に温度制御段を温度測定段として利用すると、推定精度が極端に悪くなるため、その場合に限り、温度制御段の温度を利用しなくてもよいことにした。また、温度測定段数を 2 あるいは 3 とする場合 (B2, B3)、他と比べて極端に推定精度が低下したため、塔頂製品組成と塔底製品組成を推定するために別の温度測定段を用いてもよいとした。

当然ながら、少数の温度測定段を利用する場合には、温度測定段の選択が組成推定モデルの性能に多大な影響を与えるため、温度測定段を適切に選択しなければならない。例えば、隣接する段の温度は非常に類似した挙動を示し、それらを入力変数としても多くの情報を抽出することはできないため、温度測定段にはある程度の間隔を持たせる必要がある。最適な温度測定段を選択するというのは難しい問題であるが、上記の7種類の設定においては、非常に多くの組み合わせについて組成推定モデルを構築し、その推定精度に基づいて温度測定段を選択した。したがって、温度測定段の選択は極めて適切に行われているものとして議論を進める。

次に、プロセスの動特性を推定モデルに組み込むために、現時刻のみならず過去も含めた複数の時刻における測定値を入力変数として利用することを考える。過去のデータを利用することの効果을明らかにするために、以下に示す23種類の設定について検討する。

- C0. 現時刻のデータのみ利用
- C k ($k = 1, \dots, 20$). 現時刻と k 分前のデータを利用
- C21. 現時刻と 5, 10, 15 分前のデータを利用
- C22. 現時刻と 3, 6, 9, 12, 15, 18 分前のデータを利用

この23種類の設定において、C0が静的モデルに対応し、C1-C22が動的モデルに対応している。

さらに、塔内温度以外のプロセス変数を入力変数として用いる効果について検討するために、以下に示す5種類の設定についても検討する。

- a. 塔内温度のみ利用
- b. 塔内温度と還流量を利用
- c. 塔内温度とリボイラー熱負荷を利用
- d. 塔内温度とリボイラー圧力を利用
- e. 塔内温度と還流量, リボイラー熱負荷, リボイラー圧力を利用

PLSモデルの構築に際しては、B1-B7, C0-C22, a-eのあらゆる組み合わせを考え、クロスバリデーションの結果として得られるMSEに基づいて組成推定モ

デルの評価を行う。

温度測定段数の選択

すべての組み合わせについてクロスバリデーションの結果を示すことはできないので、静的モデル (C0) と動的モデル (C21) の結果を Figs. 4.11, 4.12 に示す。いずれの場合においても、温度測定段数を増加させるにしたがって推定精度が向上する傾向にある。

まず、塔頂プロパノールモル分率を推定する場合について考察する。温度測定段数が3以下の場合 (B1, B2), 塔内温度に加えて還流量, リボイラー熱負荷, リボイラー熱量のすべてのプロセス変数を利用することにより、推定精度を向上させることができる。しかし、B1の推定精度は最も良好なB1eでさえ非常に悪く、温度測定段数が2段では明らかに不十分である。温度測定段数を4以上に設定すると (B3-B5), 還流量を入力変数として用いる効果が鮮明に現れる。このとき、すべての変数を用いても推定精度がほとんど改善されない (bとeの評価がほぼ同じである) ことから、還流量が組成推定に大きく貢献していることがわかる。さらに温度測定段数を増加させると (B6, B7), 塔内温度以外の変数を利用する効果が見られなくなる。これは、十分に多くの温度測定段を用意すれば、塔内温度だけで蒸留塔の運転状態を十分に表現できることを意味している。しかし、塔内温度3点とその他すべての変数を用いる場合 (B2e) に比べて、温度測定段数を増加させても推定精度はほとんど向上しないことから、設備コストなどを考慮して、実用上は温度測定段数は3段で十分であると考えられる。以上の議論は静的モデル (C0) および動的モデル (C21) に共通しているが、推定精度については、動的モデルが静的モデルをはるかに凌いでいる。

次に、塔底エタノールモル分率を推定する場合について考察する。この場合も基本的には上述の議論が成立する。すなわち、すべての変数を利用することにより、推定精度を改善することができる。ただし、塔内温度以外の変数を用いる効果は相対的に小さく、劇的に推定精度が向上するようなことはない。特に、還流量の寄与は塔頂製品組成を推定する場合と比べて極端に小さい。また、動的モデル (C21) に関する結果から、温度測定段数は5段以上にすべきであると考え

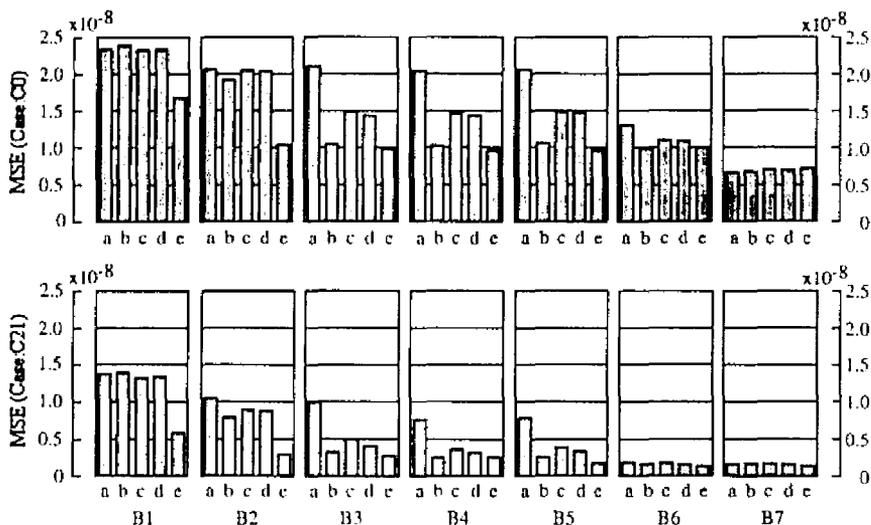


Fig. 4.11 Influence of measurement selection for estimating the propanol mole fraction in the distillate product $x_D^{(PrOH)}$. Case C0 (top) and C21 (bottom) are compared.

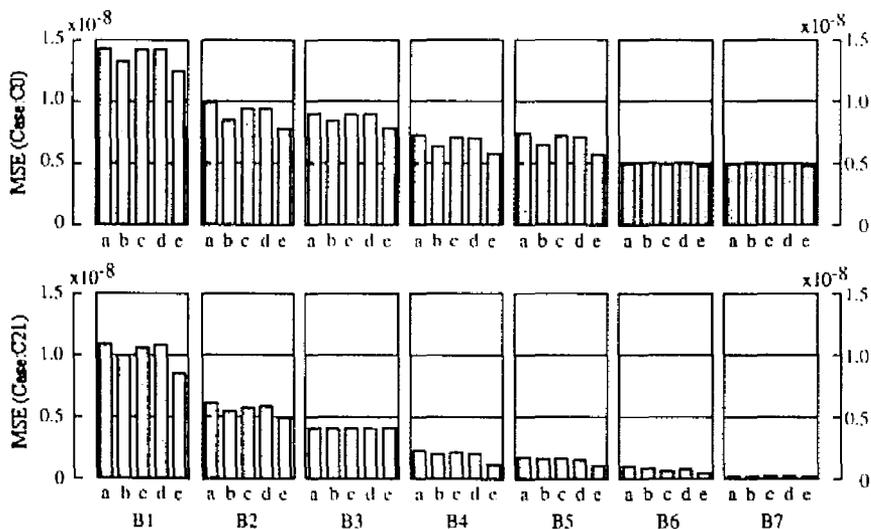


Fig. 4.12 Influence of measurement selection for estimating the ethanol mole fraction in the bottom product $x_B^{(EtOH)}$. Case C0 (top) and C21 (bottom) are compared.

られる。なお、動的モデルが静的モデルよりもはるかに優れている点は先と同様である。

以上の考察から、塔内温度以外の変数を用いることにより、推定精度を大きく改善できることは明らかである。さらに、すべての変数を利用する場合には、5段以上の温度測定段を利用しても、推定精度にほとんど改善は見られない。これと同様の結果は、2成分蒸留塔を対象とした場合について報告されている^[25]。ここまでの結果をふまえて、以下の節では、温度測定段数を5とし、他の3変数を利用する組成推定モデル (B4e) を採用する。

なお、動的モデルの構築に関して以下の点に注意しておく必要がある。すなわち、操作量 (還流量とリボイラー熱負荷) はコントローラによって決定されるため、製品組成に瞬間的に影響を与えない。言い換えると、現時刻の制御量 (塔内温度あるいは製品組成) によって操作量が決定されるため、現時刻の製品組成と操作量との関係はプロセスによってではなくコントローラによって規定される。したがって、動的モデルを構築する際には、現時刻の操作量を入力変数として利用していない。

サンプリング間隔の選択

過去のデータを利用する効果について、より具体的には、入力変数のサンプリング間隔が推定モデルの性能に与える影響について検討するために、C0-C22のすべてについて組成推定モデルを構築した。クロスバリデーションの結果をTable 4.4に示す。なお、すべてB4eについての結果である。

まず、C0-C20を比較すると、過去のデータを用いることによって、推定精度を大幅に改善できることがわかる。すなわち、動的モデル (C1-C20) は静的モデル (C0) よりも推定精度の点で優れている。特に、塔頂プロパノールモル分率の推定にはおよそ16分前のデータの利用が、塔底エタノールモル分率の推定にはおよそ8分前のデータの利用が有効である。

蒸留塔の設定を様々に変化させてサンプリング間隔が推定精度に及ぼす影響を調べたところ、最適なサンプリング間隔は蒸留塔の特性、特に還流槽とリボイラーのホールドアップに依存することが確認できた。Table 4.5に、還流槽およ

Table 4.4 Influence of sampling interval selection on the estimation accuracy.

Case	MSE $\times 10^8$	
	$x_D^{(PrOH)}$	$x_B^{(EtOH)}$
C0	0.957	0.576
C2	0.726	0.318
C4	0.587	0.260
C6	0.492	0.195
C8	0.497	0.153
C10	0.405	0.158
C12	0.339	0.184
C14	0.299	0.228
C16	0.274	0.257
C18	0.327	0.305
C20	0.582	0.422
C21	0.252	0.113
C22	0.236	0.113

Table 4.5 Optimal sampling intervals for different column conditions.

Holdup		Optimal interval	
Reflux drum	Reboiler	$x_D^{(PrOH)}$	$x_B^{(EtOH)}$
[m ³]	[m ³]	[min]	[min]
0.314	0.314	7	1
0.314	3.142	7	8
0.314	6.284	7	10
1.571	1.571	10	6
1.571	3.142	10	8
1.571	6.284	9	10
3.142	0.314	12	1
3.142	1.571	12	6
3.142	3.142	12	8
3.142	6.284	12	10
6.284	0.314	15	1
6.284	1.571	15	6
6.284	3.142	16	8
6.284	6.284	16	10

びりボイラーのホールドアップが異なる蒸留塔を対象として、組成推定に最適なサンプリング間隔を求めた結果を示す。なお、モデル構築用時系列データを作成するに際して、還流槽およびりボイラーのホールドアップは設定値で一定に保たれると仮定して、ダイナミックシミュレーションを行った。シミュレーションの設定は基本的にはこれまでと同様であるが、温度コントローラの比例ゲインは変化させず一定とした。この結果から、塔頂プロパノールモル分率を推定するのに最適なサンプリング間隔は還流槽のホールドアップに依存し、塔底エタノールモル分率を推定するのに最適なサンプリング間隔はりボイラーのホールドアップに依存することが確認できる。ただし、最適なサンプリング間隔とホールドアップとの関係は線形ではない。

ここまでは、現時刻と過去のある1時刻とのデータを用いる場合について検討してきた。次に、より多くの過去のデータを利用する効果について考察する。Table 4.4 に示した結果から、データ数を増加させることによって推定モデルの性能が向上することがわかる。しかし、C21 と C22 の結果に大差がないことから、現時刻も含めて計4時刻程度のデータを利用すれば十分であると判断される。そこで、最終的に C21 を採用する。

静的モデルと動的モデルの比較

以上より、静的モデルとしては B4e, C0 を、動的モデルとしては B4e, C21 を採用することにした。PLS モデルを決定するためには、採用する潜在変数の数を適切に選択する必要がある。そこで、定常状態モデルを構築する際に行ったように、クロスバリデーションの結果と検証用データへの適用結果とを併せて、採用する潜在変数の数を決定する。

静的モデルのクロスバリデーションの結果を Fig. 4.13 に、静的モデルを検証用データに適用した結果を Fig. 4.14 にそれぞれ示す。これらの結果から、採用する潜在変数の数を5と定めた。

一方、動的モデルのクロスバリデーションの結果を Fig. 4.15 に、動的モデルを検証用データに適用した結果を Fig. 4.16 にそれぞれ示す。これらの結果から、採用する潜在変数の数を10と定めた。

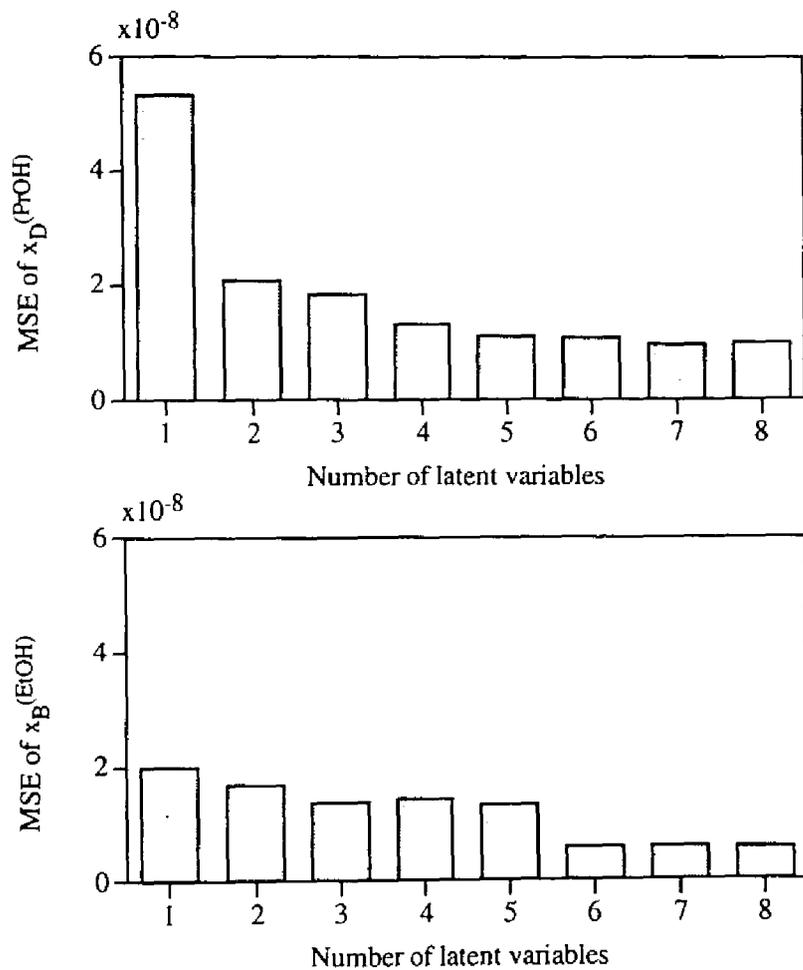


Fig. 4.13 Results of cross-validation test (Case B4e, C0).

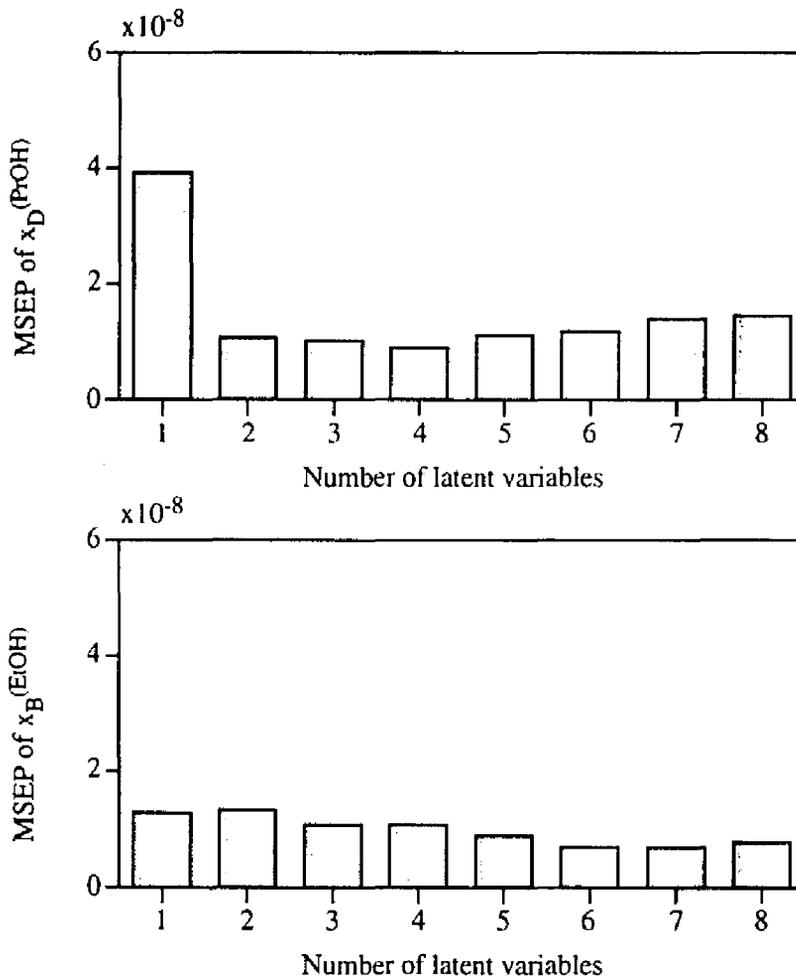


Fig. 4.14 Estimation results of applying static models to validation data (Case B4e, C0).

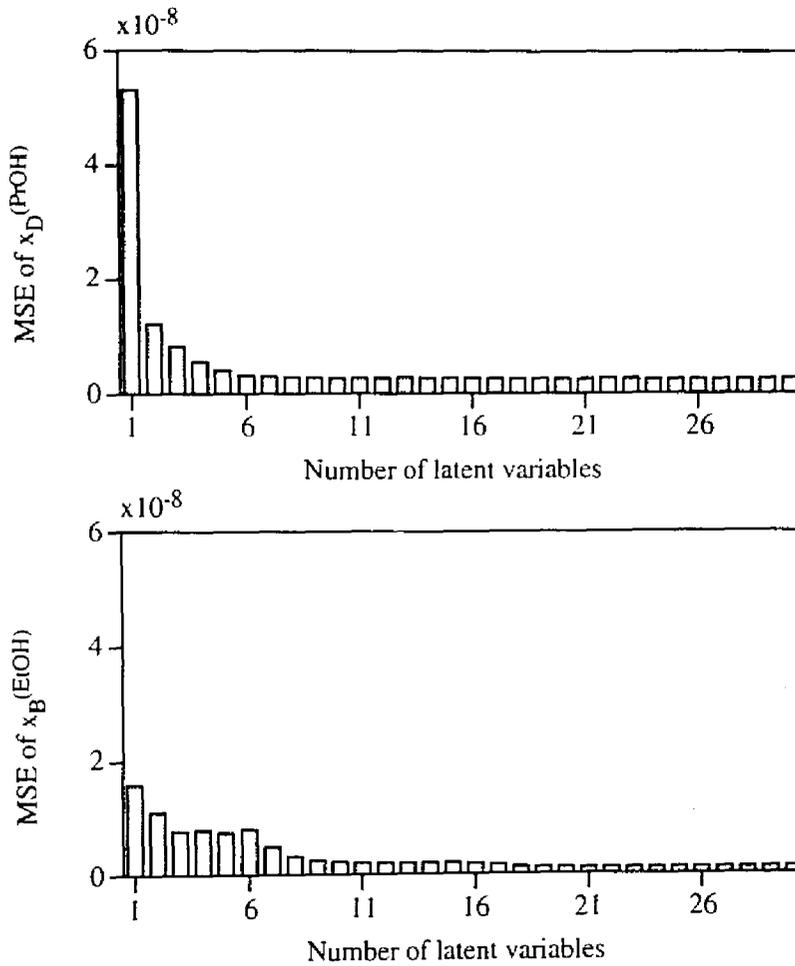


Fig. 4.15 Results of cross-validation test (Case B4e, C21).

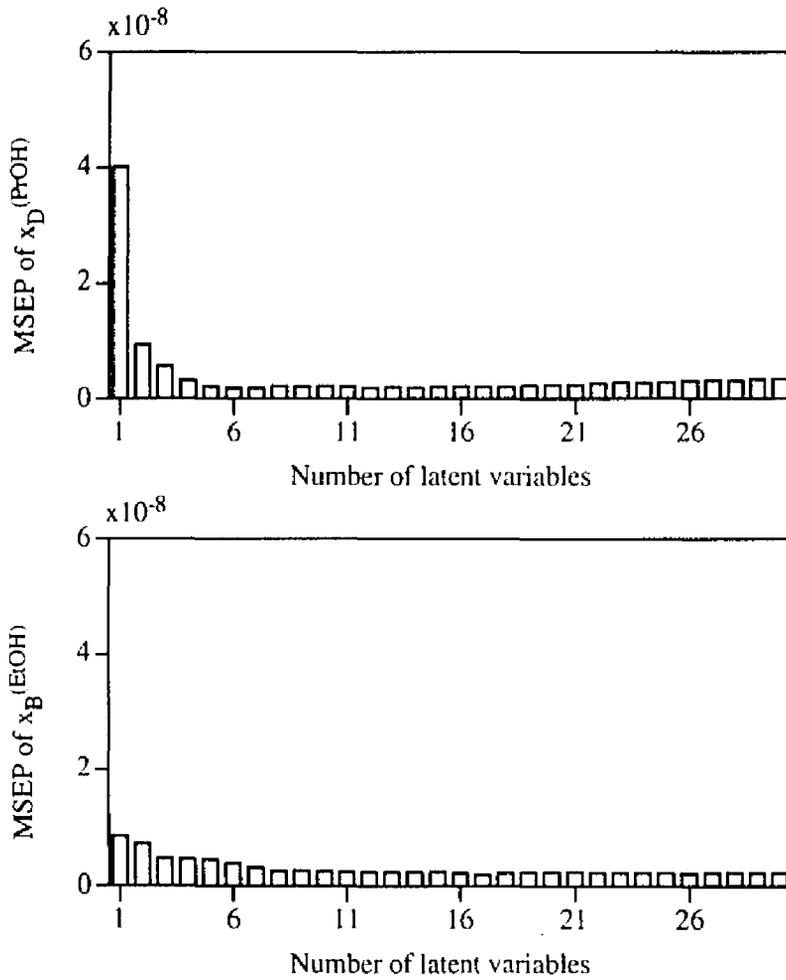


Fig. 4.16 Estimation results of applying dynamic models to validation data (Case B4e, C21).

Table 4.6 Comparison of static and dynamic inferential models.

Case	MSEP $\times 10^8$ (EPV [%])	
	$x_D^{(PrOH)}$	$x_B^{(EtOH)}$
B4e, C0	1.12 (68.6)	0.90 (90.6)
B4e, C21	0.22 (93.8)	0.25 (97.4)

構築した静的 PLS モデルおよび動的 PLS モデルを検証用データに適用した結果を Table 4.6 および Fig. 4.17 に示す。静的モデルを適用した場合に生じる推定値の細かい振動が動的モデルを適用することによって抑制されており、動的モデルが高い性能を示すことが確認できる。

測定ノイズの影響

ここまでは、測定ノイズのない理想的な状況を想定して検討を進めてきた。ここでは、測定ノイズの存在が推定精度に及ぼす影響について検討するために、既を作成してある時系列データに測定ノイズを付加し、動的モデルの構築と検証を再度行う。

これまでモデル構築用データとして用いてきた時系列データにおいて、塔内温度、還流量、リボイラー熱負荷、リボイラー圧力の各測定値にランダムなノイズを付加した。ノイズは平均 0 の正規分布に従うとし、その標準偏差は、塔内温度に対しては 0.1 °C、その他の変数に対しては元の時系列データの標準偏差の 10% となるように設定した。このため、相当大きな測定ノイズを付加したことになる。この測定ノイズを付加した時系列データを用いて、動的モデル (B4e, C21) を再構築した。

測定ノイズを含むデータから構築した動的 PLS モデルを検証用データに適用した結果を、既を示した定常状態モデル、静的モデル、および動的モデルの結果と共に、Table 4.7 に示す。測定ノイズが付加されることにより、推定精度は悪くなっている。しかし、測定ノイズを含むデータから構築した動的モデルの精度は、測定ノイズを含まない理想的なデータから構築した定常状態モデルや静的モ

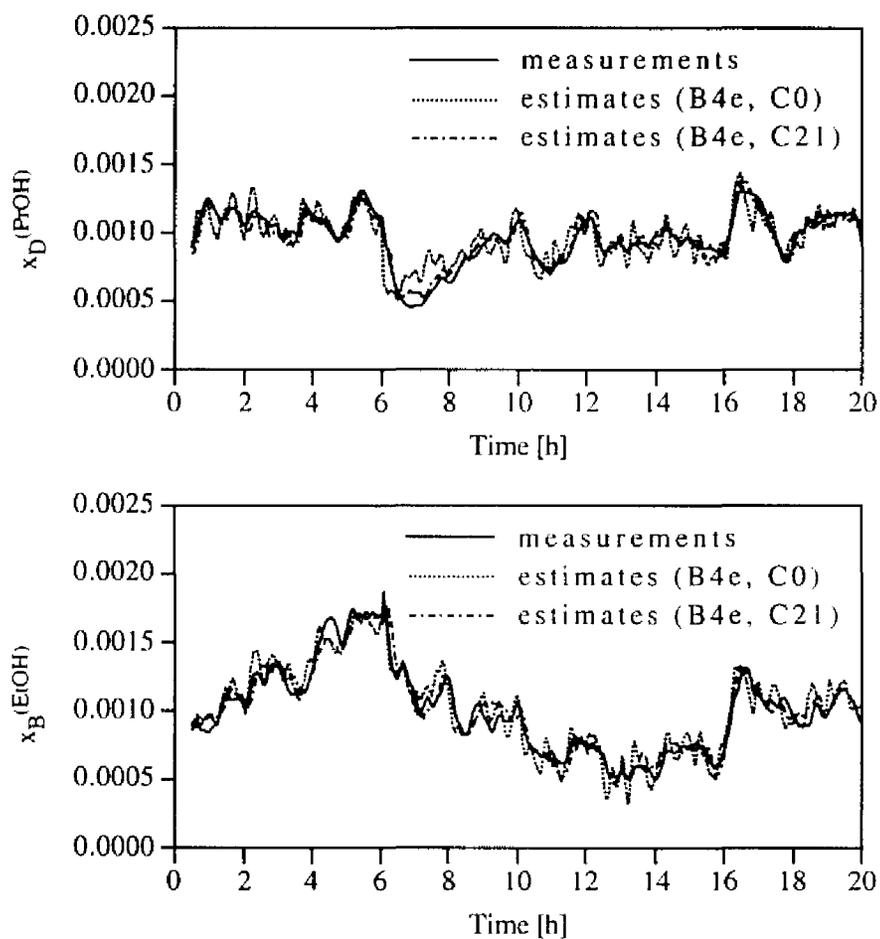


Fig. 4.17 Estimation results of product compositions by using static and dynamic PLS models.

Table 4.7 Comparison of inferential models.

Model	MSEP $\times 10^8$ (EPV [%])	
	$x_D^{(PrOH)}$	$x_B^{(EtOH)}$
Steady-State		
A1	3.75 (-5.4)	1.39 (85.6)
A2	1.45 (59.2)	1.26 (86.9)
Static		
B4e, C0	1.12 (68.6)	0.90 (90.6)
Dynamic		
B4e, C21	0.22 (93.8)	0.25 (97.4)
+noise	0.59 (83.3)	0.49 (94.9)

デルの精度よりも明らかに良い。さらに、今回設定したようなランダムな測定ノイズの影響は、データをフィルタリングすることによって比較的容易に低減することができる。したがって、動的 PLS モデルを用いて製品組成を推定するに際して、測定ノイズの影響はそれほど大きくはないと考えられる。

測定ノイズの影響を低減するためには、データを適切にスケーリングすることも重要である。例えば、本質的なデータの変動に対して測定ノイズが大きい変数よりも、測定ノイズが小さい変数の方が信頼性がある。このような観点から、PLS による蒸留塔の製品組成推定を対象として、複数のスケーリング方法を比較した結果が報告されている¹⁶⁾。

4.5 組成推定制御

本節では、第 4.4.3 節で構築した動的 PLS モデルを利用して、組成推定制御を行う。制御シミュレーションを行うに際して、第 4.3.2 節で述べた原料の流量および組成の変動を外乱として与える。推定制御を適用する効果を検証するために、塔内温度制御と組成推定制御の制御性能を比較する。なお、制御性能は、製品組成とその設定値の平均二乗誤差 (MSE) に基づいて評価する。

4.5.1 塔内温度制御

まず、塔内温度制御の結果について述べる。Fig. 4.1 に示した塔内温度制御系による制御結果を Fig. 4.18 に、このときの制御性能を Table 4.8 に示す。なお、Table 4.8 には、他の制御系を用いた場合の結果も併せて示してある。

塔内温度制御の適用結果を見ると、特に原料流量が大きく変化する時間帯において、塔底エタノールモル分率の偏差が大きいことがわかる。ただし、制御応答は外乱の種類や大きさ、コントローラのチューニングによって変化するため、今回用いた外乱とコントローラの組み合わせにおいては、上述のような結果が得られたというにすぎない。制御パラメータを変更すれば、制御結果も異なってくる。しかし、ここで用いた温度コントローラは、干渉の影響も考慮して試行錯誤により適切に調整されているため、制御パラメータを変更したとしても、大幅に制御

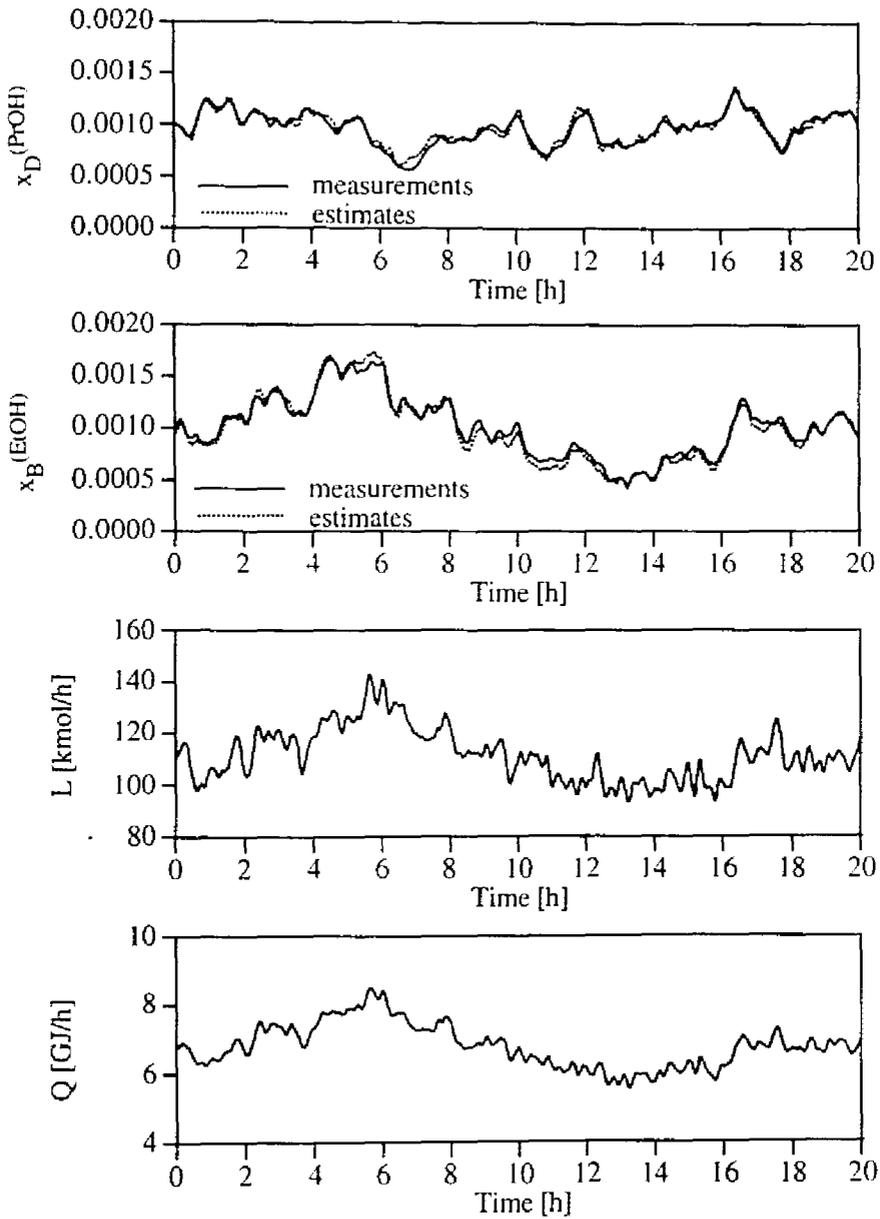


Fig. 4.18 Closed-loop responses of tray temperature control system.

Table 4.8 Comparison of the performance of three control strategies.

Control strategy	MSE of Control $\times 10^8$	
	(MSEP $\times 10^8$)	
	$x_D^{(PrOH)}$	$x_B^{(EtOH)}$
Tray Temperature	2.5 (0.14)	8.5 (0.26)
Inferential	4.4 (2.86)	4.3 (1.25)
Cascade	2.6 (1.67)	2.2 (0.56)

性能が向上するとは考えられない。以上より、製品組成を精密に制御するという観点からは、塔内温度制御では十分でないといえる。

4.5.2 組成推定制御

第 4.4.3 節で構築した動的 PLS モデルを用いて、塔内温度、還流量、リボイラー熱負荷、リボイラー圧力の測定データから塔頂プロパノールモル分率および塔底エタノールモル分率を推定し、得られた推定値をそれぞれ還流量およびリボイラー熱負荷で制御する組成推定制御系について検討する。先に述べた塔内温度制御と同様に、マルチループ PI 制御を採用し、制御パラメータは試行錯誤により調整する。この組成推定制御系の制御結果を Fig. 4.19 に、このときの制御性能を Table 4.8 に示す。

組成推定制御と塔内温度制御を比較すると、組成推定制御を適用しても制御性能があまり改善されていないことがわかる。さらに、温度制御時には製品組成を高い精度で推定できているにもかかわらず、推定制御時には推定精度が極端に低下している。組成推定制御の性能を改善するためには、推定精度を改善する必要がある。実際、製品組成がオンラインで測定可能であるという仮定の下で、製品組成の測定値を制御量とする場合には、コントローラのゲインを大きくすることによって、非常に良好な制御応答が実現できることを確認した。

推定精度を改善する 1 つの方法として、組成推定制御下で得られる運転データから組成推定モデルを再構築する方法がある。PLS モデルのような統計モデルに共通する特徴として、モデル構築に利用したデータと類似したデータに対しては高い推定精度が期待できるが、異なるデータに対しては推定精度が低下してしまうことが挙げられる。言い換えると、統計モデルによって、モデル構築用データを採取したときと類似した運転状態を表現することは容易であるが、それと異なる運転状態を表現することは困難である。したがって、組成推定制御に利用する推定モデルを組成推定制御下で得られる運転データを用いて構築することにより、推定精度および制御性能を向上させることができるはずである。異なる制御パラメータを用いれば運転状態が変化することを考慮すれば、コントローラをチューニングするごとに運転データを採取し、そのデータに基づいて組成推定モデルを

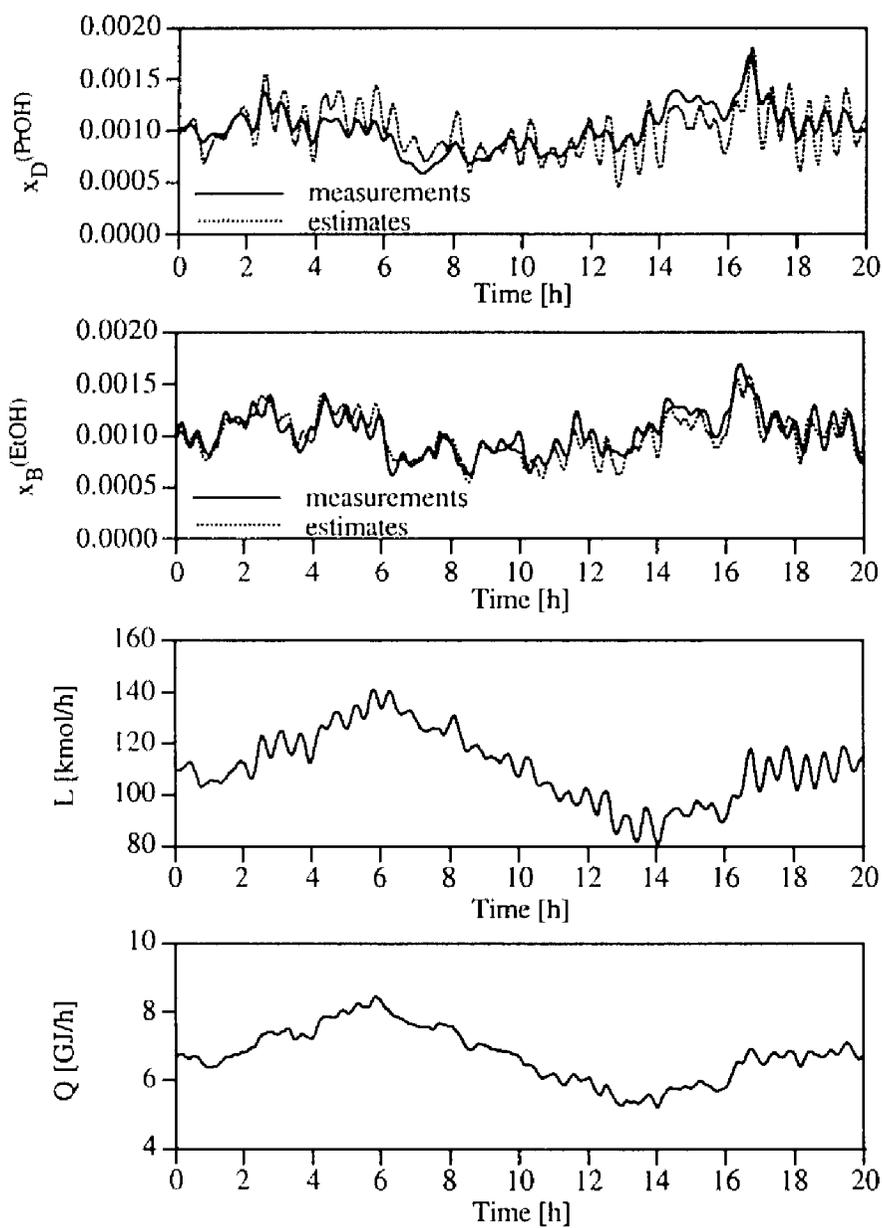


Fig. 4.19 Closed-loop responses of inferential composition control system.

構築し、さらに構築した推定モデルを用いて組成推定制御を行うという作業が必要となることがわかる。このような推定モデルの構築と制御系の設計とを繰り返して行う方法の必要性は Kresta らによって指摘されている^[9]。

本研究では、推定モデルの構築と制御系の設計とを繰り返すのではなく、第 4.3.2 節で述べたように、温度制御の比例ゲインを変化させてシミュレーションを行い、得られた時系列データを用いて推定モデルを構築した。これは、コントローラを変化させることによって、塔内温度がより大きく変動する時系列データを作成することができるため、より広範な運転状態に適合する組成推定モデルを構築できると期待したためである。

モデル構築用データを作成する際に比例ゲインを変化させることの効果を明らかにするために、パラメータを固定した温度制御下で得られる時系列データを用いて組成推定モデルを構築し、そのモデルを組成推定制御に適用した。その結果、組成推定制御のパラメータが同一であるにも拘わらず、新たに構築した推定モデルに基づく組成推定制御系は不安定となった。このような制御性能の極端な低下は、推定精度の低下に起因する。すなわち、通常の塔内温度制御下で得られる時系列データから構築した組成推定モデルを、制御段の温度がより大きく変化するような、モデル構築時とは異なる運転状態に対して適用したため、組成推定モデルの性能が低下し、結果として制御性能も低下したと考えられる。この検討結果から、広範な運転状態に適合する組成推定モデルを構築するために、温度制御のパラメータを変化させて得られる時系列データを用いる方法が有効であることがわかる。

温度制御パラメータを変化させてモデル構築用データを作成する方法が有効であるとしても、Table 4.8 に示したように、組成推定制御の適用によって制御性能が大幅に改善されることはなく、その制御性能は満足できるものではない。より制御性能を高めるためには、制御を強くすることが必要である。しかし、ここで用いた設定よりも比例ゲインを大きくすると、還流量およびボイラー熱負荷が急激に変化するようになり、組成推定モデルがその変化に適合できなくなってしまう。このため、推定精度の極めて高いモデルを構築しない限り、製品組成推定値を制御量とする組成推定制御系では、制御パラメータの調整によって制御性能を改善することは困難である。

4.5.3 カスケード制御

第4.5.2節において、第4.4.3節で構築した動的PLSモデルに基づいて組成推定制御を行う場合、製品組成推定値を制御量として還流量およびボイラー熱負荷を直接操作する制御系によっては、塔内温度制御系に比べて制御性能があまり改善されないことを示した。そこで、別の制御系について検討する。

一般に蒸留塔では、原料の流量や組成が変動した場合に、その影響は塔内の状態を変化させながら塔端へと伝播していき、やがて製品組成をも変化させる。還流量やボイラー熱負荷を操作した場合も同様であり、その操作の影響が蒸留塔他端の製品組成を変化させるまでには遅れがある。したがって、塔内の状態を監視していれば、原料外乱および塔他端における操作の影響を早期に検出することができるはずである。この観点から、原料外乱および塔他端における操作が製品組成に及ぼす影響をフィードフォワード的に補償するために、塔内温度制御が利用できると考えられる。しかし、既に第4.5.1節で示したように、塔内温度制御だけでは十分な制御性能を実現することはできないため、組成推定制御と塔内温度制御とを組み合わせたカスケード制御系を適用する。

提案するカスケード制御系をFig. 4.20に示す。この制御系では、第4.5.1節で利用したものと同一の温度コントローラを内側ループに組み込み、外側ループでは2つの温度コントローラに与える設定値を操作量として製品組成推定値を制御する。外側ループに対応する組成推定制御ループでは、それぞれPIコントローラを利用するものとし、制御パラメータは試行錯誤で決定した。このカスケード制御系の制御結果をFig. 4.21に、このときの制御性能をTable 4.8に示す。

カスケード制御系の制御性能は、これまでに検討した塔内温度制御系および組成推定制御系よりも優れている。さらに、組成推定制御時と比較して、推定精度も向上していることがわかる。

ここで示したカスケード制御系の性能に満足できないのであれば、このカスケード制御系の下で得られる時系列データから組成推定モデルを再構築し、さらにコントローラを再調整することによって、制御性能を改善できる可能性はある。このようなモデル構築と制御系設計の繰り返しについては第4.5.2節で既に言及した。組成推定モデルの精度を向上させることによって制御性能をも改善する余

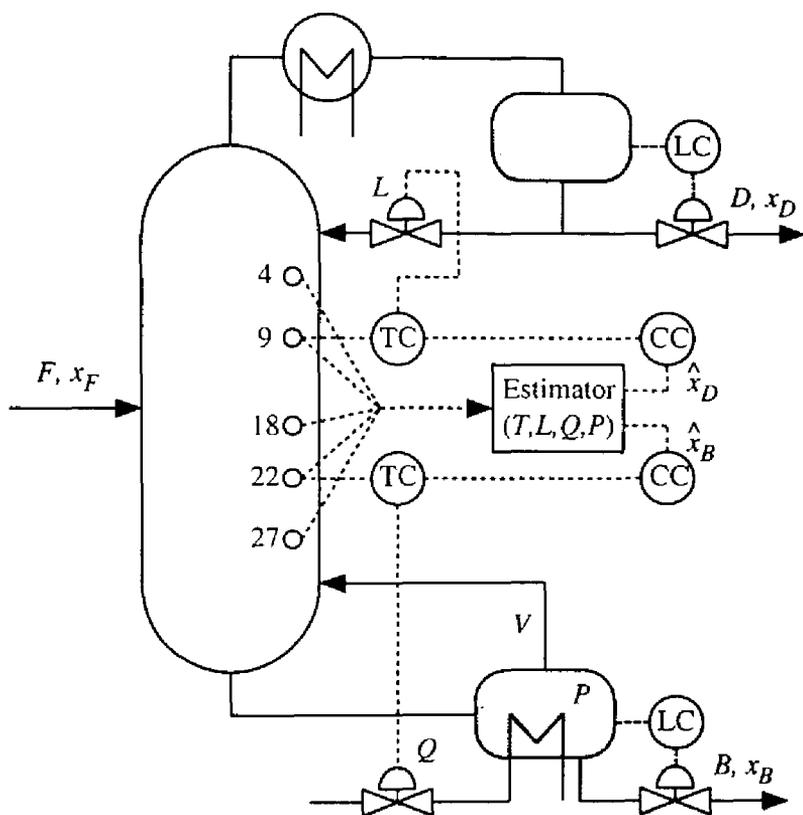


Fig. 4.20 Cascade control scheme with composition estimator.

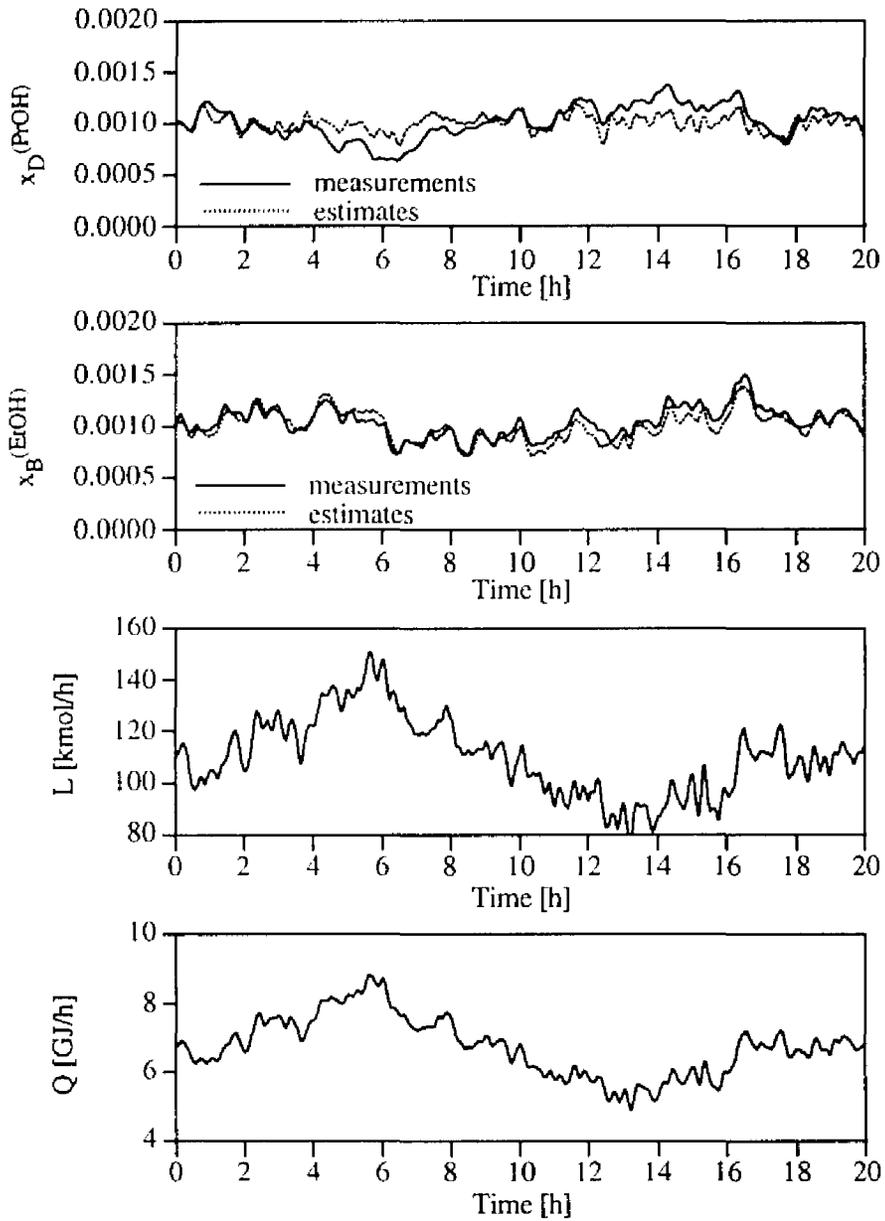


Fig. 4.21 Closed-loop responses of cascade control system with composition estimator.

地はあると認められるが、少なくとも、従来の塔内温度制御系に比べて、提案するカスケード制御系が優れた性能を示すことは確かである。

4.6 結言

多成分蒸留塔の製品組成をオンライン測定可能なプロセス変数から推定できる組成推定モデルを、PLSを利用して構築した。入力変数としては、塔内温度、還流量、リボイラー熱負荷、リボイラー圧力の4種類の変数を採用し、様々な組み合わせについて組成推定モデルの構築と評価を行った。その結果、今回対象とした蒸留塔については、還流量、リボイラー熱負荷、リボイラー圧力を入力変数として利用することにより、塔内温度測定段数を合計5段程度としても、十分に高い精度で製品組成が推定できることがわかった。さらに、定常状態モデル、静的モデル、動的モデルの3種類の組成推定モデルを比較し、動的モデルの利用によって推定精度を大幅に改善できることを示した。

構築した動的PLSモデルに基づいて計算される製品組成推定値を制御量として利用する製品組成推定制御について検討した。単純な組成推定制御系を採用した場合、組成制御を強くすると推定精度が低下してしまうという状況が発生したため、期待に反して塔内温度制御よりも制御性能を改善することはできなかった。この原因は、温度制御下で得られたモデル構築用データが組成推定制御下での運転状態を十分に代表していなかったことにある。しかし、温度制御時に制御パラメータを変化させることによって、運転データがより広範な運転状態を代表することに着目し、そのようなデータから構築した組成推定モデルを組成推定制御に適用することによって、推定精度および制御性能を改善できることを示した。さらに、製品組成をフィードバック制御すると同時に、原料外乱および塔他端における操作が製品組成に与える影響をフィードフォワード的に補償するために、塔内温度制御を内側ループに、製品組成制御を外側ループに採用したカスケード制御系が有効であることを示した。

4.7 記号説明

Symbols

a	parameter	
D	distillate flow rate	[kmol/h]
d	unmesured disturbance	
\hat{d}	estimate of d	
EPV	Explained Prediction Variance	[%]
F	feed flow rate	[kmol/h]
F_u, F_d, G_u, G_d	transfer function	
K	propotional gain	[-]
L	reflux flow rate	[kmol/h]
MSE	Mean Squared Error of Prediction	
MSEP	Mean Squared Error	
N	number of samples	
P	pressure	[Pa]
Q	reboiler heat duty	[GJ/h]
u	manipulated variable and measured disturbance	
T	temperature	[K]
x	mole fraction of key component in product	[-]
\bar{x}	mean of measurements of x	[-]
\hat{x}	estimate of x	[-]
x_B	mole fraction of key component in bottom product	[-]
x_D	mole fraction of key component in distillate product	[-]
y	measured variable	

Superscripts

(*MeOH*) methanol

(<i>EtOH</i>)	ethanol
(<i>PrOH</i>)	propanol
(<i>BuOH</i>)	butanol
T	transpose
$+$	pseudo inverse

4.8 引用文献

1. Buckley, P. S., W. L. Luyben, and J. P. Shunta, "Design of distillation column control system", 229-242, Instrument Society of America (1985)
2. 中溝高好, "信号解析とシステム同定", コロナ社, 現代制御シリーズ 1 (1988)
3. Weber, R. and C. B. Brosilow, "The use of secondary measurements to improve control", *AIChE J.*, **18**, 3, 614-623 (1972)
4. Joseph, B. and C. B. Brosilow, "Inferential control of processes: Part I. Steady state analysis and design", *AIChE J.*, **24**, 3, 485-492 (1978)
5. Keller, J. P. and D. Bonvin, "Selection of inputs for the purpose of model reduction and controller design", *Preprints of IFAC World Congress on Automatic Control*, 226-231, Munich (1987)
6. Mejdell, T. and S. Skogestad, "Estimation of distillation compositions from multiple temperature measurements using Partial-Least-Squares regression", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30**, 2543-2555 (1991)
7. Mejdell, T. and S. Skogestad, "Composition estimator in a pilot-plant distillation column using multiple temperatures", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30**, 2555-2564 (1991)
8. Kresta, J. V., T. E. Marlin, J. F. MacGregor, "A general method for the development of inferential control schemes using PLS", *Preprints of*

- 4th International Symposium on Process Systems Engineering (PSE)*,
II, 14.1-14.14, Quebec, Canada (1991)
9. Kresta, J. V., T. E. Marlin, J. F. MacGregor, "Development of inferential process models using PLS", *Comp. Chem. Engng*, **18**, 597-611 (1994)
 10. Shin, J., S. Park, and M. Lee, "Design of a composition estimator for inferential control of high-purity distillation columns", *Preprints of Chemical Process Control - V (CPC-V)*, Tahoe City, California (1996)
 11. Fujii, H., S. Lakshminarayanan, and S. L. Shah, "Application of the PLS technique to the estimation of distillation tower top composition", *Preprints of IFAC symposium on Advanced Control of Chemical Processes (ADCHEM)*, 529-534, Banff, Canada (1997)
 12. 鈴木剛, "基礎講座 プロセス制御 第7回 蒸留塔の制御", *Petrotech*, **17**, 4, 84-87 (1994)
 13. Rademaker, O., J. E. Rijnsdorp, and A. Maarleveld, "Dynamics and control of continuous distillation units", Elsevier, Amsterdam (1975)
 14. Tolliver, T. L. and L. C. McCune, "Finding the optimum temperature control trays for distillation columns", *InTech*, **27**, 9, 75-80 (1980)
 15. Wood, C. E., "Tray selection for column temperature control", *Chem. Eng. Prog.*, **64**, 1, 85-88 (1968)
 16. Moore, C., J. Hackney, and D. Canter, "Selecting sensor location and type for multivariable processes", In: *Shell Process Control Workshop* (D. M. Prett and M. Morari, Ed.), 291-308, Butterworth, Boston (1987)
 17. Joseph, B., C. B. Brosilow, J. C. Howell, and W. R. D. Kerr, "Multi-temps give better control", *Hydrocarbon Processing*, March, 127-131 (1976)
 18. Skogestad, S. and M. Morari, "Understanding the dynamic behavior of distillation columns", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **27**, 1848-1862 (1988)
 19. Luyben, W. L., "Control of distillation columns with sharp tempera-

- ture profiles”, *AIChE J.*, **17**, 713-718 (1971)
20. Whitehead, D. B. and M. Parnis, “Computer control improves ethylene plant operation”, *Hydrocarbon Processing*, Nov., 105-108 (1987)
 21. Luyben, W. L., “Feedback control of distillation columns by double differential temperature control”, *I&EC Fundamentals*, **8**, 4, 739-744 (1969)
 22. Boyd, D. M., “Fractionation column control”, *Chem. Eng. Prog.*, **71**, 6, 55-60 (1975)
 23. Luyben, W. L., “Profile position control of distillation columns with sharp temperature profiles”, *AIChE J.*, **18**, 1, 238-240 (1972)
 24. Bozenhardt, H. F., “Modern control tricks solve distillation problems”. *Hydrocarbon Processing*, June, 47-50 (1988)
 25. Mejdell, T. and S. Skogestad, “Output estimation using multiple secondary measurements: high-purity distillation”, *AIChE J.*, **39**, 10, 1641-1653 (1993)
 26. Strang, G. (山口昌哉, 井上昭 訳), “線形代数とその応用”, 産業図書 (1978)
 27. 片山徹, “システム同定入門”, 朝倉書店, システム制御情報ライブラリー-9 (1994)
 28. Brosilow, C. B. and M. Tong, “Inferential control of processes: Part II. The structure and dynamics of inferential control systems”. *AIChE J.*, **24**, 3, 492-500 (1978)
 29. Joseph, B. and C. B. Brosilow, “Inferential control of processes: Part III. Construction of optimal and suboptimal dynamic estimators”. *AIChE J.*, **24**, 3, 500-509 (1978)
 30. 須田信英, “PID 制御”, 朝倉書店, システム制御情報ライブラリー-6 (1992)

第5章

2型モデル予測制御系の設計

5.1 緒言

プロセス制御の分野では、非常に多くの適用事例を通して、モデル予測制御が高度制御手法の1つとして確固たる地位を築いている^[1]。初期のモデル予測制御は、安定プロセスを制御対象として、ステップ状の設定値変更や外乱に対して定常偏差をなくすように設計されていた。多くの化学プロセスにおける制御目的が最適な定常状態運転の実現であることを考えると、従来のモデル予測制御の設計仕様は制御目的に合致するものである。しかし、化学産業界は製品の高品質化と省資源省エネルギー化の推進を余儀なくされており、このために、運転のさらなる高度化が重要な課題となってきている。

変種変量生産を実現するためのバッチプロセスにおいては、運転は無論定常ではありえず、ステップ状設定値変更が制御目的とはならない。また、高分子重合反応プロセスで見られる銘柄変更に際して、切り替え時間を短縮して損失を最小限に抑えるためには、運転状態をある最適な軌道に従って変化させなければならない。しかしながら、従来のモデル予測制御によってこれらの制御問題に十分対応することはできない。

ステップ状とは限らない一般的な設定値変更や外乱に対して定常偏差をなくすことを目的としたモデル予測制御アルゴリズムが Rechalet らによって提案されている^[2,3]。このアルゴリズムの特徴は、

1. 未来の操作量を既知の関数の線形結合で表現する。
2. 未来のプロセスとモデルとの出力の差を予測する。

の2点に集約される。サーボ補償および漸近的外乱除去をモデル予測制御の枠組みの中で実現するためには、未来の操作量と未来のプロセスとモデルとの出力の差に関してアルゴリズムの変更が不可欠であり、Rechalet らのアルゴリズムはその候補の1つである。しかし、一般的な設定値変更や外乱を対象としているために、アルゴリズムが複雑になっていることは否定できない。例えば、未来の操作量を表現するために既知の関数を選択する必要があるが生じるが、この関数は設定値およびプロセスの特性に依存すると述べられており、汎用的かつ具体的な関数の選択方法については言及されていない。設定値の動特性が比較的単純な場合、すなわち設定値がステップ状やランプ状に変化する場合については、具体的な関数が提案されているが、制御区間が導入されていないため、未来の操作量を極めて限定的にしか変化させることができない。このため、従来のモデル予測制御に比べて、制御性能が低下すると考えられる。

現実のプロセス制御においては、制御の高度化が必要であるとはいえ、ランプ状よりも高次の設定値変更や外乱に対応しなければならない状況は極めて少ないと考えられる。したがって、サーボ補償および漸近的外乱除去を実現するためにアルゴリズムを複雑にし、その柔軟性を犠牲にするよりも、ランプ状の設定値変更や外乱に対して高い制御性能を実現できるアルゴリズムを開発することが実用上有益であろう。この観点から、本研究では、ランプ状の設定値変更や外乱に対して定常偏差をなくすことのできる2型モデル予測制御アルゴリズムの開発を目的とする。

モデル予測制御によってサーボ補償と漸近的外乱除去とを実現するアルゴリズムが Ohno らによっても提案されている^[4]。そのアルゴリズムの特徴は、出力の予測式中にフィルタを導入することによって、設定値および外乱の動特性を考慮して出力を予測する点である。これは、Rechalet らの提案したアルゴリズムの特徴2と本質的に同一のものである。Ohno らは導入するフィルタが満たすべき条件を導出するとともに、得られるコントローラが内部モデル原理に従うことを示した。しかし、Richalet らのアルゴリズムと同様、制御区間が導入されていない

ため、未来の操作量を極めて限定的にしか変化させることができないという欠点を有する。さらに、一致区間が1である一段予測制御についてのみの検討となっているため、従来のモデル予測制御に比べて、自由度の低いアルゴリズムになっている。

本研究では、上述のアルゴリズムをさらに拡張することによって、安定プロセスおよび積分要素を有するプロセスに対して適用可能な2型モデル予測制御アルゴリズムを提案する。制御区間および一致区間を任意に設定できるようにすることにより、自由度を高め、制御性能の向上を目指す。また、未来の操作量の与え方や予測式中に導入するフィルタの設計方法を具体的に示し、アルゴリズムの有効性をシミュレーションによって検証する。

5.2 安定プロセスに対する2型モデル予測制御系の設計

本節では、1入力1出力の安定プロセスを対象として、2型の制御系を実現することができるモデル予測制御アルゴリズムを提案する。

5.2.1 アルゴリズム

新たに提案するモデル予測制御のアルゴリズムについて説明する。制御対象であるプロセスは次式で与えられるとする。

<プロセス>

$$\begin{aligned}y(t) &= dG_P(d)u(t) + v(t) \\ &= \frac{dQ(d)}{P(d)}u(t) + v(t)\end{aligned}\quad (5.1)$$

ここで、 y, u, v はそれぞれ、プロセスの出力 (制御量)、入力 (操作量)、外乱であり、 dG_P はプロセスの離散時間伝達関数である。 P, Q は共に遅延演算子 d の多項式である。本節では安定プロセスのみを対象とするため、 P は安定多項式 (複素平面上で単位円内にゼロ点を持たない多項式) であるとする。さらに、 P, Q は共通因子を持たないものとする。

このプロセスのモデルが次式で与えられるとする。

<モデル>

$$y_M(t) = dG_M(d)u(t) \quad (5.2)$$

ここで、 y_M はモデルの出力、 dG_M はモデルの離散時間伝達関数である。プロセスが安定であることを前提としているため、インパルス応答モデルを利用することができる。このとき、 dG_M は次式で表される。

$$dG_M = \sum_{i=1}^N g_i d^i \quad (5.3)$$

ここで、 g_i は i 番目のインパルス応答係数、 N はインパルス応答の打ち切り次数である。

未来のプロセス出力を予測するために、従来のモデル予測制御では、次の予測式が利用されている。

<従来の予測式>

$$y_P(t+k) = y_M(t+k) + y(t) - y_M(t) \quad (5.4)$$

ここで、 y_P が出力の予測値である。この予測式では、外乱、測定ノイズおよびモデル化誤差の影響、すなわちプロセスとモデルとの出力の差 $y(t) - y_M(t)$ が、現時刻以降も一定に保たれると仮定している。この予測式を採用しているために、従来のモデル予測制御では、一定値に保たれるステップ状の外乱や設定値変更に対してのみ、オフセットフリーな制御系を実現できる。すなわち、従来のモデル予測制御系は1型である。

本研究の目的は、プロセスとモデルとの出力の差 $y(t) - y_M(t)$ に適切な動特性を持たせることによって、ランプ状の動特性を持つ外乱や設定値変更に対してオフセットフリーとなるモデル予測制御系、すなわち2型モデル予測制御系を実現することである。そこで、従来の予測式に予測フィルタ $F^{[k]}(d)$ を導入し、未来の予測値を次式に基づいて計算する。

<予測式>

$$y_P(t+k) = y_M(t+k) + F^{[k]}(d)(y(t) - y_M(t)) \quad (5.5)$$

ここで、予測フィルタ $F^{[k]}(d)$ は遅延演算子 d の多項式とする。

未来のモデル出力 $y_M(t+k)$ は, Eqs. (5.2), (5.3) を用いて,

$$\begin{aligned} y_M(t+k) &= \bar{G}_M^{[k]} u(t) \\ &= \sum_{i=1}^k g_i d^{i-k} u(t) + \sum_{i=1}^{N-k} g_{i+k} d^i u(t) \end{aligned} \quad (5.6)$$

と表現することができる。Eq. (5.6) の右辺第1項が未来の操作量に関連する項であり, 第2項が過去の操作量に関連する項である。

従来のモデル予測制御では, Eq. (5.4) を用いて未来のプロセス出力を予測する際に, 未来の操作量について

$$u(t+k) = u(t+M-1), \quad \text{for } k \geq M-1 \quad (5.7)$$

という条件を設定している。すなわち, 現時刻から M ステップにわたる制御区間 $[t, t+M-1]$ では操作量を適切に変化させ, それ以降は操作量を $u(t+M-1)$ で一定に保つと仮定して, 未来の出力を予測している。この仮定はステップ状の設定値変更や外乱に対しては有効である。しかし, 安定プロセスを対象とする場合, ランプ状の設定値変更や外乱に対して定常偏差をゼロにするためには, 操作量もランプ状に変化させなければならない。言い換えると, 未来の操作量を一定に保つという仮定を用いる限り, ランプ状の設定値変更や外乱に対してオフセットフリーな制御系を実現することはできない。ただし, 一致区間の幅 P を1とする特別な場合にはオフセットフリーな制御系を実現できる。

以上をふまえて, 2型の制御系を実現するために, 制御区間 $[t, t+M-1]$ では操作量を適切に変化させ, それ以降は操作量の傾きを一定に保つという仮定の適用を提案する。すなわち, 未来の操作量について,

$$\begin{aligned} u(t+k) &= u(t+M-1) + (k-M+1)(u(t+M-1) - u(t+M-2)) \\ &= (k-M+2)u(t+M-1) - (k-M+1)u(t+M-2) \\ &\quad \text{for } k \geq M-1 \end{aligned} \quad (5.8)$$

という条件を設定する。この場合, $y_M(t+k)$ を次式のように表現することができる。

$$y_M(t+k) = \bar{G}_f^{[k]} u_f + \bar{G}_o^{[k]} u(t) \quad (5.9)$$

ここで,

$$\mathbf{u}_f = \left[u(t) \quad u(t+1) \quad \cdots \quad u(t+M-2) \quad u(t+M-1) \right]^T \quad (5.10)$$

$$\bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} = \left[\begin{array}{cccc} g_k & g_{k-1} & \cdots & g_{k-M+2} - \sum_{i=M-1}^{k-1} g_{k-i}(i-M+1) \\ & & & \sum_{i=M-1}^{k-1} g_{k-i}(i-M+2) \end{array} \right] \quad (5.11)$$

$$\bar{\mathbf{G}}_o^{[k]} = \sum_{i=1}^{N-k} g_{i+k} d^i \quad (5.12)$$

と定義する。

ここでは、予測式に基づいて算出される予測値 y_P が、一致区間 $[t+L, t+L+P-1]$ において、参照軌道 (目標値) y_R にできるだけ一致するように、現時刻以降の操作量 \mathbf{u}_f を決定する。ここでは、次式で表される参照軌道を用いる。

< 参照軌道 >

$$y_R(t+k) = r(t+k) - \alpha^{k-L+1}(r(t) - y(t)) \quad (5.13)$$

ここで、 r は設定値であり、次式で表現される動特性を持つものとする。

$$(1 - dR(d))r(t) = 0 \quad (5.14)$$

R は遅延演算子 d の多項式であり、設定値がステップ状に変化する場合には $R(d) = 1$ 、ランプ状に変化する場合には $R(d) = 2 - d$ となる。設定値変更の表現式は次のように書き換えることもできる。

$$r(t+k) = R^k(d)r(t) \quad (5.15)$$

なお、参照軌道の形状を決定するパラメータ α は、制御系のチューニングパラメータの1つである。Eq. (5.13) から明らかなように、 α を 0 とすると参照軌道 y_R は設定値 r と一致する。

制御則を規定する評価関数として、次の Quadratic な評価関数を用いる。

<評価関数>

$$J = \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 (y_P(t+k) - y_R(t+k))^2 \quad (5.16)$$

ここで、 ψ_k は α と同様、制御系のチューニングパラメータであるが、通常は1とする。

このように、本節では、参照軌道を利用するアルゴリズムについて検討する。従来のモデル予測制御においては、参照軌道を用いる制御方法と入力重みを用いる制御方法とがあり、これらの方法を併用することも可能である。ところが、入力重みを用いる方法では、本節で提案するアルゴリズムによって2型の制御系を実現することができないため、参照軌道のみを用いるアルゴリズムを採用する。

モデル予測制御では、Eq. (5.16) の評価関数を最小にする操作量を各サンプリング時刻で求めることになる。したがって、制御則は次式で与えられる。

<制御則>

$$\min_{\mathbf{u}_f} J \quad (5.17)$$

以上が提案するモデル予測制御のアルゴリズムである。

本研究では、入出力に制約条件が存在する場合のアルゴリズムについては特に言及しない。しかしながら、考慮すべき制約条件が上下制限約のように線形不等式で与えられる場合には、操作量の決定問題を二次計画問題として扱うことができる。この点については、新しく提案するモデル予測制御アルゴリズムは従来のアルゴリズムと同じである。

5.2.2 コントローラ

第5.2.1節で示した制御則から導かれるコントローラは、必要条件として、

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{u}_f} = \mathbf{0} \quad (5.18)$$

を満たさなければならない。ここでは、この必要条件に基づいて、コントローラの表現式を求める。実際に Eq. (5.18) を計算すると、次の関係式を得る。

$$\frac{1}{2} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{u}_f} = \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 [\bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} \mathbf{u}_f + \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \{(\bar{\mathbf{G}}_o^{[k]} - F^{[k]} d G_M) \mathbf{u}(t)$$

$$\begin{aligned}
& - (R^k - \alpha^{k-L+1})r(t) + (F^{[k]} - \alpha^{k-L+1})y(t) \Big\} \\
& = 0
\end{aligned} \tag{5.19}$$

Eq. (5.19) を \mathbf{u}_f について整理すると、次式を得る。

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_f = & \left(\sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} \right)^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \left\{ (R^k - \alpha^{k-L+1})r(t) \right. \\
& \left. - (F^{[k]} - \alpha^{k-L+1})y(t) - (\bar{\mathbf{G}}_o^{[k]} - F^{[k]}dG_M)u(t) \right\}
\end{aligned} \tag{5.20}$$

計算の結果得られる未来の操作量は \mathbf{u}_f であるが、実際にプロセスに付加される、すなわちコントローラの出力となるのは、現時刻 t の値 $u(t)$ のみである。そこで、

$$u(t) = \mathbf{h}^T \mathbf{u}_f \tag{5.21}$$

$$\mathbf{h} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^T \tag{5.22}$$

に注意して、Eq. (5.20) を $u(t)$ について整理すると、次のコントローラの表現式を得る。

$$\begin{aligned}
& \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left\{ \mathbf{D}\mathbf{h} + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} (\bar{\mathbf{G}}_o^{[k]} - F^{[k]}dG_M) \right\} u(t) \\
& = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \left\{ (R^k - \alpha^{k-L+1})r(t) - (F^{[k]} - \alpha^{k-L+1})y(t) \right\}
\end{aligned} \tag{5.23}$$

ここで、

$$\mathbf{D} = \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} \tag{5.24}$$

と定義している。

Eq. (5.23) は簡単に次のように書き表すことができる。

$$C_D(d)u(t) = C_{N1}(d)r(t) - C_{N2}(d)y(t) \tag{5.25}$$

ここで,

$$C_D = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left\{ \mathbf{D} \mathbf{h} + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} (\bar{\mathbf{G}}_o^{[k]} - F^{[k]} d G_M) \right\} \quad (5.26)$$

$$C_{N1} = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} (R^k - \alpha^{k-L+1}) \quad (5.27)$$

$$C_{N2} = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} (F^{[k]} - \alpha^{k-L+1}) \quad (5.28)$$

である。Eq. (5.25) は、この制御系が2自由度制御系であることを示している。ただし、 $F^{[k]} = R^k$ である場合には、1自由度制御系となる。なお、従来のモデル予測制御系は $F^{[k]} = R^k = 1$ である場合のみを対象としており、1自由度制御系であることがわかる。

5.2.3 閉ループ方程式

第5.2.2節で導出したコントローラの表現式 Eq. (5.25) に基づいて、制御系の閉ループ方程式を求める。Eqs. (5.1), (5.25) から、次の閉ループ方程式を得る。

$$(C_D + d G_P C_{N2}) e(t) = \left\{ C_D + d G_P (C_{N2} - C_{N1}) \right\} r(t) - C_D v(t) \quad (5.29)$$

ここで、 $e(t)$ は偏差であり、

$$e(t) = r(t) - y(t) \quad (5.30)$$

で定義される。第5.2.4節以降において、閉ループ方程式 Eq. (5.29) に基づいて制御系の漸近的特性について議論するために、Eq. (5.29) を整理しておく必要がある。

Eq. (5.6) において、 M ステップの制御区間を越える未来の操作量に関連する項を、

$$S^{[k]}(d) = \sum_{i=M-1}^{k-1} g_{k-i} d^{-i} \quad (5.31)$$

とおくと、 $\bar{G}_M^{[k]}$ を

$$\begin{aligned}\bar{G}_M^{[k]} &= dG_M d^{-k} - S^{[k]}(d) \\ &+ \sum_{i=M-1}^{k-1} g_{k-i} \{(i-M+2) - (i-M+1)d\} d^{-M+1}\end{aligned}\quad (5.32)$$

と表すことができる。さらに、Eq. (5.9) において、

$$\mathbf{d}_f = \begin{bmatrix} 1 & d^{-1} & \dots & d^{-M+1} \end{bmatrix}^T \quad (5.33)$$

と定義すると、

$$\bar{G}_M^{[k]} = \bar{G}_f^{[k]} \mathbf{d}_f + \bar{G}_o^{[k]} \quad (5.34)$$

が成立する。最終的に、Eqs. (5.32), (5.34) より、 $\bar{G}_o^{[k]}$ の表現式

$$\begin{aligned}\bar{G}_o^{[k]} &= dG_M d^{-k} - \bar{G}_f^{[k]} \mathbf{d}_f + \sum_{i=M-1}^{k-1} g_{k-i} \{(i-M+2)d^{-M+1} \\ &- (i-M+1)d^{-M+2} - d^{-i}\}\end{aligned}\quad (5.35)$$

を得る。

以上をふまえて、Eq. (5.29) の両辺に $d^{L+P-1}P$ を乗じて整理すると、次の閉ループ方程式を得る。

$$A(d)e(t) = P(d)B(d)(r(t) - v(t)) + dQ(d)C(d)r(t) \quad (5.36)$$

ここで、

$$\begin{aligned}A &= \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left[\mathbf{D} \mathbf{h} d^{L+P-1} P + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{G}_f^{[k]T} \left\{ P(d^{L+P-1} \bar{G}_o^{[k]} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - d^{L+P-1} F^{[k]} dG_M \right) + d^{L+P} Q(F^{[k]} - \alpha^{k-L+1}) \right\} \end{aligned}\quad (5.37)$$

$$\begin{aligned}B &= \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left\{ \mathbf{D} \mathbf{h} d^{L+P-1} + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{G}_f^{[k]T} (d^{L+P-1} \bar{G}_o^{[k]} \right. \\ &\quad \left. - d^{L+P-1} F^{[k]} dG_M \right\} \end{aligned}\quad (5.38)$$

$$C = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{G}_f^{[k]T} d^{L+P-1} (F^{[k]} - R^k) \quad (5.39)$$

である。

5.2.4 予測フィルタの設計条件

提案するモデル予測制御によって、ロバストなサーボ補償と漸近的外乱除去とを同時に実現するために、制御系が満たすべき必要十分条件を導出する。そのために、まず、設定値 r と外乱 v の動特性が次のように与えられるとする。

$$r(d) = \frac{r_0}{1 - dR(d)} \quad (5.40)$$

$$v(d) = \frac{v_0}{1 - dV(d)} \quad (5.41)$$

ここで、 R, V はそれぞれ設定値と外乱の動特性を規定する遅延演算子 d の多項式である。これらの表現を用いて Eq. (5.36) を変換すると、次の閉ループ方程式を得る。

$$\begin{aligned} Ae(d) &= PB(r(d) - v(d)) + dQC r(d) \\ &= PB\left(\frac{r_0}{1 - dR} - \frac{v_0}{1 - dV}\right) + dQC \frac{r_0}{1 - dR} \end{aligned} \quad (5.42)$$

この閉ループ方程式より、制御系がロバストなサーボ補償と漸近的外乱除去とを同時に実現するための必要十分条件は以下のようにになる。

<必要十分条件>

制御系の閉ループ方程式が Eq. (5.42) で表される場合、その制御系がロバストなサーボ補償と漸近的外乱除去とを同時に実現するための必要十分条件は、次の3つの条件がすべて満たされることである。

S1-1. 多項式 A が安定多項式である。

S1-2. 多項式 B が多項式 $1 - dR$ および $1 - dV$ の不安定因子の最小公倍多項式を含む。

S1-3. 多項式 C が多項式 $1 - dR$ の不安定因子を含むか、あるいは恒等的にゼロとなる。

条件 S1-1 は制御系が安定であることを要求するものである。ここで提案するモデル予測制御では、複数のチューニングパラメータを用いて、制御系のロバスト安定性を確保することになる。すなわち、制御系が安定であるか否かは、実プロセスの動特性とチューニングに依存する。以下では、適切なチューニングによって制御系は安定化できる、すなわち条件 S1-1 は満たされるとして議論を進める。

一方、条件 S1-2, S1-3 は、それぞれ以下のように表すことができる。

S1-2'. $B = (1 - dW(d))X(d)$ を満たす、恒等的にゼロではない多項式 X が存在する。ここで、 $1 - dW$ は $1 - dR$ および $1 - dV$ の不安定因子の最小公倍多項式である。

S1-3'. $C = (1 - dR_-(d))Y(d)$ を満たす多項式 Y が存在する。ここで、 $1 - dR_-$ は多項式 $1 - dR$ の不安定因子である。

以上より、ロバストなサーボ補償と漸近的外乱除去とを同時に実現する制御系を設計するためには、制御系が安定であることを前提として、次の2式を同時に満たす予測フィルタ $F^{[k]}$ を求めればよいことがわかる。

$$\begin{aligned} h^T D^{-1} \left\{ Dh d^{L+P-1} + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{G}_f^{[k]T} (d^{L+P-1} \bar{G}_o^{[k]} - d^{L+P-1} F^{[k]} dG_M) \right\} \\ = (1 - dW)X \end{aligned} \quad (5.43)$$

$$h^T D^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{G}_f^{[k]T} d^{L+P-1} (F^{[k]} - R^k) = (1 - dR_-)Y \quad (5.44)$$

5.2.5 2型制御系の設計

2型の制御系を実現するために制御系が満たすべき必要十分条件を導出し、実際に予測フィルタの設計を行う。

予測フィルタの設計条件

第5.2.4節で導出した必要十分条件に基づいて、制御系が2型となるための必要十分条件を示す。この場合、設定値 r と外乱 v の動特性として、以下のようなランプ状の動特性を考慮すればよい。

$$r(d) = \frac{r_0}{1-dR(d)} = \frac{r_0}{(1-d)^2}, \quad R(d) = 2-d \quad (5.45)$$

$$v(d) = \frac{v_0}{1-dV(d)} = \frac{v_0}{(1-d)^2}, \quad V(d) = 2-d \quad (5.46)$$

これより、制御系が2型となるための必要十分条件は以下ようになる。

<必要十分条件>

制御系の閉ループ方程式が Eq. (5.42) で表される場合、その制御系が2型となるための必要十分条件は、次の3つの条件がすべて満たされることである。

S2-1. 多項式 A が安定多項式である。

S2-2. 多項式 B が多項式 $(1-d)^2$ を含む。

S2-3. 多項式 C が多項式 $(1-d)^2$ を含むか、あるいは恒等的にゼロとなる。

条件 S2-1 は制御系が安定であることを要求するものである。以下では、適切なチューニングによってこの条件を満たすことができると仮定する。

一方、条件 S2-2, S2-3 はそれぞれ以下のように表すことができる。

S2-2'. $B = (1-d)^2 X(d)$ を満たす、恒等的にゼロではない多項式 X が存在する。

S2-3'. $C = (1-d)^2 Y(d)$ を満たす多項式 Y が存在する。

以上より、2型の制御系を設計するためには、制御系が安定であることを前提

として、次の2式を同時に満たす予測フィルタ $F^{[k]}$ を求めればよいことがわかる。

$$\begin{aligned} \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left\{ \mathbf{D} \mathbf{h} d^{L+P-1} + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} (d^{L+P-1} \bar{\mathbf{G}}_o^{[k]} - d^{L+P-1} \mathbf{F}^{[k]} d \mathbf{G}_M) \right\} \\ = (1-d)^2 X \end{aligned} \quad (5.47)$$

$$\mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} d^{L+P-1} \{ \mathbf{F}^{[k]} - (2-d)^k \} = (1-d)^2 Y \quad (5.48)$$

Eqs. (5.47), (5.48) から、2型の制御系を設計するために予測フィルタが満たさなければならない条件を導出する。

まず、Eq. (5.47) について検討する。Eq. (5.35) を用いることにより、Eq. (5.47) を次式のように書き換えることができる。

$$\begin{aligned} \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left[\mathbf{D} \mathbf{h} d^{L+P-1} + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \left\{ d^{L+P-k} \mathbf{G}_M - d^{L+P-1} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} d_f \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{i=M-1}^{k-1} g_{k-i} \{ (i-M+2) d^{L+P-M} - (i-M+1) d^{L+P-M+1} \right. \right. \\ \left. \left. - d^{L+P-1-i} \} - d^{L+P-1} \mathbf{F}^{[k]} d \mathbf{G}_M \right\} \right] = (1-d)^2 X \end{aligned} \quad (5.49)$$

ここで、Eq. (5.49) の左辺を次のように3つの多項式に分割し、それぞれについて検討する。

$$f_{11}(d) = d^{L+P-1} \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left(\mathbf{D} \mathbf{h} - \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} d_f \right) \quad (5.50)$$

$$\begin{aligned} f_{12}(d) = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \left[\sum_{i=M-1}^{k-1} g_{k-i} \{ (i-M+2) d^{L+P-M} \right. \\ \left. - (i-M+1) d^{L+P-M+1} - d^{L+P-1-i} \} \right] \end{aligned} \quad (5.51)$$

$$f_{13}(d) = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} d \mathbf{G}_M (d^{L+P-1-k} - d^{L+P-1} \mathbf{F}^{[k]}) \quad (5.52)$$

最初に、 f_{11} を整理すると、次式が得られる。

$$f_{11}(d) = d^{L+P-1} \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \mathbf{D} (\mathbf{h} - d_f) \quad (5.53)$$

ここで,

$$h - d_f = \left[0 \quad -d^{-1} \quad \dots \quad -d^{-M+1} \right]^T \quad (5.54)$$

であることに注意すると,

$$f_{11}(d) = 0 \quad (5.55)$$

となる。

f_{12} については,

$$f_{12}(1) = 0 \quad (5.56)$$

$$f'_{12}(1) = 0 \quad (5.57)$$

となることから, f_{12} が $(1-d)^2$ を含むことは明らかである。

ここまでの検討結果より, Eq. (5.49) の左辺が $(1-d)^2$ を因子としてもつためには, f_{13} が $(1-d)^2$ を含まなければならないことがわかる。このための条件は, $d^{L+P-1-k} - d^{L+P-1}F^{[k]}$ に着目すると,

$$(d^{L+P-1-k} - d^{L+P-1}F^{[k]}) \Big|_{d=1} = 0 \quad (5.58)$$

$$(d^{L+P-1-k} - d^{L+P-1}F^{[k]})' \Big|_{d=1} = 0 \quad (5.59)$$

で与えられる。これを実際に計算すると, 予測フィルタが満たすべき条件として

$$F^{[k]}(1) = 1 \quad (5.60)$$

$$F^{[k]}'(1) = -k \quad (5.61)$$

が得られる。

次に, Eq. (5.48) について検討する。 $F^{[k]} - (2-d)^k$ に着目すると, Eq. (5.48) の左辺が $(1-d)^2$ を因子としてもつための条件は,

$$(F^{[k]} - (2-d)^k) \Big|_{d=1} = 0 \quad (5.62)$$

$$(F^{[k]} - (2-d)^k)' \Big|_{d=1} = 0 \quad (5.63)$$

で与えられる。これを実際に計算すると, 予測フィルタが満たすべき条件として

$$F^{[k]}(1) = 1 \quad (5.64)$$

$$F^{[k]}'(1) = -k \quad (5.65)$$

が得られる。これらは、Eqs. (5.60), (5.61) に等しい。なお、 $L = P = 1$ の場合、すなわち $k = 1$ のみの場合には、予測フィルタ $F^{[1]}$ が1次以下であれば、 $F^{[1]} - (2 - d)$ は1次以下の多項式となり、Eq. (5.48) の左辺が $(1 - d)^2$ を因子として持つことはない。しかし、 $k = 1$ の場合、1次の予測フィルタは

$$F^{[1]} = 2 - d \quad (5.66)$$

しかありえず、このとき、Eq. (5.48) の左辺は恒等的にゼロとなる。すなわち、条件 S2-3 は満たされる。

以上より、2型の制御系を実現するためには、予測フィルタが Eqs. (5.60), (5.61) を満たせば十分であることが示された。言い換えると、Eqs. (5.60), (5.61) を満たす予測フィルタを設計すれば、制御系は（安定であれば）必ず2型の制御系となる。

予測フィルタの設計1：最低次予測フィルタの導出

条件式 Eqs. (5.60), (5.61) を満たす予測フィルタを設計する。一般的に、予測フィルタを N 次の多項式として

$$F^{[k]} = \sum_{n=0}^N a_n^{[k]} d^n \quad (5.67)$$

と表す。このとき、条件式 Eqs. (5.60), (5.61) は、

$$\begin{aligned} F^{[k]}(1) &= \sum_{n=0}^N a_n^{[k]} \\ &= 1 \end{aligned} \quad (5.68)$$

$$\begin{aligned} F^{[k]'}(1) &= \sum_{n=1}^N n a_n^{[k]} \\ &= -k \end{aligned} \quad (5.69)$$

となる。例えば、1次の予測フィルタを設計する場合には、

$$F^{[k]}(1) = a_0^{[k]} + a_1^{[k]}$$

$$= 1 \quad (5.70)$$

$$F^{[k]'}(1) = a_1^{[k]} \\ = -k \quad (5.71)$$

という条件から、予測フィルタは

$$F^{[k]} = 1 + k(1 - d) \quad (5.72)$$

となる。

この最低次（1次）の予測フィルタが予測式の中で持つ物理的な意味を、以下のように解釈することができる。提案する予測式 Eq. (5.5) は、プロセス出力の予測値 y_P とモデル出力 y_M との誤差を e_P と定義すると、

$$e_P(t+k) = F^{[k]} e_P(t) \quad (5.73)$$

と書き換えることができる。予測フィルタとして Eq. (5.72) を採用する場合、Eq. (5.73) は次式のようになる。

$$e_P(t+k) = \{1 + k(1 - d)\} e_P(t) \\ = e_P(t) + k\{e_P(t) - e_P(t-1)\} \quad (5.74)$$

この式は、Fig. 5.1 に示すように、現時刻 t 以降において、誤差 e_P がランプ状に変化することを表している。すなわち、Eq. (5.72) の予測フィルタは、本節で想定しているランプ状外乱に対応するために、プロセスとモデルとの出力の差にランプ状の動特性を持たせる役割を担っている。

Eq. (5.72) で表される1次の予測フィルタは直感的に理解しやすいフィルタであるが、モデル化誤差や測定ノイズの影響を受けやすいという欠点を有する。これらの欠点の原因を明らかにするために、Eq. (5.74) に基づいて、予測フィルタの機能について再度検討する。

Eq. (5.74) は、前述の通り、現時刻 t 以降において、誤差 e_P がランプ状に変化することを表している。ここで、

$$e_P(t) = y(t) - y_M(t) \quad (5.75)$$

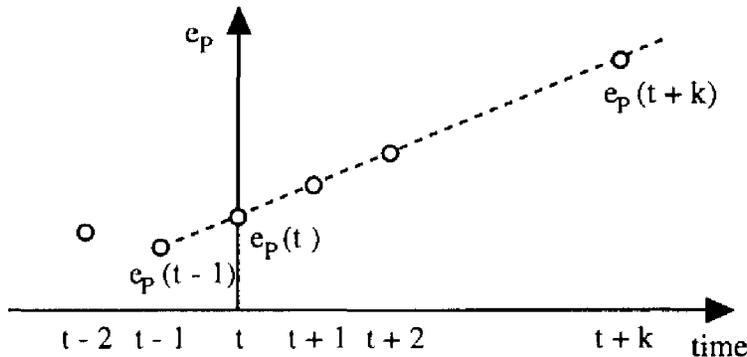


Fig. 5.1 Effect of using prediction filter

である。系に外乱が入らない場合を考えると、プロセスとモデルの出力差はモデル化誤差のみとなる。モデル化誤差を e_M で表すと、Eq. (5.74) は

$$e_p(t+k) = e_M(t) + k(e_M(t) - e_M(t-1)) \quad (5.76)$$

となる。この式は、モデル化誤差 e_M が現時刻以降においてランプ状に変化することを表している。さらに、その傾きは現時刻と1ステップ前の時刻におけるモデル化誤差の変化幅から決定される。しかし、現実には、モデル化誤差がランプ状に変化するという状況は考えにくい。したがって、この予測フィルタを用いると、未来におけるモデル化誤差の影響を過大に見積もってしまうために正確な予測が行えず、その結果、コントローラが不適切な操作量を出力する危険性があることがわかる。

同様の議論が測定誤差についても成立する。すなわち、1次の予測フィルタを用いると、測定誤差が現時刻以降においてランプ状に変化するとして、将来の予測を行うことになる。この場合の傾きも現時刻と1ステップ前の時刻における情報のみから決定されるため、予測値が測定誤差の影響を極めて受けやすいことがわかる。

以上より、1次の予測フィルタは、構造が単純で物理的解釈が容易であるという長所を有する反面、モデル化誤差や測定誤差の影響を受けやすいため、実用的ではないと結論づけることができる。

予測フィルタの設計2：高次予測フィルタの導出

実用的な2型モデル予測制御系を実現するためには、モデル化誤差や測定誤差の影響を受けにくい予測フィルタを設計する必要がある。1次の予測フィルタの欠点は、モデル化誤差や測定誤差の影響を過大に見積もることであるが、これは現時刻と1ステップ前の情報のみに基づいて傾きを決定するという機構に起因する。したがって、過去数ステップの平均的な挙動に基づいて予測を行うことによって、モデル化誤差や測定誤差の影響を軽減できると考えられる。

過去の平均的な挙動を捉えるために、各時刻における誤差 e_P の傾きの平均値を利用する方法が考えられる。すなわち、Eq. (5.74) において、 $e_P(t) - e_P(t-1)$ の代わりに

$$\begin{aligned} \frac{1}{K} \sum_{i=0}^{K-1} \{e_P(t-i) - e_P(t-i-1)\} &= \frac{1}{K} \{e_P(t) - e_P(t-K)\} \\ &= \frac{1}{K} (1 - d^K) e_P(t) \end{aligned} \quad (5.77)$$

を用いる。ここで、 K は考慮するステップ数を規定するパラメータである。このとき、Eq. (5.74) は

$$e_P(t+k) = e_P(t) + \frac{k}{K} (1 - d^K) e_P(t) \quad (5.78)$$

となり、予測フィルタは

$$F^{[k]}(d) = 1 + \frac{k}{K} (1 - d^K) \quad (5.79)$$

で与えられる。この予測フィルタが設計条件

$$\begin{aligned} F^{[k]}(1) &= 1 \\ F^{[k]'}(1) &= -k \end{aligned}$$

を満たしていることは明らかである。

Eq. (5.79) の予測フィルタは、誤差 e_P の傾きの平均値を計算し、将来もその平均的な傾きが保たれると仮定して、プロセスの出力を予測することを表している。このため、 K を大きく設定することにより、予測値がランダムに増減するモ

デル化誤差や測定誤差の影響を受けにくくなり、ステップやランプといった外乱の動特性を反映した予測が可能になると期待される。しかし、Eq. (5.79) から明らかのように、予測に現時刻と K ステップ過去の情報しか用いないため、 K ステップにわたる区間全体における誤差 e_P の平均的な挙動を十分に反映しているとは言えない。

予測フィルタの設計3：最小二乗法によるフィルタ設計

K ステップにわたる区間全体における誤差 e_P の平均的な挙動を捉えるために、予測式の傾きを最小二乗法によって求める方法が考えられる。最小二乗法を用いた予測フィルタの設計方法として、以下の3種類について検討する。

Type 1. $e_P(t)$ を予測式が通るように、 $e_P(t-k)$, $\{k = 1, 2, \dots, K\}$ を用いて、最小二乗法により傾きを決定する。

Type 2. $e_P(t-k)$, $\{k = 0, 1, \dots, K\}$ を用いて、最小二乗法により傾きおよび切片を決定する。

Type 3. $e_P(t-k)$, $\{k = 0, 1, \dots, K\}$ を用いて、最小二乗法により傾きを決定した後、 $e_P(t)$ を予測式が通るように切片を調整する。

まず、Type 1 の予測フィルタを導出する。評価関数を

$$J_1 = \sum_{i=1}^K \{a(-i) + e_P(t) - e_P(t-i)\}^2 \quad (5.80)$$

として、 J_1 を最小にする傾き a を求める。実際に計算すると、

$$a = \frac{3K(K+1) - 6 \sum_{i=1}^K id^i}{K(K+1)(2K+1)} e_P(t) \quad (5.81)$$

となる。これより、予測式は

$$e_P(t+k) = e_P(t) + k \frac{3K(K+1) - 6 \sum_{i=1}^K id^i}{K(K+1)(2K+1)} e_P(t) \quad (5.82)$$

となり、予測フィルタは

$$F^{[k]}(d) = 1 + k \frac{3K(K+1) - 6 \sum_{i=1}^K id^i}{K(K+1)(2K+1)} \quad (5.83)$$

で与えられる。この予測フィルタが設計条件

$$\begin{aligned} F^{[k]}(1) &= 1 \\ F^{[k]'}(1) &= -k \end{aligned}$$

を満たしていることは容易に確かめられる。

次に、Type 2 の予測フィルタを導出する。評価関数を

$$J_2 = \sum_{i=0}^K \{a(-i) + b - e_P(t-i)\}^2 \quad (5.84)$$

として、 J_2 を最小にする傾き a および切片 b を求める。実際に計算すると、

$$a = \frac{6K \sum_{i=0}^K d^i - 12 \sum_{i=0}^K id^i}{K(K+1)(K+2)} e_P(t) \quad (5.85)$$

$$b = \frac{3K \sum_{i=0}^K d^i - 6 \sum_{i=0}^K id^i + (K+2) \sum_{i=0}^K d^i}{(K+1)(K+2)} e_P(t) \quad (5.86)$$

となる。これより、予測式は

$$e_P(t+k) = \frac{2K(3k+2K+1) \sum_{i=0}^K d^i - 6(2k+K) \sum_{i=0}^K id^i}{K(K+1)(K+2)} e_P(t) \quad (5.87)$$

となり、予測フィルタは

$$F^{[k]}(d) = \frac{2K(3k+2K+1) \sum_{i=0}^K d^i - 6(2k+K) \sum_{i=0}^K id^i}{K(K+1)(K+2)} \quad (5.88)$$

で与えられる。この予測フィルタが設計条件

$$\begin{aligned} F^{[k]}(1) &= 1 \\ F^{[k]'}(1) &= -k \end{aligned}$$

を満たしていることは容易に確かめられる。

最後に、Type 3 の予測フィルタを導出する。この場合の傾きは Type 2 の傾きと同一であるから、Eq.(5.85) で与えられる。さらに、直線 $e_P(t+k) = ak + b$ が点 $e_P(t)$ を通るように、

$$b = e_P(t) \quad (5.89)$$

とすると、予測式は

$$e_P(t+k) = e_P(t) + k \frac{6K \sum_{i=0}^K d^i - 12 \sum_{i=0}^K id^i}{K(K+1)(K+2)} e_P(t) \quad (5.90)$$

となり、予測フィルタは

$$F^{[k]}(d) = 1 + k \frac{6K \sum_{i=0}^K d^i - 12 \sum_{i=0}^K id^i}{K(K+1)(K+2)} \quad (5.91)$$

で与えられる。この予測フィルタが設計条件

$$\begin{aligned} F^{[k]}(1) &= 1 \\ F^{[k]'}(1) &= -k \end{aligned}$$

を満たしていることは容易に確かめられる。

当然ながら、ここで取り上げた3種類の設計方法以外にも様々な方法が考えられる。例えば、プロセスの運転状態が徐々に変化していくことを考慮して、現時刻に近い測定データをより重視した予測値を算出するために、過去のデータほど重みの小さくなる指数重み付き最小二乗法を用いることもできる。

予測フィルタの比較

最小二乗法を用いた予測フィルタは、先に導出した2種類の予測フィルタを、モデル化誤差および測定誤差の影響を受けにくいように改良したものである。ここで、 K は考慮するステップ数を規定するパラメータであり、Eq. (5.79)の予測フィルタと同様、パラメータ K を大きく設定することにより、予測値がモデル化誤差や測定誤差の影響を受けにくくなり、ステップやランプといった外乱の動特性を反映した予測が可能になると期待される。

ここでは、先に示した3種類の予測フィルタを定性的に比較し、最も予測性能が良いと考えられるものを選択する。

まず、Type 1について検討する。この方法では、現時刻の誤差 $e_P(t)$ を通るように傾きを決定するため、測定ノイズなどの影響で e_P が振動的な動きを示す場合には、各ステップ毎に傾きが大きく変化してしまう。傾きの変化は1次の予測フィルタを用いる場合よりも小さいと期待されるが、Type 2やType 3よりも大きくなるはずである。

Type 2とType 3との差異は、予測式が現時刻の誤差 $e_P(t)$ を通るように切片を調整するか否かである。一見すると、Type 2の方が e_P の平均的な動きをより良く表現できるように見える。しかし、Type 2では外乱の付加に伴う e_P の急激な変化に素早く追従できない。例えば、ステップ状外乱が付加された場合について考えてみる。傾きを計算する際に K ステップ過去のデータまで利用するため、 K が大きければ、傾きはゼロに近くなるはずである。この場合、Type 2を用いると、予測式と $e_P(t)$ の距離が大きくなるため、ステップ状外乱が付加されたという事実が予測値に反映されにくくなる。一方、Type 3を用いると、予測式は $e_P(t)$ を通るように調節されるため、外乱の影響をより速く予測値に反映させることができる。

以上の検討から、測定ノイズなどに対する感度を抑え、さらに外乱の影響を迅速に予測値に反映させるためには、予測フィルタの設計方法としてType 3が最も適していると判断できる。以下では、Type 3の方法に従って設計した予測フィルタを用いるものとする。

ここで導出した予測フィルタは、制御系設計時に設定する評価基準（ロバスト

安定性など)に照らして必ずしも最適であるとは限らない。しかし、予測フィルタの機能を直感的に理解できるうえ、パラメータ K を用いてモデル化誤差や測定誤差の影響を考慮したチューニングを行うこともできる。アルゴリズムの直感的な理解しやすさは、制御理論にとって必ずしも必要なものではない。しかし、モデル予測制御がプロセス制御の分野で大きな成果を挙げることができた背景には、そのアルゴリズムが技術者にとって直感的に理解しやすいものであったという事実がある。したがって、制御アルゴリズムの実装を促進するためには、理解しやすさという観点からの評価も必要であろう。この意味からも、Eq. (5.91) の予測フィルタは優れた特徴を有していると言える。

5.2.6 制御シミュレーション

提案した2型モデル予測制御アルゴリズムの有効性を検証するために、制御シミュレーションを行う。

2型モデル予測制御の特徴を明らかにするため、まずはモデル化誤差のない場合について検討する。ここでは、制御対象となるプロセスおよびそのモデルを次式で与える。

$$G_P(s) = \frac{1}{50s + 1} e^{-10s} \quad (5.92)$$

$$G_M(s) = \frac{1}{50s + 1} e^{-10s} \quad (5.93)$$

実際に利用するモデルは離散時間モデルであり、制御周期は5秒とする。一般的なチューニングルールに従い、以下のチューニングパラメータを用いることにする。

$$L = 3, P = 20, M = 5, \alpha = 0.5$$

まず、一致区間の始点はモデルのむだ時間に対応するステップ数の1ステップ先に設定すればよいので、 $L = 3$ とした。一致区間の幅 P と制御区間の幅 M は制御系の安定性に大きな影響を与える。 P を大きく M を小さくすれば安定性は向上するが、制御系の速応性は悪くなる。ここでは、安定性と速応性とのバランスを考慮して、 $P = 20, M = 5$ とした。参照軌道を決定するパラメータ α に関し

では、参照軌道の計算方法による制御応答の違いを明確にするために、やや保守的な値を採用することとし、 $\alpha = 0.5$ とした。

この設定の下で従来のモデル予測制御を適用すると、ステップ状外乱とステップ状設定値変更に対して、Fig. 5.2のような制御結果が得られる。なお、外乱と設定値変更の大きさはそれぞれ0.5と1.0であり、シミュレーション開始50秒後に外乱が付加され、500秒後に設定値が変更されている。この制御結果から、1) 設定値変更の際して、1ステップで制御量を設定値に一致させるために、操作量が急激に変化する、2) 外乱に対して制御応答が階段状に変化する、という特徴を読みとることができる。

前者に関しては、制御量を設定値に一致させることは制御目的に適うため、問題ないようにも思われる。しかし、急激な操作量の変化は制御系を不安定にする原因となるばかりでなく、実プラントの運転という観点からも好ましくない。もちろん、操作量の変化速度に対する上下限制約を考慮したアルゴリズムを用いることにより、操作量の変化を強制的に緩やかにすることはできる。しかし、制約条件に依存する方法では、チューニングのために参照軌道を導入した意味が薄れてしまう。このような制御応答を示す原因は参照軌道の計算方法にある。Eq. (5.13)で定義される参照軌道は、現時刻の偏差 $r(t) - y(t)$ を徐々に減少させるように未来の目標値を設定することを意味する。したがって、現時刻において偏差のない状態でステップ状設定値変更を行う場合、緩やかに設定値に近づくのではなく、瞬時に設定値と一致する参照軌道が描かれる。この問題点を簡単に回避するためには、ステップ状の設定値変更を予めコントローラに与えるのではなく、設定値を変更する時点で与えればよい。これにより、設定値変更の指示が与えられた時点で偏差が生じるようになり、緩やかな参照軌道が得られるようになる。このような工夫を施した場合の制御結果をFig. 5.3に示す。期待した通り、緩やかな設定値変更が実現されている。

しかし、外乱抑制および設定値追従は行われているものの、Fig. 5.2の制御結果でも指摘した通り、制御応答が階段状になっていることがわかる。このような階段状の応答は、むだ時間を持つプロセスに対して、Eq. (5.13)の参照軌道を用いたことに起因する。したがって、2型モデル予測制御を適用する場合においても、同一の参照軌道を用いる限り、階段状の制御応答が得られる。実際、ステッ

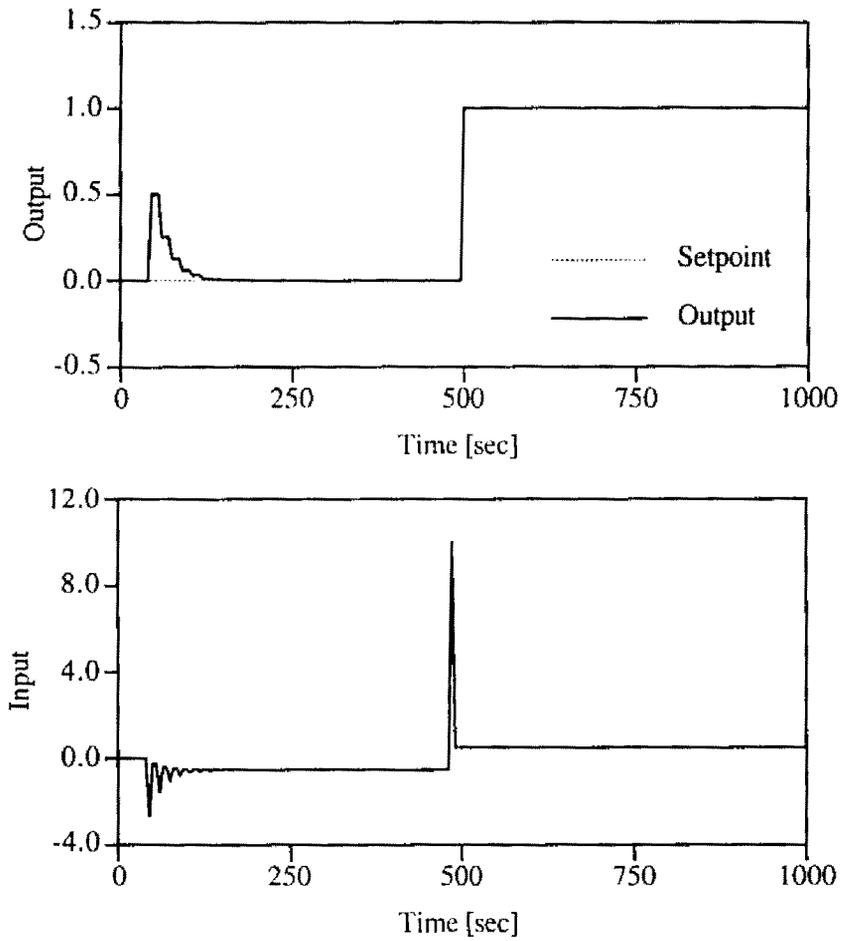


Fig. 5.2 Control result of traditional MPC: Step disturbance and setpoint change. Future setpoints are used for calculating reference trajectories.

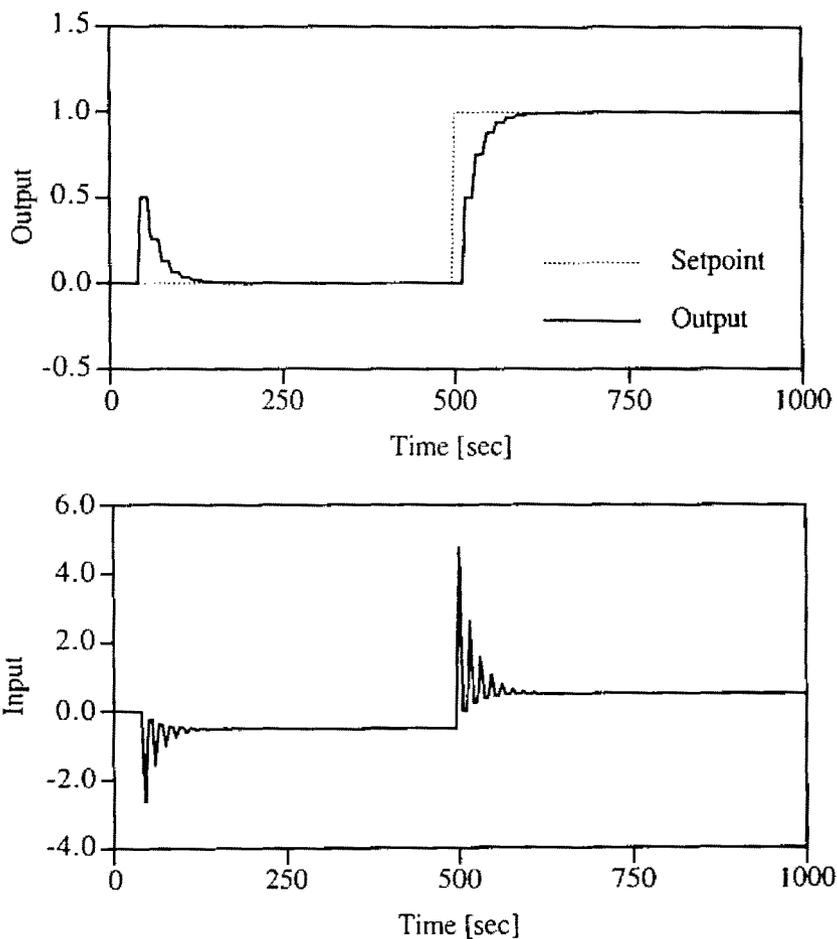


Fig. 5.3 Control result of traditional MPC: Step disturbance and setpoint change. Future setpoints are not used for calculating reference trajectories.

ブ状外乱およびステップ状設定値変更に対して2型モデル予測制御を適用すると、Figs. 5.4, 5.5 のような制御結果が得られる。ただし、Fig. 5.4 は設定値変更が予め与えられている場合の結果であり、Fig. 5.5 は設定値を変更する時点で新しい設定値を与えた場合の結果である。また、予測フィルタの次数 K は10としている。

実プラントを制御する場合には、モデル化誤差や外乱の影響などにより、シミュレーションほど明確に階段状の応答は現れないため、Eq. (5.13) の参照軌道で十分な場合が多い。しかし、滑らかな制御応答を実現する必要がある場合には、参照軌道を改良することによって対応できる。

むだ時間を有するプロセスに対して滑らかな制御応答を実現できる参照軌道はいくつか提案されているが、最も簡単な参照軌道は次式で与えられる。

$$y_R(t+k) = r(t+k) - \alpha^{k-L+1}(r(t) - y_P^*(t+L-1)) \quad (5.94)$$

ここで、 $y_P^*(t+L-1)$ は制御量の子測値であるが、一般には従来のモデル予測制御と提案する2型モデル予測制御とは違う値となる。従来のモデル予測制御では、 $y_P^*(t+L-1)$ は現時刻以降の操作量を $u(t-1)$ で一定とする場合の子測値である。一方、2型モデル予測制御では、 $y_P^*(t+L-1)$ は現時刻以降の操作量の傾きを $\Delta u(t-1)$ で一定とする場合の子測値となる。

Eq. (5.94) の参照軌道を用いると、従来のモデル予測制御および2型モデル予測制御はそれぞれ、ステップ状の外乱および設定値変更に対して、Figs. 5.6, 5.7 のような制御応答を示す。これらのシミュレーション結果から、Eq. (5.94) の参照軌道を用いることにより制御応答が滑らかになることを確認できる。

Fig. 5.7 には、2型モデル予測制御において主要な役割を果たす予測フィルタの次数が制御性能に与える影響を知るために、 $K = 1, 10, 20$ の3種類の制御結果が示してある。

予測フィルタはプロセスとモデルとの出力の差に適切な動特性を持たせるために導入したものである。したがって、プロセスとモデルとの出力に差がなければ、すなわち、外乱やモデル化誤差がなければ、予測フィルタの有無は制御性能に何の影響も及ぼさない。一方、外乱が付加された場合やモデル化誤差がある場合には、予測フィルタの選択によって制御性能が大きく異なってくる。実際、Fig. 5.7

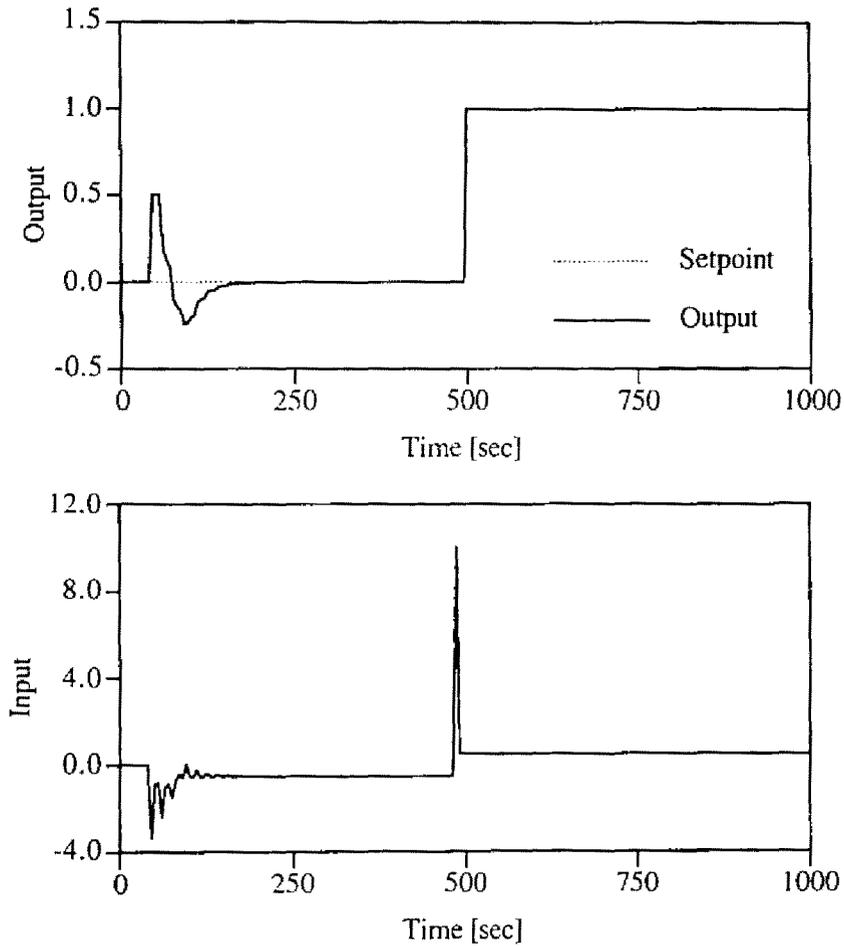


Fig. 5.4 Control result of type 2 MPC: Step disturbance and setpoint change. Future setpoints are used for calculating reference trajectories.

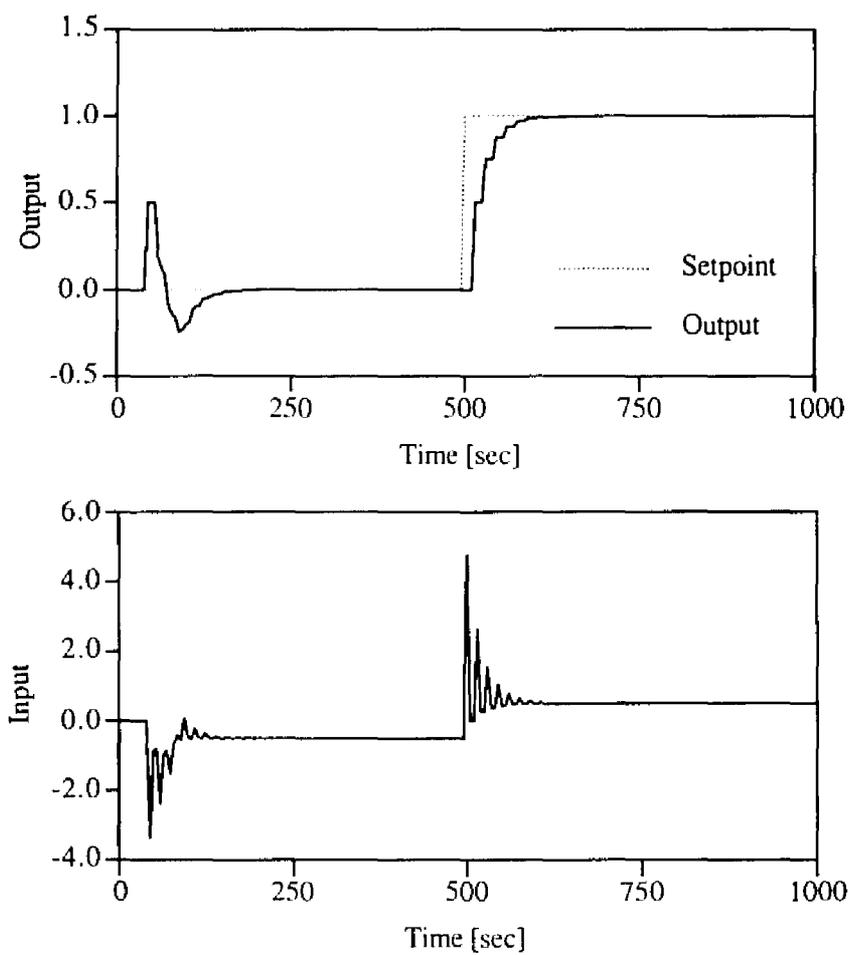


Fig. 5.5 Control result of type 2 MPC: Step disturbance and setpoint change. Future setpoints are not used for calculating reference trajectories.

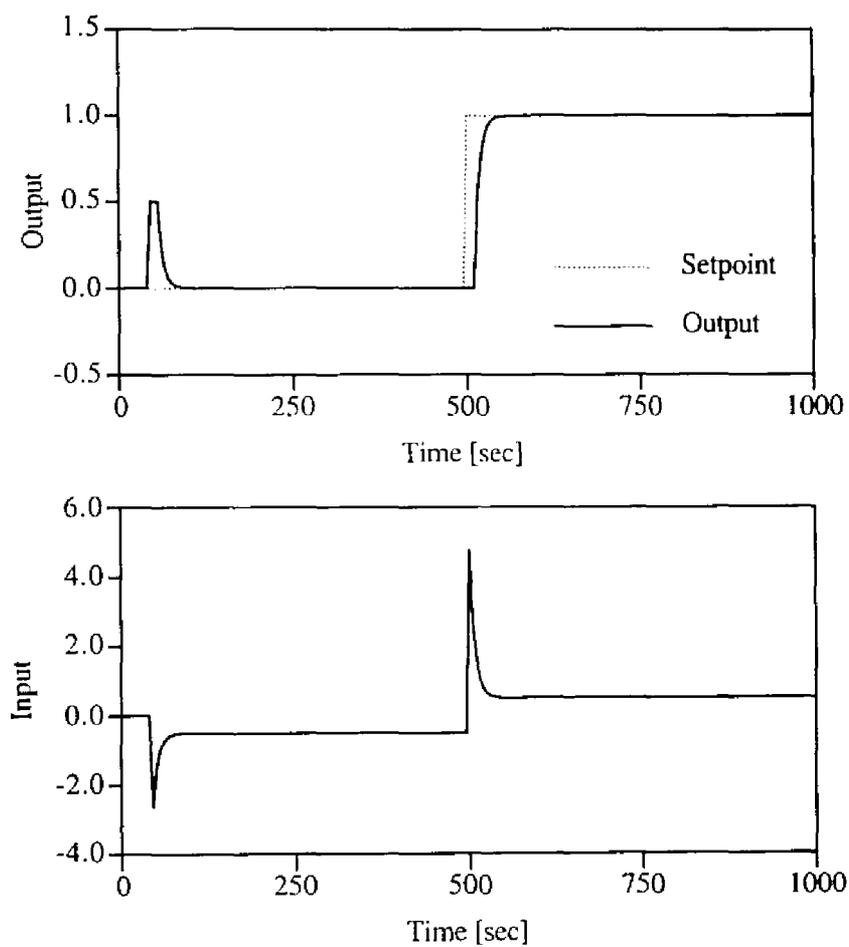


Fig. 5.6 Control result of traditional MPC: Step disturbance and setpoint change. Modification of the reference trajectory.

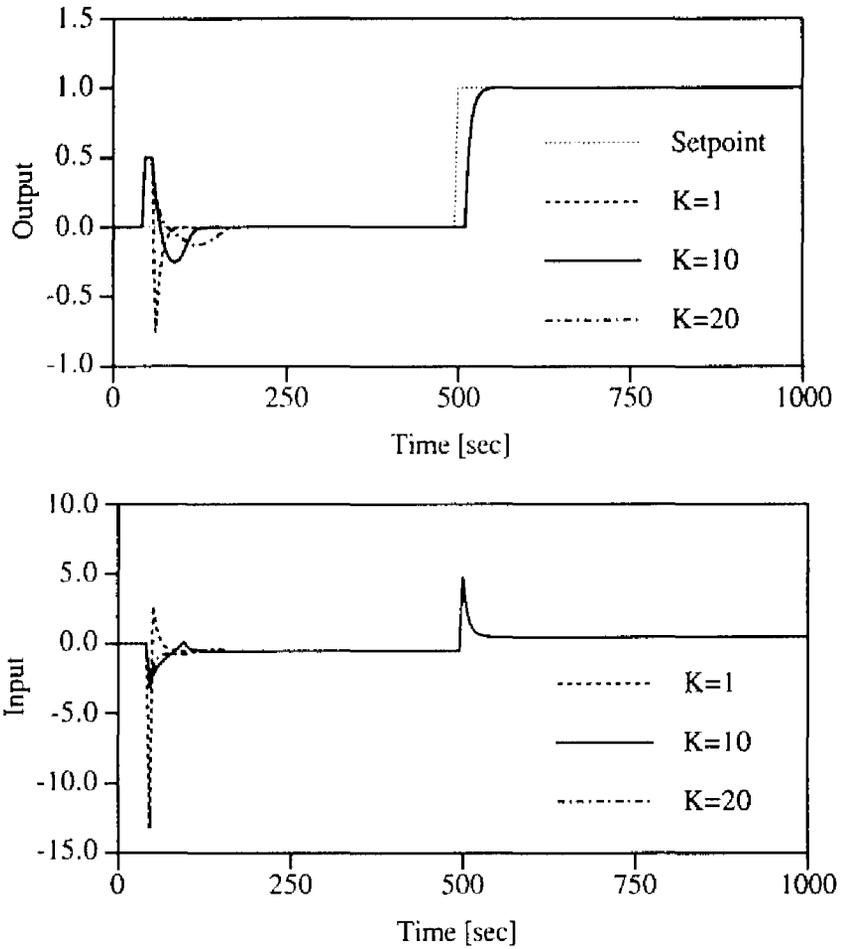


Fig. 5.7 Control results of type 2 MPC: Step disturbance and setpoint change. Modification of the reference trajectory.

を見ると、設定値変更に対する制御応答は同一であるが、外乱に対しては制御応答が異なることがわかる。具体的には、予測フィルタの次数 K が大きいほど、制御応答は緩やかになっている。

$K = 1$ の場合には、外乱付加直後に操作量が急激に変化し、制御量は設定値を超えて外乱とは逆の方向に大きく変化している。この現象は、一次の予測フィルタを用いる場合、現時刻と1ステップ前のデータに基づいて未来の予測値の傾きが決定されることに起因する。いま、ステップ状外乱が付加されているため、実際の外乱は一定値であるのに対して、予測式は外乱をランプ状であると判断し、予測値はランプ状に変化することになる。この予測値を参照軌道に一致させるためには、操作量を大きく変化させなければならない。しかし、実際の外乱はステップ状であるため、操作量を大きく変化させたことが災いして、制御量は参照軌道を越えて変化してしまう。

このように、2型モデル予測制御がステップ状外乱に対して過敏に反応するのは、外乱が付加された時点で、外乱がステップ状であるかランプ状であるかを判断できないためである。予測フィルタの次数を高く設定し、より過去の情報を考慮して予測値の傾きを決定することにより、Fig. 5.7に示すように緩やかな制御応答を実現できる。しかし、予測フィルタの次数を高くすると、ステップあるいはランプといった外乱の動特性を予測値が正確に反映するまでに時間がかかるようになるため、速応性は犠牲になる。実際、Fig. 5.7において、 $K = 20$ の場合には、制御量が設定値を超えて外乱とは逆の方向へ変動する幅は小さく抑えられているが、整定時間が長くなっている。

同様の現象はランプ状外乱に対しても生じる。Figs. 5.6, 5.7と同一の制御パラメータを用いた場合の、ランプ状の外乱および設定値変更に対する制御シミュレーションの結果をそれぞれ Figs. 5.8, 5.9 に示す。なお、外乱の傾きは0.05で、シミュレーション開始50秒後から付加されており、設定値は500秒後から20ステップ(100秒)間ランプ状に変化させた後、一定としている。これは、重合反応プロセスを制御する場合などに問題となる銘柄切り替え制御への適用可能性を示すためである。

Fig. 5.8は従来のモデル予測制御を用いた場合の結果であるため、ランプ状外乱に対してオフセットが残っている。一方、提案した2型モデル予測制御を適用

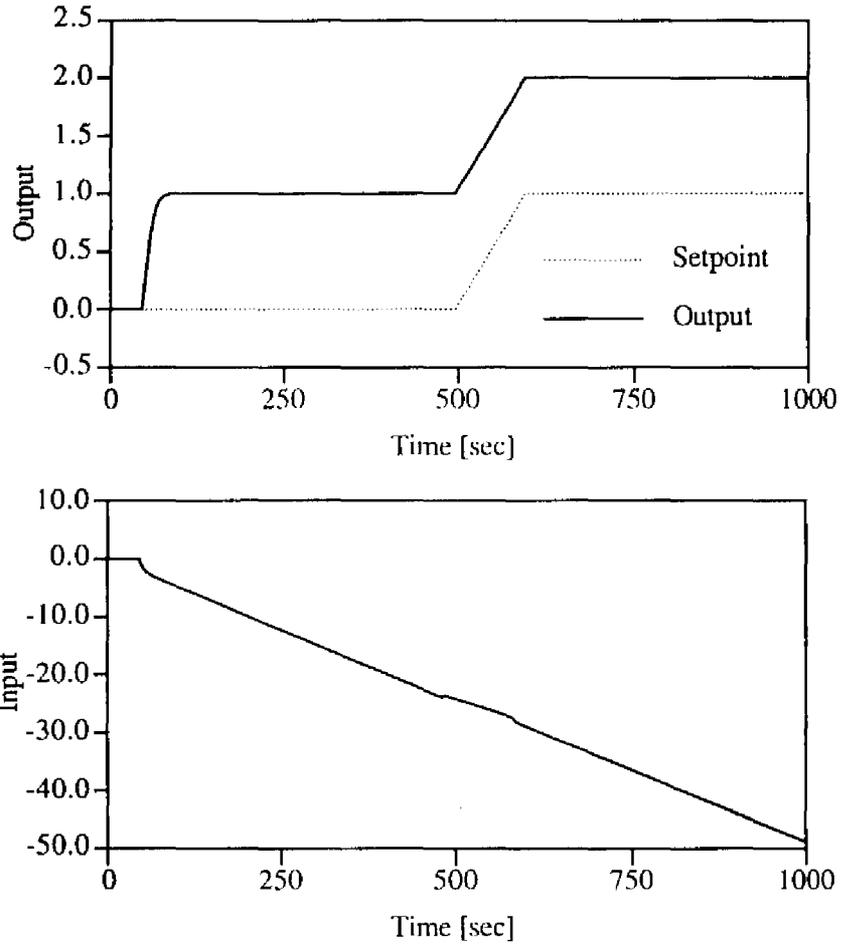


Fig. 5.8 Control result of traditional MPC: Ramp disturbance and setpoint change.

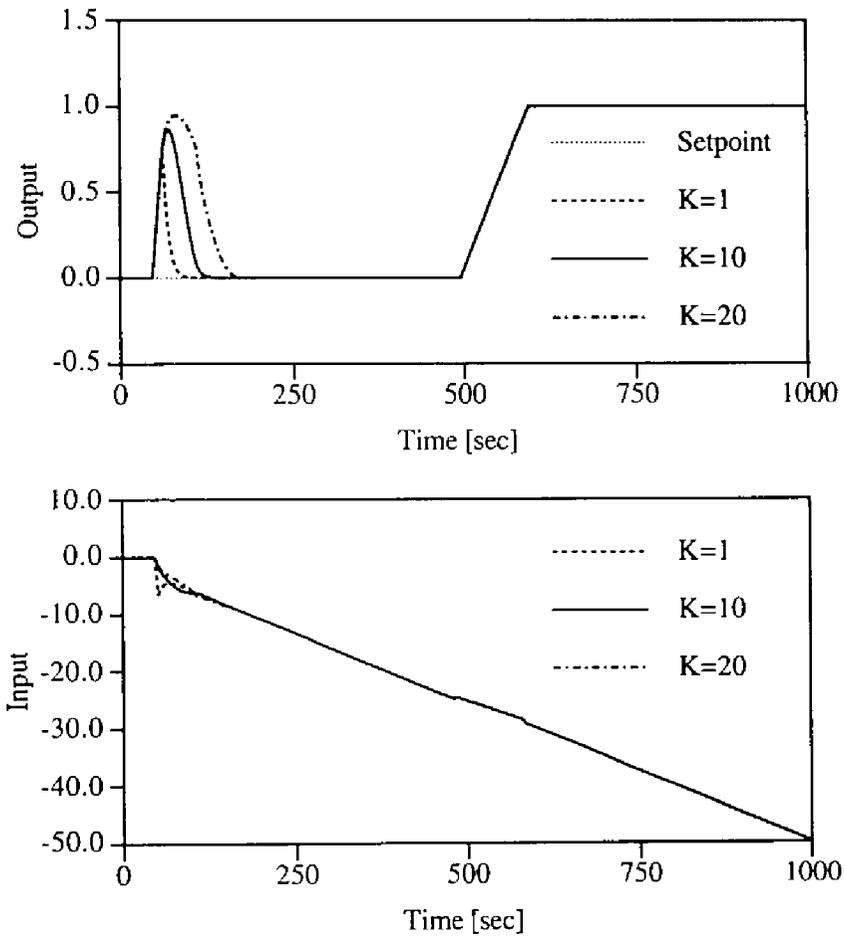


Fig. 5.9 Control results of type 2 MPC: Ramp disturbance and setpoint change.

した場合には、Fig. 5.9 から明らかなように、オフセットは残らず、ランプ状外乱が除去されていることが確認できる。また、予測フィルタの次数を高くするほど、整定時間が長くなる傾向も把握できる。特に $K = 1$ の場合には、外乱が付加されるとすぐに、ランプ状の外乱を仮定して予測値が計算されるため、速応性は非常に高くなる。

ここまではモデル化誤差がない場合について検討してきたが、最後に、モデル化誤差がある場合のシミュレーション結果を示す。モデルはこれまでと同じとし、プロセスの伝達関数を

$$G_P(s) = \frac{1.2}{40s + 1} e^{-10s} \quad (5.95)$$

で与える。制御周期は5秒であり、これまでと同一のチューニングパラメータ

$$L = 3, P = 20, M = 5, \alpha = 0.5$$

を用いるものとする。また、予測フィルタの次数は20とする。

まず、従来のモデル予測制御および2型モデル予測制御をステップ状の外乱および設定値変更に対して適用した結果をそれぞれ Figs. 5.10, 5.11 に示す。なお、外乱および設定値変更の条件はこれまでと同様である。この結果より、ステップ状の外乱や設定値変更に対して、2型モデル予測制御は従来のモデル予測制御と大差ない制御性能を示すことがわかる。2型モデル予測制御の目的はランプ状の外乱や設定値変更に対してオフセットをなくすことであるから、ステップ状の外乱や設定値変更に対して従来のアルゴリズムと大差ないのであれば、十分満足できる。

最後に、2型モデル予測制御をランプ状の外乱および設定値変更に対して適用した結果を Fig. 5.12 に示す。この結果より、提案する2型モデル予測制御によって、ロバストな外乱除去および設定値追従が実現できることが確認できる。なお、予測フィルタの次数を1として同様なシミュレーションを行った結果、制御系は不安定となった。このことから、予測フィルタの次数が制御系の安定性と速応性とを調節するチューニングパラメータとなることもわかる。

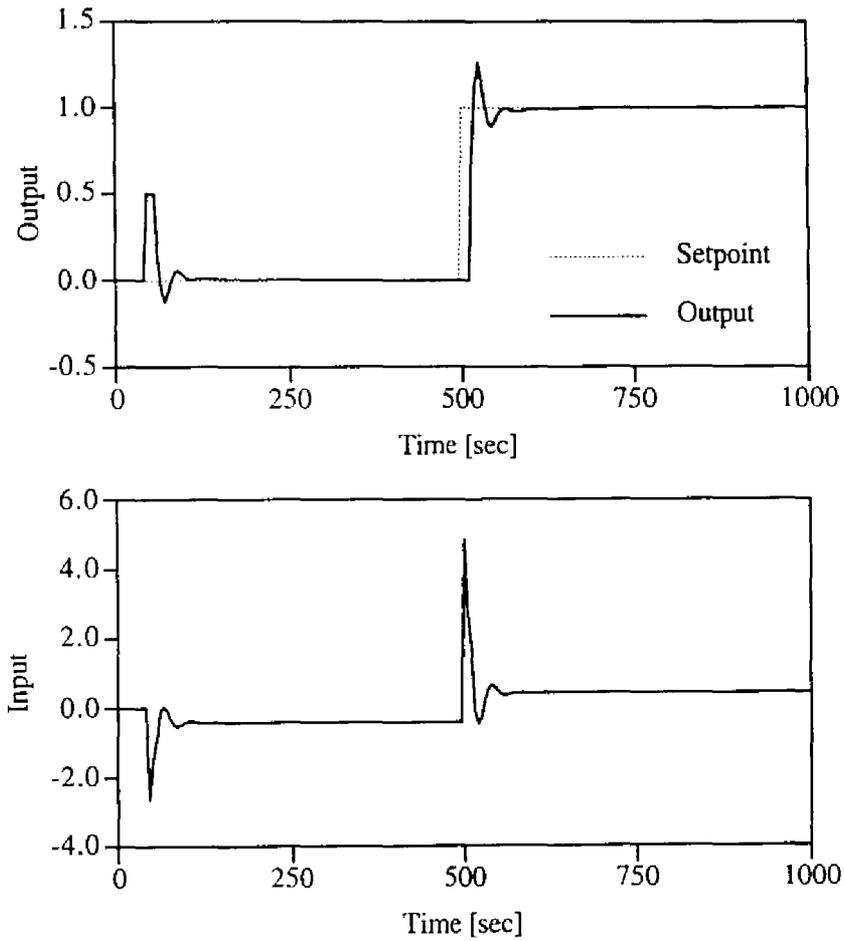


Fig. 5.10 Control result of traditional MPC: Step disturbance and setpoint change. Effect of modeling error.

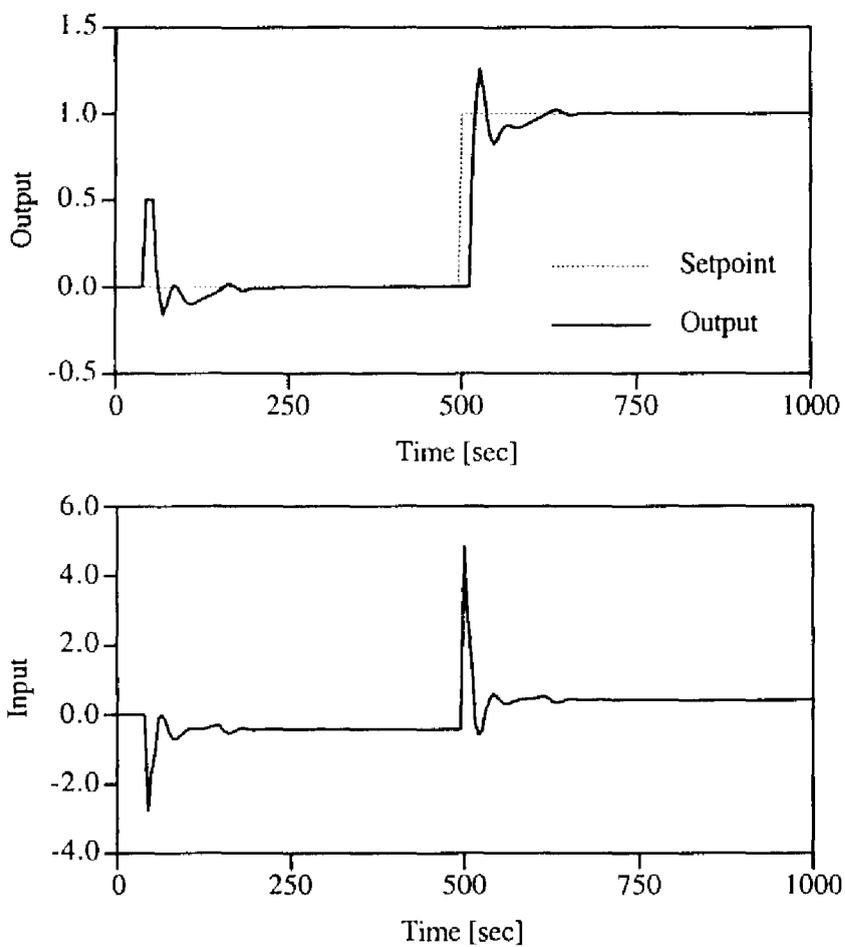


Fig. 5.11 Control result of type 2 MPC: Step disturbance and setpoint change. Effect of modeling error.

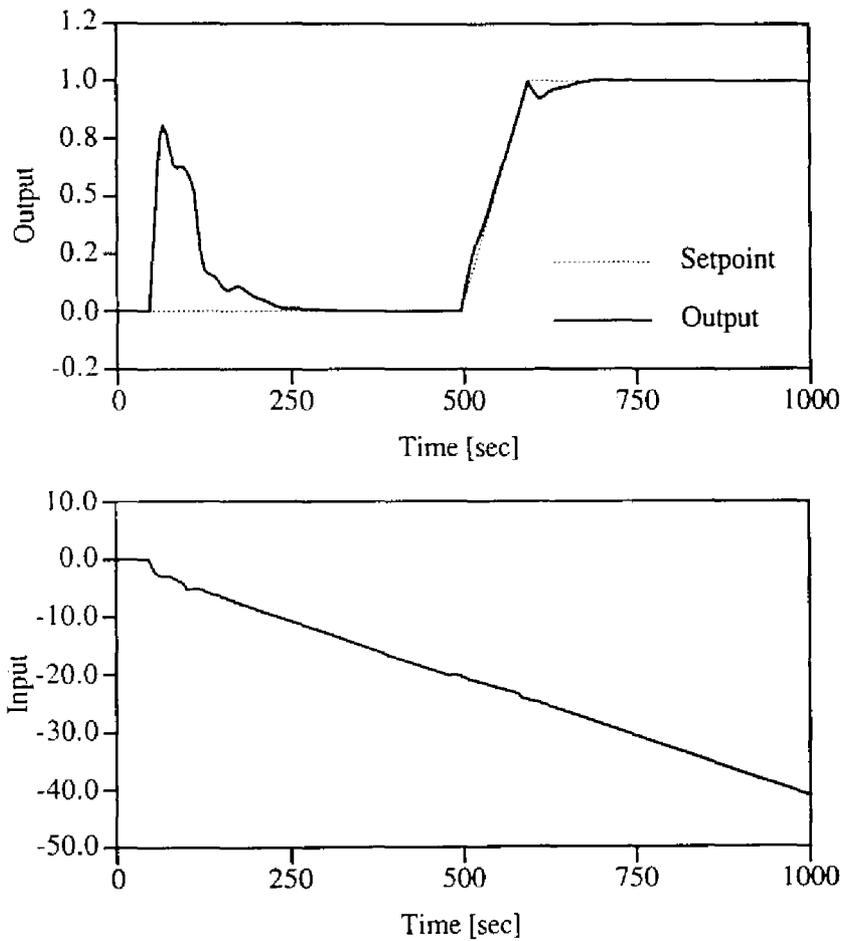


Fig. 5.12 Control result of type 2 MPC: Ramp disturbance and setpoint change. Effect of modeling error.

5.3 積分要素を有するプロセスに対する2型モデル予測制御系の設計

従来の一般的なモデル予測制御系は1型であり、ランプ状の設定値変更あるいは外乱に対して、オフセットフリーな制御を実現することができない。これは、プロセスが安定である場合のみならず、プロセスが積分要素を有する場合にも成り立つことである。最も簡単な一段予測制御の例を用いて、従来のモデル予測制御系が積分プロセスに対しても1型となることを示す。まず、プロセスとモデルがそれぞれ次のように表されるとする。

$$y(t) = dG_P(d)u(t) + v(t) \quad (5.96)$$

$$y_M(t) = dG_M(d)u(t) \quad (5.97)$$

このとき、1ステップ先の予測値は次の予測式で与えられる。

$$\begin{aligned} y_P(t+1) &= y_M(t+1) + y(t) - y_M(t) \\ &= (1-d)G_M u(t) + y(t) \end{aligned} \quad (5.98)$$

一方、目標値は

$$y_R(t+1) = r(t+1) - \alpha(r(t) - y(t)) \quad (5.99)$$

で与えられるとする。一段予測制御では、1ステップ先の予測値 $y_P(t+1)$ が目標値 $y_R(t+1)$ と一致するように操作量を決定するため、その制御則は

$$y_P(t+1) = y_R(t+1) \quad (5.100)$$

と表される。この制御則を $u(t)$ について整理すると

$$u(t) = \frac{(1-\alpha d)r(t+1) - (1-\alpha)y(t)}{(1-d)G_M} \quad (5.101)$$

というコントローラの表現式が得られる。したがって、プロセス dG_P およびモデル dG_M が積分要素 $1/(1-d)$ を持たない場合には、コントローラは積分要素を1つ持ち、制御系は1型となる。一方、プロセス dG_P およびモデル dG_M が積

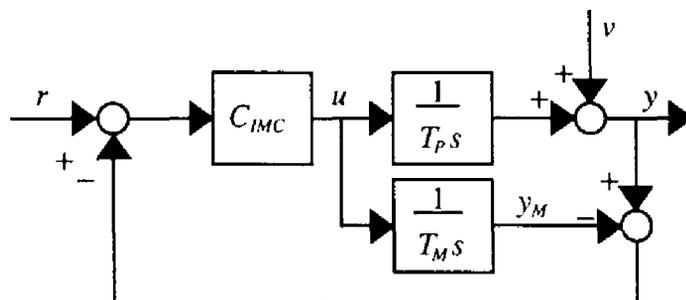


Fig. 5.13 Block diagram of Internal Model Control system

分要素 $1/(1-d)$ を含む場合には、コントローラは積分要素を持たなくなり、やはり制御系は1型となる。

上記の簡単な例からわかるように、モデル予測制御では、コントローラが積分要素を持つように、予測式 Eq. (5.98) が巧妙に設定されている。しかし、モデルが積分要素を持つ場合には、モデルの積分要素によってコントローラが持つべき積分要素が相殺されるために、コントローラが積分要素を持たなくなる。これは、『モデルの逆数をフィードバックコントローラとして利用すれば良い』という基本概念に立脚している制御方法に共通する特徴である。

2型の制御系、あるいはより一般的なm型の制御系を実現する方法が提案されているモデルベース制御として、IMC (Internal Model Control) が挙げられる^[5]。まず、先に示した一段予測制御と同様に、単純なIMCが積分プロセスに対して1型の制御系となることを示す。ここでは、プロセスとモデルがそれぞれ連続時間伝達関数を用いて、次のように表されるとする。

$$y(s) = \frac{1}{T_P s} u(s) + v(s) \quad (5.102)$$

$$y_M(s) = \frac{1}{T_M s} u(s) \quad (5.103)$$

このとき、IMCによる制御系はFig. 5.13のようになる。 $C_{IMC}(s)$ はIMCコントローラであり、

$$C_{IMC}(s) = \frac{1}{\tau s + 1} \frac{T_M s}{1} \quad (5.104)$$

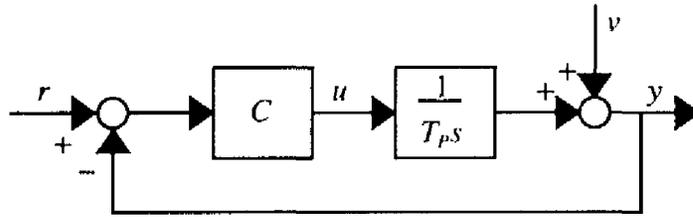


Fig. 5.14 Block diagram of traditional control system

で与えられる。ここで、 $1/(\tau s + 1)$ は IMC フィルタであり、フィルタ時定数 τ がチューニングパラメータとなる。この制御系を Fig. 5.14 のような従来のフィードバック制御系に書き換えると、コントローラ $C(s)$ は、

$$C(s) = \frac{C_{IMC}}{1 - C_{IMC} \frac{1}{T_M s}} \quad (5.105)$$

$$= \frac{T_M}{\tau} \quad (5.106)$$

となる。これは比例制御に他ならず、先に示した一段予測制御の場合と同様に、コントローラは積分要素を持たない。すなわち、この制御系は 1 型である。

IMC では、ランプ状の設定値変更あるいは外乱に対してオフセットフリーな制御系を実現するために、Eq. (5.104) 中の IMC フィルタを拡張した、次式の IMC コントローラが提案されている。

$$C_{IMC}(s) = \frac{2\tau s + 1}{(\tau s + 1)^2} \frac{T_M s}{1} \quad (5.107)$$

この IMC コントローラを用いる場合には、対応するフィードバックコントローラ $C(s)$ が積分要素を持つようになるため、制御系は 2 型となる。さらに IMC フィルタを拡張することにより、一般的な m 型の制御系を構築できることが示されている^[5]。

しかし、より複雑なアルゴリズムを用いるモデル予測制御においては、m 型の制御系を容易に実現することはできない。そこで、本節では、積分要素を有するプロセスを対象を限定し、2 型の制御系を実現できるモデル予測制御アルゴリズムを提案する。

5.3.1 アルゴリズム

積分要素を有するプロセスに対するモデル予測制御のアルゴリズムについて説明する。制御対象であるプロセスは、不安定極として積分要素のみを有しており、次式で与えられるとする。

<プロセス>

$$\begin{aligned} y(t) &= dG_P(d)u(t) + v(t) \\ &= \frac{dQ(d)}{(1-d)P(d)}u(t) + v(t) \end{aligned} \quad (5.108)$$

本節では、プロセスが積分要素を1つだけ有する場合に限定して議論を進めるため、Eq. (5.108)のように、 dG_P の分母多項式が $1-d$ を因数として持つことを陽に書き表す。 P, Q は共に遅延演算子 d の多項式である。ただし、 Q は $1-d$ を因数として持たない多項式であり、 P は安定多項式(複素平面上で単位円内にゼロ点を持たない多項式)であるとする。さらに、 P, Q は共通因子を持たないものとする。

このプロセスのモデルが次式で与えられるとする。

<モデル>

$$\begin{aligned} y_M(t) &= dG_{M1}(d)u(t) \\ &= \frac{dG_M(d)}{1-d}u(t) \end{aligned} \quad (5.109)$$

ここで、 dG_{M1} はモデルの離散時間伝達関数である。プロセスが積分要素を有することを前提としているため、 dG_{M1} は $d=1$ に1つ極を持つ。さらに、モデルの分子多項式 dG_M は、次のように表すことができる。

$$dG_M = \sum_{i=1}^N g_i d^i \quad (5.110)$$

これは安定プロセス

$$y(t) = \frac{dQ(d)}{P(d)}u(t) + v(t) \quad (5.111)$$

のインパルス応答モデルに対応する表現式である。Eq. (5.110) を利用して、モデルを次のように無限級数で表現することもできる。

$$y_M(t) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{i=1}^m g_i d^m u(t) \quad (5.112)$$

本研究の目的は2型の制御系を実現することである。そこで、安定プロセスを対象とする場合と同様に、予測フィルタ $F^{[k]}(d)$ を導入し、未来の予測値を次式に基づいて計算する。

< 予測式 >

$$y_P(t+k) = y_M(t+k) + F^{[k]}(d)(y(t) - y_M(t)) \quad (5.113)$$

未来のモデル出力 $y_M(t+k)$ は、Eq. (5.112) を用いて、

$$\begin{aligned} y_M(t+k) &= \bar{G}_{Mf}^{[k]} u(t) \\ &= \sum_{j=1-k}^{-1} \sum_{i=1}^{j+k} g_i d^j u(t) + \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{j+k} g_i d^j u(t) \end{aligned} \quad (5.114)$$

と表現できる。Eq. (5.114) の右辺第1項が未来の操作量に関連する項であり、第2項が過去の操作量に関連する項である。いま、制御区間を M とする、すなわち、未来の操作量について

$$u(t+k) = u(t+M-1), \quad \text{for } k \geq M-1 \quad (5.115)$$

とすると、 $y_M(t+k)$ はさらに次式のように表現できる。

$$y_M(t+k) = \bar{G}_f^{[k]} \mathbf{u}_f + \bar{G}_o^{[k]} u(t) \quad (5.116)$$

ここで、

$$\mathbf{u}_f = \left[u(t) \quad u(t+1) \quad \cdots \quad u(t+M-1) \right]^T \quad (5.117)$$

$$\bar{G}_f^{[k]} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^k g_i & \sum_{i=1}^{k-1} g_i & \cdots & \sum_{j=1-k}^{-M+1} \sum_{i=1}^{j+k} g_i \end{bmatrix} \quad (5.118)$$

$$\bar{G}_o^{[k]} = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{j+k} g_i d^j \quad (5.119)$$

と定義する。

参照軌道には、安定プロセスを対象とする場合と同一の式を利用する。

<参照軌道>

$$y_R(t+k) = r(t+k) - \alpha^{k-L+1}(r(t) - y(t)) \quad (5.120)$$

制御則を規定する評価関数として、次の Quadratic な評価関数を用いる。

<評価関数>

$$J = \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 (y_P(t+k) - y_R(t+k))^2 + \Delta u_f^T \Lambda \Delta u_f \quad (5.121)$$

ここで、

$$\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1^2, \lambda_2^2, \dots, \lambda_M^2\} \quad (5.122)$$

であり、 ψ_k, λ_i は α と同様、制御系のチューニングパラメータである。また、 Δu_f は未来の操作量の変化量であり、

$$\Delta u_f = (1-d)u_f \quad (5.123)$$

で定義される。この評価関数の第1項が予測値と参照軌道の近さを、第2項が操作量の変化に対するペナルティーを表している。すなわち、 λ_i をゼロに近づけると、予測値と参照軌道を近づけるために、操作量の急激な変化が許容される。反対に、 λ_i を大きくすると、操作量の急激な変化が抑えられ、プロセスの出力は緩やかに変化することが期待される。 ψ_k についても同様の議論が成り立つ。

このように、本節では、参照軌道と入力重みの双方を利用可能なアルゴリズムについて検討する。現実の制御問題に対しては、参照軌道あるいは入力重みのいずれか一方をチューニングに用いれば十分である。

モデル予測制御では、Eq. (5.121) の評価関数を最小にする操作量を各サンプリング時刻で求めることになる。したがって、制御則は次式で与えられる。

<制御則>

$$\min_{u_f} J \quad (5.124)$$

以上が提案するモデル予測制御のアルゴリズムである。予測式中に予測フィルタを導入する以外は、従来のモデル予測制御と同一である。さらに、 $F^{[k]} = 1$ とすると、完全に従来のモデル予測制御と一致するため、提案するアルゴリズムは従来のアルゴリズムをその一部として含むことがわかる。

5.3.2 コントローラ

第5.3.1節で示した制御則から導かれるコントローラは、必要条件として、

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{u}_f} = 0 \quad (5.125)$$

を満たさなければならない。実際に計算すると、次の関係式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{u}_f} &= \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \left[\bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} \mathbf{u}_f + \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \left\{ (\bar{\mathbf{G}}_o^{[k]} - F^{[k]} dG_{MI}) \mathbf{u}(t) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - (R^k - \alpha^{k-L+1}) r(t) + (F^{[k]} - \alpha^{k-L+1}) y(t) \right\} \right] \\ &\quad + \mathbf{T}_f^T \Lambda \mathbf{T}_f \mathbf{u}_f - \mathbf{T}_f^T \Lambda \mathbf{T}_o du(t) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (5.126)$$

ただし、

$$\mathbf{T}_f = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{T}_o = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.127)$$

である。Eq. (5.126) を \mathbf{u}_f について整理すると、次式を得る。

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_f &= \left(\mathbf{T}_f^T \Lambda \mathbf{T}_f + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} \right)^{-1} \left[\mathbf{T}_f^T \Lambda \mathbf{T}_o du(t) \right. \\ &\quad \left. - \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \left\{ (\bar{\mathbf{G}}_o^{[k]} - F^{[k]} dG_{MI}) \mathbf{u}(t) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - (R^k - \alpha^{k-L+1}) r(t) + (F^{[k]} - \alpha^{k-L+1}) y(t) \right\} \right] \end{aligned} \quad (5.128)$$

ここで,

$$u(t) = \mathbf{h}^T \mathbf{u}_f \quad (5.129)$$

$$\mathbf{h} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^T \quad (5.130)$$

に注意して, Eq. (5.128) を $u(t)$ について整理すると, 次のコントローラの表現式を得る。

$$\begin{aligned} & \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left\{ \mathbf{D}\mathbf{h} - \mathbf{T}_f^T \Lambda \mathbf{T}_o d + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} (\bar{\mathbf{G}}_o^{[k]} - F^{[k]} d G_{MI}) \right\} u(t) \\ &= \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \left\{ (R^k - \alpha^{k-L+1}) r(t) - (F^{[k]} - \alpha^{k-L+1}) y(t) \right\} \end{aligned} \quad (5.131)$$

ここで,

$$\mathbf{D} = \mathbf{T}_f^T \Lambda \mathbf{T}_f + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} \quad (5.132)$$

と定義している。

Eq. (5.131) は簡単に次のように書き表すことができる。

$$C_D(d)u(t) = C_{N1}(d)r(t) - C_{N2}(d)y(t) \quad (5.133)$$

ここで,

$$C_D = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left\{ \mathbf{D}\mathbf{h} - \mathbf{T}_f^T \Lambda \mathbf{T}_o d + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} (\bar{\mathbf{G}}_o^{[k]} - F^{[k]} d G_{MI}) \right\} \quad (5.134)$$

$$C_{N1} = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} (R^k - \alpha^{k-L+1}) \quad (5.135)$$

$$C_{N2} = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} (F^{[k]} - \alpha^{k-L+1}) \quad (5.136)$$

である。Eq. (5.133) は, 安定プロセスの場合と同様, この制御系が2自由度制御系であることを示している。

5.3.3 閉ループ方程式

第5.3.2節で導出したコントローラの表現式 Eq. (5.133) に基づいて、制御系の閉ループ方程式を求める。Eqs. (5.108), (5.133) から、次の閉ループ方程式を得る。

$$(C_D + dG_P C_{N2})e(t) = \{C_D + dG_P(C_{N2} - C_{N1})\}r(t) - C_D v(t) \quad (5.137)$$

第5.3.4節以降において、閉ループ方程式 Eq. (5.137) に基づいて制御系の漸近的特性について議論するために、Eq. (5.137) を整理しておく必要がある。

本節の前提より、Eq. (5.137) において、プロセス dG_P は積分要素を有する。一方、コントローラの表現式 Eq. (5.131) については、モデル dG_M およびその過去に関連する部分 $\bar{G}_0^{[k]}$ が積分要素を有する。この事実を陽に表現するために、 $\bar{G}_0^{[k]}$ を以下のように書き換える。

モデルの無限級数表現 Eq. (5.114) において、 M ステップの制御区間を越える未来の操作量に関連する項を、

$$S^{[k]}(d) = \sum_{j=1-k}^{-M} \sum_{i=1}^{j+k} g_i d^j \quad (5.138)$$

とおくと、 $\bar{G}_{M1}^{[k]}$ は

$$\bar{G}_{M1}^{[k]} = dG_M d^{-k} - S^{[k]}(d) + S^{[k]}(1)d^{-M+1} \quad (5.139)$$

と表すことができる。さらに、多項式 $S^{[k]}(d)$ について、

$$dG_M d^{-k} - (1-d)S^{[k]}(d) = \sum_{i=1}^{k-M} g_i d^{-M+1} + \sum_{i=k-M+1}^N g_i d^{i-k} \quad (5.140)$$

という関係式が成り立つが、この右辺は、

$$y_M(t) = dG_M(d)u(t) \quad (5.141)$$

という安定モデルにおいて、制御区間 M を導入した場合の、 k ステップ先の出力を表す。すなわち、

$$\begin{aligned} y_M(t+k) &= \bar{G}_M^{[k]}(d)u(t) \\ &= \sum_{i=1}^{k-M} g_i d^{-M+1} u(t) + \sum_{i=k-M+1}^N g_i d^{i-k} u(t) \end{aligned} \quad (5.142)$$

における $\bar{G}_M^{[k]}$ に等しい。したがって、

$$\bar{G}_M^{[k]} = dG_M d^{-k} - (1-d)S^{[k]}(d) \quad (5.143)$$

を得る。以上より、

$$\begin{aligned} y_M(t+k) &= \bar{G}_M^{[k]} u(t) \\ &= \frac{\bar{G}_M^{[k]} + (1-d)S^{[k]}(1)d^{-M+1}}{1-d} u(t) \end{aligned} \quad (5.144)$$

となる。さらに、Eq. (5.116) において、

$$\mathbf{d}_f = \begin{bmatrix} 1 & d^{-1} & \dots & d^{-M+1} \end{bmatrix}^T \quad (5.145)$$

と定義すると、

$$\bar{G}_{MI}^{[k]} = \bar{G}_f^{[k]} \mathbf{d}_f + \bar{G}_o^{[k]} \quad (5.146)$$

が成立する。最終的に、Eqs. (5.144), (5.146) より、 $\bar{G}_o^{[k]}$ の表現式

$$\bar{G}_o^{[k]} = \frac{\bar{G}_M^{[k]} + (1-d)S^{[k]}(1)d^{-M+1} - (1-d)\bar{G}_f^{[k]} \mathbf{d}_f}{1-d} \quad (5.147)$$

を得る。これにより、 $\bar{G}_o^{[k]}$ が積分要素を有することが陽に示された。

以上をふまえて、Eq. (5.137) の両辺に $(1-d)d^{L+P-1}P$ を乗じて整理すると、次の閉ループ方程式を得る。

$$A(d)e(t) = P(d)B(d)(r(t) - v(t)) + dQ(d)C(d)r(t) \quad (5.148)$$

ここで,

$$\begin{aligned}
 A = & \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left[\mathbf{D} \mathbf{h} (1-d) d^{L+P-1} P - \mathbf{T}_f^T \Lambda \mathbf{T}_o (1-d) d^{L+P} P \right. \\
 & + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \left\{ P (d^{L+P-1} \bar{\mathbf{G}}_M^{[k]} + (1-d) d^{L+P-M} S^{[k]}(1) \right. \\
 & - (1-d) d^{L+P-1} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} \mathbf{d}_f - d^{L+P-1} F^{[k]} d G_M \left. \right\} \\
 & \left. + d^{L+P} Q (F^{[k]} - \alpha^{k-L+1}) \right\} \quad (5.149)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B = & \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left\{ \mathbf{D} \mathbf{h} (1-d) d^{L+P-1} - \mathbf{T}_f^T \Lambda \mathbf{T}_o (1-d) d^{L+P} \right. \\
 & + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \left(d^{L+P-1} \bar{\mathbf{G}}_M^{[k]} + (1-d) d^{L+P-M} S^{[k]}(1) \right. \\
 & \left. - (1-d) d^{L+P-1} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} \mathbf{d}_f - d^{L+P-1} F^{[k]} d G_M \right\} \quad (5.150)
 \end{aligned}$$

$$C = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} d^{L+P-1} (F^{[k]} - R^k) \quad (5.151)$$

である。

5.3.4 予測フィルタの設計条件

提案するモデル予測制御によって、ロバストなサーボ補償と漸近的外乱除去とを同時に実現するために、制御系が満たすべき必要十分条件を導出する。設定値 r と外乱 v の動特性が

$$r(d) = \frac{r_0}{1 - dR(d)} \quad (5.152)$$

$$v(d) = \frac{v_0}{1 - dV(d)} \quad (5.153)$$

で与えられるとすると、Eq. (5.148) より、次の閉ループ方程式を得る。

$$\begin{aligned}
 Ae(d) &= PB(r(d) - v(d)) + dQC r(d) \\
 &= PB \left(\frac{r_0}{1 - dR} - \frac{v_0}{1 - dV} \right) + dQC \frac{r_0}{1 - dR} \quad (5.154)
 \end{aligned}$$

この閉ループ方程式より、制御系がロバストなサーボ補償と漸近的外乱除去とを同時に実現するための必要十分条件は以下ようになる。

<必要十分条件>

制御系の閉ループ方程式が Eq. (5.154) で表される場合、その制御系がロバストなサーボ補償と漸近的外乱除去とを同時に実現するための必要十分条件は、次の3つの条件がすべて満たされることである。

- I1-1. 多項式 A が安定多項式である。
- I1-2. 多項式 B が多項式 $1 - dR$ および $1 - dV$ の不安定因子の最小公倍多項式を含む。
- I1-3. 多項式 C が多項式 $1 - dR$ の不安定因子を含むか、あるいは恒等的にゼロとなる。

条件 I1-1 は制御系が安定であることを要求するものである。以下では、適切なチューニングによって制御系は安定化できる、すなわち条件 I1-1 は満たされることとして議論を進める。

一方、条件 I1-2, I1-3 は、それぞれ以下のように表すことができる。

I1-2'. $B = (1 - dW(d))X(d)$ を満たす、恒等的にゼロではない多項式 X が存在する。ここで、 $1 - dW$ は $1 - dR$ および $1 - dV$ の不安定因子の最小公倍多項式である。

I1-3'. $C = (1 - dR_-(d))Y(d)$ を満たす多項式 Y が存在する。ここで、 $1 - dR_-$ は多項式 $1 - dR$ の不安定因子である。

以上より、ロバストなサーボ補償と漸近的外乱除去とを同時に実現する制御系を設計するためには、制御系が安定であることを前提として、次の2式を同時に満たす予測フィルタ $F^{[k]}$ を求めればよいことがわかる。

$$h^T D^{-1} \left[Dh(1-d)d^{L+P-1} - T_f^T \Lambda T_o(1-d)d^{L+P} \right]$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{G}_f^{[k]T} \{d^{L+P-1} \bar{G}_M^{[k]} + (1-d)d^{L+P-M} S^{[k]}(1) \\
& - (1-d)d^{L+P-1} \bar{G}_f^{[k]} d_f - d^{L+P-1} F^{[k]} d G_M\} = (1-dW)X
\end{aligned} \tag{5.155}$$

$$h^T D^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{G}_f^{[k]T} d^{L+P-1} (F^{[k]} - R^k) = (1-dR_-)Y \tag{5.156}$$

5.3.5 2型制御系の設計

2型の制御系を実現するために制御系が満たすべき必要十分条件を導出し、実際に予測フィルタの設計を行う。

予測フィルタの設計条件

第5.3.4節で導出した必要十分条件に基づいて、制御系が2型となるための必要十分条件を示す。制御系が2型となるための必要十分条件は、安定プロセスの場合と同様、以下のようになる。

<必要十分条件>

制御系の閉ループ方程式が Eq. (5.154) で表される場合、その制御系が2型となるための必要十分条件は、次の3つの条件がすべて満たされることである。

- I2-1. 多項式 A が安定多項式である。
- I2-2. 多項式 B が多項式 $(1-d)^2$ を含む。
- I2-3. 多項式 C が多項式 $(1-d)^2$ を含むか、あるいは恒等的にゼロとなる。

条件 I2-1 は制御系が安定であることを要求するものである。以下では、適切なチューニングによってこの条件を満たすことができると仮定する。

一方、条件 I2-2, I2-3 はそれぞれ以下のように表すことができる。

I2-2'. $B = (1-d)^2 X(d)$ を満たす、恒等的にゼロではない多項式 X が存在する。

I2-3'. $C = (1-d)^2 Y(d)$ を満たす多項式 Y が存在する。

以上より、2型の制御系を設計するためには、制御系が安定であることを前提として、次の2式を同時に満たす予測フィルタ $F^{[k]}$ を求めればよいことがわかる。

$$\begin{aligned}
 h^T D^{-1} & \left[Dh(1-d)d^{L+P-1} - T_f^T \Lambda T_o(1-d)d^{L+P} \right. \\
 & + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{G}_f^{[k]T} \{ d^{L+P-1} \bar{G}_M^{[k]} + (1-d)d^{L+P-M} S^{[k]}(1) \\
 & \left. - (1-d)d^{L+P-1} \bar{G}_f^{[k]} d_f - d^{L+P-1} F^{[k]} dG_M \right] = (1-d)^2 X
 \end{aligned} \tag{5.157}$$

$$h^T D^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{G}_f^{[k]T} d^{L+P-1} \{ F^{[k]} - (2-d)^k \} = (1-d)^2 Y \tag{5.158}$$

Eqs. (5.157), (5.158) から、予測フィルタが満たさなければならない条件を導出する。

まず、Eq. (5.157) について検討する。Eq. (5.143) を用いることにより、Eq. (5.157) を次式のように書き換えることができる。

$$\begin{aligned}
 h^T D^{-1} & \left[Dh(1-d)d^{L+P-1} - T_f^T \Lambda T_o(1-d)d^{L+P} \right. \\
 & + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{G}_f^{[k]T} \{ dG_M d^{L+P-1-k} - (1-d)d^{L+P-1} S^{[k]}(d) \\
 & + (1-d)d^{L+P-M} S^{[k]}(1) - (1-d)d^{L+P-1} \bar{G}_f^{[k]} d_f \\
 & \left. - d^{L+P-1} F^{[k]} dG_M \right] \\
 & = (1-d)^2 X
 \end{aligned} \tag{5.159}$$

ここで, Eq. (5.159) の左辺を次のように3つに分割し, それぞれについて検討する。

$$f_{11}(d) = (1-d)d^{L+P-1}\mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left(\mathbf{D}\mathbf{h} - \mathbf{T}_f^T \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{T}_o d - \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} \mathbf{d}_f \right) \quad (5.160)$$

$$f_{12}(d) = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} (1-d) \left(d^{L+P-M} \mathbf{S}^{[k]}(1) - d^{L+P-1} \mathbf{S}^{[k]}(d) \right) \quad (5.161)$$

$$f_{13}(d) = \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} d \mathbf{G}_M (d^{L+P-1-k} - d^{L+P-1} \mathbf{F}^{[k]}) \quad (5.162)$$

最初に, f_{11} を整理すると, 次式が得られる。

$$f_{11}(d) = (1-d)d^{L+P-1}\mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \left\{ \mathbf{T}_f^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{T}_f \mathbf{h} - \mathbf{T}_o d) + \sum_{k=L}^{L+P-1} \psi_k^2 \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]T} \bar{\mathbf{G}}_f^{[k]} (\mathbf{h} - \mathbf{d}_f) \right\} \quad (5.163)$$

ここで,

$$\mathbf{T}_f \mathbf{h} - \mathbf{T}_o d = \mathbf{T}_f \begin{bmatrix} 1-d & -d & \cdots & -d \end{bmatrix}^T \quad (5.164)$$

$$\mathbf{h} - \mathbf{d}_f = \begin{bmatrix} 0 & -d^{-1} & \cdots & -d^{-M+1} \end{bmatrix}^T \quad (5.165)$$

であることに注意すると,

$$\left. \frac{f_{11}(d)}{1-d} \right|_{d=1} = d^{L+P-1} \mathbf{h}^T \mathbf{D}^{-1} \mathbf{D} \begin{bmatrix} 0 & -1 & \cdots & -1 \end{bmatrix}^T = 0 \quad (5.166)$$

となる。このことから, f_{11} が $(1-d)^2$ を含むことがわかる。

f_{12} については, $d=1$ のとき

$$d^{L+P-M} \mathbf{S}^{[k]}(1) - d^{L+P-1} \mathbf{S}^{[k]}(d) = 0 \quad (5.167)$$

となることから, $(1-d)^2$ を含むことは明らかである。

ここまでの検討結果より, Eq. (5.159) の左辺が $(1-d)^2$ を因子として持つためには, f_{13} が $(1-d)^2$ を含まなければならないことがわかる。ところで, f_{13} が $(1-d)^2$ を因子として持つための条件は安定プロセスの場合と同一である。したがって, 予測フィルタが満たすべき条件として

$$F^{[k]}(1) = 1 \quad (5.168)$$

$$F^{[k]'}(1) = -k \quad (5.169)$$

が得られる。

次に, Eq. (5.158) についてであるが, この条件についても安定プロセスの場合と同一の議論が成立するため, 予測フィルタが満たすべき条件は, Eqs. (5.168), (5.169) で与えられることがわかる。

以上より, 2型の制御系を実現するためには, 予測フィルタが Eqs. (5.168), (5.169) を満たせば十分である。言い換えると, Eqs. (5.168), (5.169) を満たす予測フィルタを設計すれば, 制御系は (安定であれば) 必ず2型の制御系となる。

予測フィルタの設計

上記の結果から, 対象プロセスが積分要素を有するか安定であるかによらず, 予測フィルタの設計条件は Eqs. (5.168), (5.169) で与えられることがわかる。したがって, 対象プロセスが積分要素を有する場合であっても, 第5.2.5節で設計した予測フィルタをそのまま利用することができる。

5.3.6 反射炉プロセスの制御

予測フィルタ付きモデル予測制御の有効性を検証するために, 提案する制御アルゴリズムを反射炉プロセスの制御問題へ適用することを考え, その制御シミュレーションを行う。

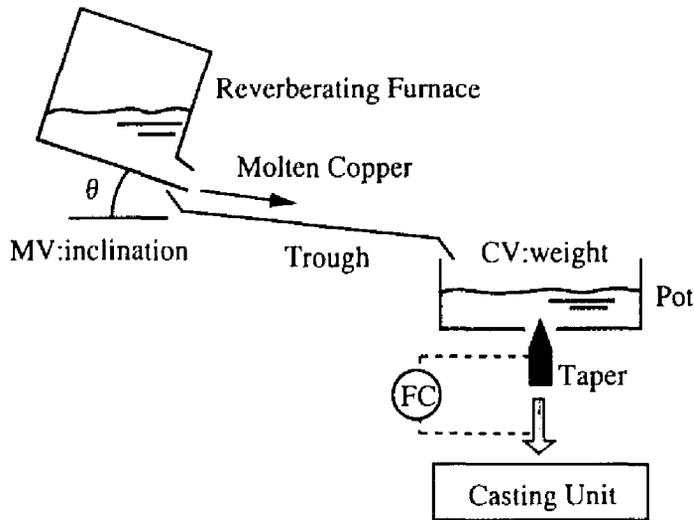


Fig. 5.15 Schematic diagram of the process.

対象プロセス

制御対象とするプロセスは、銅を溶融させ、その溶融銅を鋳造装置に供給するための装置群であり、反射炉、流路、およびポットから構成されている。対象プロセスの概略図を Fig. 5.15 に示す。反射炉内で溶融された銅は流路を通してポットに送られる。このポットはバッファータンクの役割を果たしており、ポットから鋳造装置への溶融銅の供給量が一定値になるように、テーパーを用いた流量制御が行われている。これは、鋳造装置への供給量が許容範囲を超えて変動すると、鋳造製品の品質に悪影響が出るためである。ところが、この流量制御が精密には動作しないため、ポット内の液レベルが変化すると、その影響によって鋳造装置への供給量変動し、鋳造製品の品質が低下してしまうという問題が生じている。

したがって、このプロセスの制御目的は、反射炉からの溶融銅の流出流量を適切に操作することにより、ポット内の液レベルを一定に保持することとなる。しかし、反射炉からの流出流量は、直接測定も操作もできないため、実際の操作量は反射炉の傾転角である。以上をまとめると、対象プロセスの特徴として、次の4項目を挙げることができる。

1. ポットからの流出流量が定値制御されているため、プロセスは積分要素を有する。
2. プロセスが積分要素を持つために、外乱として付加されるポットへの流入流量のステップ状変化が、ポットの液レベルに対してランプ状に影響を及ぼす。
3. 反射炉とポットの間流路が存在するため、プロセスはむだ時間を有する。
4. 反射炉の傾転角が操作量であるため、プロセスは強い非線形性を有する。

以上の特徴を持つプロセスに対して、これまではPID制御が適用されてきた。ただし、プロセスの非線形性を除去するために、反射炉の傾転角と流出流量との関係を表すモデルを用いて、反射炉からの流出流量がコントローラ出力（操作量）として用いられている。しかし、PID制御では、長い流路の存在に起因するむだ時間を補償できないために、十分な制御性能を実現することができていない。

むだ時間を補償する方法として、スミス補償器が広く利用されている。しかし、積分要素を持つプロセスに対してスミス補償器を適用すると、たとえPID制御を利用したとしても、コントローラの積分要素が打ち消されてしまうため、制御系は1型となる。したがって、ランプ状外乱に対処しなければならないプロセスに対して、スミス補償器を適用することはできない。モデル予測制御を適用する場合も同様である。本節の始めに示した仕組みにより、コントローラが積分要素を持たなくなるため、従来のモデル予測制御アルゴリズムでは、ここで対象とするプロセスに対してオフセットフリーな制御系を構築することはできない。そこで、このプロセスに対して、提案する2型モデル予測制御を適用し、その有効性について検討する。

構築する制御系の構造を Fig. 5.16 に示す。制御対象は反射炉とポットから構成されており、操作量は反射炉の傾転角 θ である。しかし、傾転角を操作量とすると、制御対象が強い非線形性を示すため、ここでは、反射炉からの流出流量を操作量とする。なお、この流出流量は直接測定も操作もできないため、反射炉の物理モデルを用いて、コントローラ出力として与えられる流出流量を傾転角に変換し、その傾転角をアクチュエータに伝達する。この変換器を制御対象の一部とみなすことにより、制御対象を線形化することができる。一方、制御量はポッ

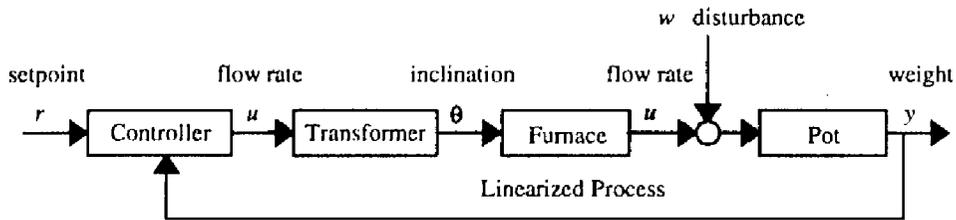


Fig. 5.16 Block diagram of the control system.

ト重量（液レベル）である。このプロセスに加わる外乱は主に、反射炉出口付近に不純物が詰まること、およびその詰まりが除去されることによる流量の変動である。この流量の変動はステップ状変化であるため、制御量であるポット重量にはランプ状に影響を及ぼす。物質収支式から明らかなように、ポットの動特性、すなわちポットへの流入流量とポット重量との間の動特性は、積分要素で表現される。また、流路の動特性はむだ時間で表現することができ、この値は30秒程度であることが経験的に知られている。以上より、変換器を含めた制御対象のモデルとして、次式が得られる。

$$y_M(s) = \frac{1}{s} e^{-30s} u(s) \quad (5.170)$$

なお、制御アルゴリズムの有効性を明確にするために、変換器は反射炉の特性を完全に表現できると仮定する。

制御シミュレーション

反射炉プロセスに対して、2型モデル予測制御を適用する。予測フィルタとしては、第5.2.5節で示した、最も次数の低いフィルタを用いる。

$$F^{[k]} = 1 + k(1 - d) \quad (5.171)$$

プロセスのモデルはEq. (5.170)で与えられるとする。一方、プロセスは、

$$y(s) = \frac{1}{Ts} e^{-Ds} u(s) \quad (5.172)$$

で表されたとする。ここで、 T, D にはTable 5.1に示した値を用いる。モデル誤

Table 5.1 Parameters of process transfer function

Case	T	D [sec]
1	1	30
	1×0.9	30
	1×1.1	30
	1	30×0.9
2	1×0.9	30×0.9
3	1×1.1	30×0.9
	1	30×1.1
4	1×0.9	30×1.1
5	1×1.1	30×1.1

差の影響について検討するために、 T, D のすべての組み合わせを考え、合計9種類の異なる動特性を有するプロセスを対象として制御シミュレーションを行った。チューニングに際して、9種類のプロセス動特性に対して制御シミュレーションを行い、結果として得られる制御性能の中で最悪の性能を最良とするような制御パラメータを採用した。なお、ISEなどの指標を用いて制御パラメータの最適化を行うと、制御応答に振幅の小さな振動が長時間残る。そのため、ここでは、定量的な評価基準を用いることなく、制御応答の速応性と振動性との妥協点を探索した。チューニングの結果、最適と思われる制御パラメータは次のようになった。

$$L = 7, P = 10, M = 1, \alpha = 0, \lambda = 20000$$

この制御パラメータを用いて制御シミュレーションを行った結果を Figs. 5.17, 5.18 に示す。これらのシミュレーションでは、シミュレーション開始後5秒の時点で、 $-0.02/s$ のステップ状外乱がポットへの流入流量に付加されている。なお、プロセスが積分要素を有するため、流入流量のステップ状変化は、制御量であるポット重量に対してランプ状に影響を及ぼしている。さらに、500秒の時点で、設定値を0から-1にステップ状に変更している。

これらのシミュレーション結果から、プロセスとモデルのパラメータ誤差が $\pm 10\%$ 程度であれば十分に制御が可能であること、さらには、モデル誤差が存在する場合でもランプ状外乱に対してオフセットフリーな制御系が実現できていることが確認できる。

5.4 結言

安定プロセスおよび積分要素を有するプロセスに対して、2型の制御系を実現できるモデル予測制御アルゴリズムを提案した。提案したアルゴリズムでは、予測式中に予測フィルタを導入することによって、プロセスとモデルとの出力の差に適切な動特性を持たせ、モデル予測制御の枠組みの中で内部モデル原理を実現することに成功した。予測フィルタと併せて、安定プロセスに対しては、制御区間 M を越える未来の操作量の傾きを一定とするように、アルゴリズムの改良を行った。

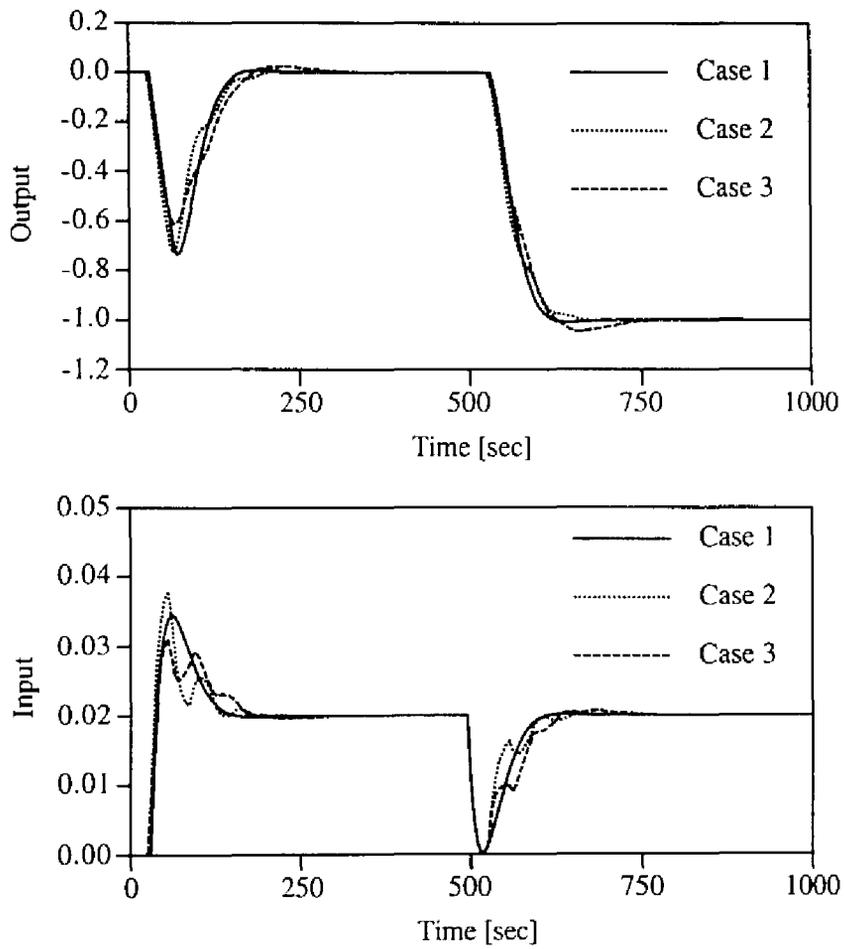


Fig. 5.17 Control simulation results (1).

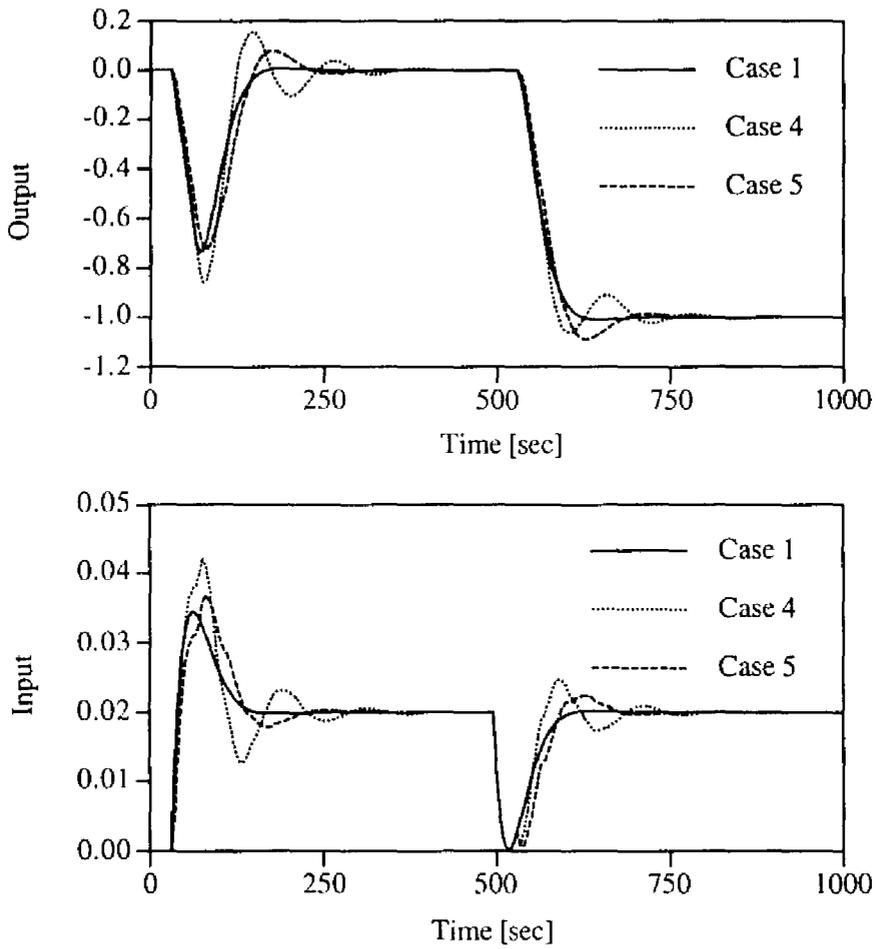


Fig. 5.18 Control simulation results (2).

2型の制御系を実現するために、制御系および予測フィルタが満たすべき必要十分条件を導出した。さらに、導出した必要十分条件に基づいて、予測フィルタを実際に設計した。設計した予測フィルタはいずれも、プロセスとモデルとの出力の差を現時刻以降ランプ状に保つ効果があることを示した。このように物理的な解釈が容易な予測フィルタを用いることにより、従来のモデル予測制御が持つ『アルゴリズムの理解しやすさ』という長所を継承することができる。また、多くの制御シミュレーションを行い、提案したアルゴリズムの有効性を確認した。

5.5 記号説明

Symbols

$a_n^{[k]}$	coefficient of prediction filter
C	feedback controller
C_D	denominator polynomial of controller
C_{IMC}	IMC controller
C_{N1}, C_{N2}	numerator polynomials of controller
D	dead time of the process
D	constant matrix
d	backward shift operator
d_f	polynomial vector of d
dG_M	descrete time transfer function of model
dG_{MI}	descrete time transfer function of model with integrator
dG_P	descrete time transfer function of process
e	output deviation from its setpoint
e_p	error between predicted value of process output and model output
$F^{[k]}$	prediction filter related to $y_P(t+k)$
$\bar{G}_f^{[k]}$	constant vector related to future inputs for predicting model

	output at time $t + k$
$\tilde{G}_M^{[k]}$	impulse response model for predicting model output at time $t + k$
$\tilde{G}_{MI}^{[k]}$	discrete time transfer function of model with integrator for predicting model output at time $t + k$
$\tilde{G}_o^{[k]}$	polynomials related to past inputs for predicting model output at time $t + k$
g_i	i -th impulse response coefficient
h	constant vector
J	cost function
L	starting point of coincidence horizon
M	steps of control horizon
P	steps of coincidence horizon
P, Q	polynomial of d , describing process dynamics
R	polynomials describing dynamics of setpoint
R_-	polynomials of d , $1 - dR_-$ is the unstable factor of $1 - dR$
r	setpoint
$S^{[k]}$	future part of $\tilde{G}_{MI}^{[k]}$
s	laplace operator
T	integral time of the process
T_f	constant matrix
T_M	integral time of model
T_o	constant vector
T_P	integral time of process
t	current time
u	process input, manipulated variable
u_f	vector of future inputs
V	polynomials describing dynamics of disturbance
v	disturbance
W	polynomials of d , $1 - dW$ is the Least Common Multiple of $1 - dR$ and $1 - dV$

w	disturbance
X, Y	polynomials of d
y	process output, controlled variable
y_M	model output
y_P	predicted value of process output
y_R	reference trajectory

Greek Characters

Δ	$= 1 - d$
α	tuning parameter in reference trajectory
θ	inclination of the furnace
Λ	weighting matrix for input change
λ	weighting value for input change
τ	time constant of IMC filter
ψ	weighting value for output deviation

Superscripts

T	transpose
$'$	differential

5.6 参考文献

1. Qin, S. J. and T. A. Badgwell. "An overview of industrial model predictive control technology". *AIChE Symposium Series No.316*. **93**. 232-256 (1997); *Proceedings of the Fifth International Conference on Chemical Process Control (CPC-V)*, Tahoe City, California (1996)
2. Richalet, J., S. Abu El Ata-Doss, C. Arber, H. B. Kuntze, A. Jacubasch, and W. Schill, "Predictive functional control. Application to fast and

- accurate robots”, *10th IFAC World Congress*, 261-268, Munich (1987)
3. Richalet, J., S. Abu El Ata-Doss, L. Delineau, and J. L. Estival, “Model based predictive control of exotic systems”, *11th IFAC World Congress*, 240-247, USSR (1990)
 4. Ohno, H., M. Ohshima, and I. Hashimoto, “Model-Based Predictive Control and Internal Model Principle”, *Proceedings of IFAC Symposium on Advanced Control of Chemical Processes (ADCHEM'91)*, France (1991)
 5. M. Morari and E. Zafiriou, “Robust process control”, Prentice Hall, New Jersey (1989)

第6章

総論

本研究では、化学プロセスのより高度な運転を実現するために、今後益々その重要性が認識されるであろうプロセス制御技術についての研究を行った。

第3章では、ナフサ分解炉反応管外壁温度推定システムを開発した。ナフサ分解炉の運転効率を高く維持すると同時に、エチレンプラントの生産要求を満たすためには、ナフサ分解炉のデコーキング開始時期を適切に決定する必要がある。デコーキングは反応管外壁温度すなわちスキン温度が許容限界温度を超える前に開始しなければならないことから、正確なスキン温度が必要不可欠な情報となる。そこで、ナフサ分解炉のスキン温度を推定するために、1) 物理モデルの構築、2) 物理モデルでは表現しきれないスキン温度の挙動(推定誤差)を表現するための統計モデルの構築、という2段階からなるモデリング手法を提案した。

物理モデルの構築に際しては、その目的がスキン温度の推定であることから、極めて詳細な反応モデルは採用せず、コーク成長速度モデルと伝熱モデルとからなる簡易モデルを導出した。この簡易な物理モデルを利用することにより、数少ない実測データに基づいて、高い精度でスキン温度を推定することが可能となった。ただし、運転状態が大きく変化する場合には、スキン温度の変化を物理モデルだけでは表現しきれないことが確認された。そこで、物理モデルによる推定値を補正する目的で、オンライン測定可能なプロセス変数を入力変数とする統計モデルを構築した。対象としたナフサ分解炉では、複数の制御系の影響により、プロセス変数が互いに高い相関を有するため、多重共線性の問題を回避する目的で

PLS を利用した。

構築した推定モデルを実操業データに適用し、その有効性を確認した。このような2段階からなるモデリングを行うことによって、物理モデルと統計モデルの長所を併せ持ち、より広範な運転状態に対して適用可能なモデルの構築が可能となった。

第4章では、多成分蒸留塔の製品組成をオンライン測定可能なプロセス変数から推定できる組成推定モデルを、PLS を利用して構築した。入力変数としては、塔内温度、還流量、リボイラー熱負荷、リボイラー圧力の4種類の変数を採用し、様々な組み合わせについて組成推定モデルの構築と評価を行った。その結果、今回対象とした蒸留塔については、還流量、リボイラー熱負荷、リボイラー圧力を入力変数として利用することにより、塔内温度測定段数を合計5段程度としても、十分に高い精度で製品組成が推定できることがわかった。さらに、定常状態モデル、静的モデル、動的モデルの3種類の組成推定モデルを比較し、動的モデルの利用によって推定精度を大幅に改善できることを示した。

構築した動的 PLS モデルに基づいて計算される製品組成推定値を制御量として利用する製品組成推定制御について検討した。単純な組成推定制御系を採用した場合、組成制御を強くすると推定精度が低下してしまうという状況が発生したため、期待に反して塔内温度制御よりも制御性能を改善することはできなかった。この原因は、温度制御下で得られたモデル構築用データが組成推定制御下での運転状態を十分に代表していなかったことにある。しかし、温度制御時に制御パラメータを変化させることによって、運転データがより広範な運転状態を代表することに着目し、そのようなデータから構築した組成推定モデルを組成推定制御に適用することによって、推定精度および制御性能を改善できることを示した。さらに、製品組成をフィードバック制御すると同時に、原料外乱および塔他端における操作が製品組成に与える影響をフィードフォワード的に補償するために、塔内温度制御を内側ループに、製品組成制御を外側ループに採用したカスケード制御系が有効であることを示した。

第5章では、安定プロセスおよび積分要素を有するプロセスに対して、2型の制御系を実現できるモデル予測制御アルゴリズムを提案した。提案したアルゴリズムでは、予測式中に予測フィルタを導入することによって、プロセスとモデル

との出力の差に適切な動特性を持たせ、モデル予測制御の枠組みの中で内部モデル原理を実現することに成功した。予測フィルタと併せて、安定プロセスに対しては、制御区間を越える未来の操作量の傾きを一定とするように、アルゴリズムの改良を行った。

2型の制御系を実現するために、制御系および予測フィルタが満たすべき必要十分条件を導出した。さらに、導出した必要十分条件に基づいて、予測フィルタを実際に設計した。提案する2型モデル予測制御アルゴリズムを用いて数多くのシミュレーションを行い、その有効性を確認した。

化学産業界では、省資源省エネルギー化および製品の高品質化を徹底的に追及した運転を実現することが強く望まれている。このような極限状態での運転を実現する過程において、これまでに、プロセスの構造が複雑になると同時に、運転の高度化や情報の統合化など様々な対策が講じられてきた。現在、次世代運転管理システムの在り方に関する議論が盛んに行われており、その議論の中で、今後積極的な研究活動を必要とする課題として、序論でも述べた通り、

1. 品質などオンライン測定が困難な状態量の推定と制御
2. プラントワイド制御
3. 設計と制御の統合
4. オンライン動的最適化
5. 制御性能監視
6. システム同定（閉ループ同定）と制御系設計の統合

などが挙げられている。当然ながら、これらの要素技術の研究と実用化を進めると同時に、運転の基盤となるプロセス制御技術の高度化をも推進する必要がある。

化学プロセスの挙動を理解し、その運転について検討するためには、対象プロセスのモデルが必要不可欠である。理想的には、正確な物理モデルに基づいてプロセスの設計・運転・監視を行うべきであるが、複雑な化学反応を含み、様々な物性の影響を受ける化学プロセスのモデル化は非常に困難な作業と言える。一方、分散型制御システム（DCS）の開発と計算機能力の向上とによって、プロセス変数のオンライン監視と高度制御が可能になったが、膨大な測定データの多くは計算機の内部に保存されるだけであり、そこから得られるはずの情報はプラントの

運転にフィードバックされていないことが多い。このような状況においては、膨大な測定データに基づくモデルの構築、さらにそのモデルに基づくプロセスの運転や監視が有効な手段であると考えられる。本研究の狙いはまさにこの部分にあり、オンライン測定データを運転の高度化に活かす方法を具体的に提示した。膨大なデータを扱うに際して、PLSやPCAに代表される多変量解析手法は非常に強力な道具となる。今後益々多変量解析手法の適用範囲は広がりを見せられる。

一方、近年の化学プロセスシミュレーション技術の飛躍的な向上は、プロセス運転管理システムの在り方を大きく変貌させていくであろう。従来は、制御には伝達関数モデルなどの制御用モデル、異常検出には異常検出用モデルが利用されており、各モデルの整合性などについて議論されることはほとんどなかった。しかし、精密な動的物理モデルが利用可能となれば、そのモデルに基づいて制御や異常検出など多くの運転管理業務を行うことができる。すなわち、物理モデルを中心として運転管理システム全体が構築されることになる。

1970年代後半に登場したモデル予測制御は化学産業界に急速に浸透し、プロセス制御の高度化に大きく貢献した。モデル予測制御は、制約条件を容易に取り扱える、上位の最適化機構と連動させることによりプラント全体の最適化運転を容易に行えるなど、多くの優れた特質を有している。今後は、バッチプロセスをはじめとする非定常運転時の制御への適用も進むであろう。その場合、動的最適化によって導出された最適軌跡を通るように、運転状態を変化させることが要求される。本研究で提案した2型モデル予測制御は、そのような制御を実現する一手法となろう。この点に関しては、高分子重合反応プロセスの銘柄変更への適用などを通して検討していきたい。

次世代の化学プロセスには、地球環境との調和を保ちながら、従来とは比較にならないほどの高機能性・高品質性を備えた製品を生産することが要求されるであろう。この要求に応えられる運転管理システムの実現に向けて、より一層の研究が期待される。

謝辞

本研究は、1992年に小生が修士課程に進学して以来、プロセスシステム工学研究室において行われたものであります。この間、終始温かい御指導と叱咤激励を賜りました京都大学大学院工学研究科化学工学専攻教授 橋本伊織 先生に心より感謝いたします。先生には、プロセスシステム工学について全く無知であった小生に、論文の読み方やレポートの書き方など非常に基礎的な事柄をも直接御指導いただき、修士課程修了後研究者として大学に残る道を開いていただき、また、世界の第一線で活躍する研究者と議論する場を数多く設けていただきました。これらの経験一つ一つが小生の財産となっております。

本論文を完成させるのに際して、貴重な御助言を賜りました情報学研究科数理工学専攻教授 片山徹 先生と工学研究科電気工学専攻教授 荒木光彦 先生に厚くお礼申し上げます。

研究に關して的確な御助言をいただくとともに、学生らと共に数学書を読み、論理的に思考する力を身に付けさせて下さった長谷部伸治助教授に深く感謝いたします。また、小生をプロセス制御の分野へ導いて下さり、研究者としての第一歩を踏み出すために御尽力いただきました大嶋正裕助教授に心よりお礼申し上げます。そして、モデル予測制御や多変量解析手法など広範囲な分野において、多くの有益な御助言をいただきました神戸大学工学部応用化学科助教授大野弘 先生に心より感謝いたします。

本研究を遂行するに際しましては、多くの方々に御尽力いただきました。ナフサ分解炉スキン温度推定システムを構築するに際して、貴重なデータを提供して下さいました大阪石油化学の青木昌二氏、大変有益な助言をいただくとともに、データの整理とモデル構築に多くの時間を費やしていただきました東洋エンジニ

アリングの大加茂梅太郎氏、鈴木剛氏に感謝いたします。また、反射炉の制御問題を提示していただきました古河電気工業の栗原和郎氏、阪本俊幸氏にお礼申し上げます。さらに、当時化学工学教室の学生であった枝連俊弘氏、吉野正人氏、宮崎浩一氏、尹榮徳氏の各氏にはシミュレーションプログラムの作成などいろいろと手助けをしていただき、村上佳広氏、黒岡武俊氏、谷口智氏、内藤清嗣氏、北島禎二氏には計算機ネットワークの管理をしていただくとともに、計算機の利用に関して多くを教えていただきました。また、野田賢助手には、多岐にわたる問題について助けていただきました。ここに記して謝意を表します。

さらに、目頃から励ましの言葉をいただいた研究室の先輩、同級生、後輩の皆様や、化学工学教室の他講座の先生方をはじめとするすべての方々に厚くお礼申し上げます。

本論文にまとめました研究成果は、いくつかの国際会議でも発表しております。英語力の乏しい小生のために、論文や発表原稿の推敲をはじめ、発表練習の際には発音のチェックまでしていただき、いつも温かく励まして下さいました橋本敏子様は心よりお礼申し上げます。

最後に、いつも温かく見守ってくれ、研究者としての道を歩むことを応援してくれた両親と、そばで励ましてくれた伊藤重妃嬢に感謝します。

本研究論文に関する著者の発表論文

1. 加納学, 枝連俊弘, 長谷部伸治, 橋本伊織, 大嶋正裕, 大加茂梅太郎, 鈴木剛, 青木昌二, “物理モデルと PLS モデルを併用したナフサ分解炉スキン温度推定システムの開発”, 化学工学論文集, **22**, 5, 1130-1137 (1996)
2. 加納学, 大野弘, 長谷部伸治, 橋本伊織, “サーボ問題および漸近的外乱除去問題へのモデル予測制御の適用”, 化学工学論文集, **23**, 3, 421-427 (1997)
3. 加納学, 宮崎浩一, 長谷部伸治, 橋本伊織, “Partial Least Squares Regression を用いた蒸留塔製品組成の推定制御”, 化学工学論文集, **24**, 3, 425-430 (1998)

国際会議での発表

4. Kano, M., T. Shiren, M. Ohshima, U. Okamo, S. Aoki, and I. Hashimoto, “On-line inference system of tube-wall temperature for an industrial olefin pyrolysis plant”, *AIChE Symposium Series No.316*, **93**, 292-296 (1997); *Proceedings of the Fifth International Conference on Chemical Process Control (CPC-V)*, Jan. 7-12, Tahoe City, California (1996)
5. Kano, M., H. Ohno, S. Hasebe, I. Hashimoto, K. Kurihara, and T. Sakamoto, “Extended Model Predictive Control Algorithm for Solving Servo and Regulator Problems and its Application to a Reverberating Furnace”, *Proceedings of IFAC Symposium on Advanced Control of Chemical Processes (ADCHEM'97)*, 658-663, June 9-11, Banff, Canada (1997)
6. Kano, M., K. Miyazaki, S. Hasebe, and I. Hashimoto, “Inferential Control System of Distillation Compositions Using Dynamic Partial Least Squares Regression”, *Preprints of 5th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS-5)*, 377-386, June 8-10, Corfu, Greece (1998)