

# EQUATRAN-M による統計解析と最適化計算

工東 光夫・須藤 精一

今回は方程式解法ソフト EQUATRAN-M を用いた統計に関する計算と最適化の問題を取りあげる。まず、化学工業でよく現れる実測データを用いて回帰分析を中心とした最小二乗法によるあてはめの問題について述べた後、やや複雑になるが主成分分析による工程データの解析について説明する。次に、仮想的な化学プロセスを例に投資利益率を最大にする問題を紹介します。これらの例を通して方程式解法ソフトの便利さ、強かさ、直感的な理解のしやすさ、融通性の良さなどを理解頂けることと思う。

に解説されているが、ここではソーステキスト中の  $n$  を 5 に置き換えることを意味している。また 21 行目は最小二乗法の目的関数  $f$

$$f = \sum_{i=1}^n (d_i - d^{cal}_i)^2 \quad (3)$$

を表している。ここで  $d_i$  および  $d^{cal}_i$  は  $i$  番目の密度のデータと (1) 式による計算値である。さらに、22 ~ 23 行目は FIND 文といい、 $f$  を最小にするような  $A$  および  $B$  を、共に初期値を 1、範囲

$$0.01 \leq A \leq 10, 0.01 \leq B \leq 10 \quad (4)$$

で求めよという指定である。

図 1 のソーステキストを実行すると図 2 の計算結果のようになり、 $A$  および  $B$  の値を得、そのとき  $f$  は、

## 回帰分析

一般的に統計の分野では問題が方程式で記述されるということはありません。しかし回帰分析における正規方程式や最小二乗法は、EQUATRAN-M の方程式解法機能、あるいは最適化機能を十分に発揮できる場面といえよう。よくある例として次のような問題がある。

### 〈水の密度〉

飽和液体の水の密度について表 1 に示すデータがある。このデータを最小二乗法により次式

$$d = A \cdot B^{-(1-Tr)^{2/7}} \quad (1)$$

にあてはめて  $A$  と  $B$  を求めよ。ここで、 $d$  は密度 [g/cm<sup>3</sup>]、 $Tr$  は対臨界温度 [-] で、水の臨界温度を  $t_c (= 374.15)$  [°C]、温度を  $t$  [°C] とすれば、

$$Tr = (t + 273.15) / (t_c + 273.15) \quad (2)$$

である。

この問題を EQUATRAN-M で文字通り最小二乗法で記述してみると、たとえば図 1 のようになる。このように、現れる式をそのまま書いた後に最小二乗法の目的関数を定義するだけで解を得る。図 1 の 2 行目は LOCAL 文でパラメータの値を設定するためのものであり、本連載第 2 回<sup>2)</sup>

表 1 水 (飽和液体) の密度

温度 [°C]	200	250	300	350	374
密度 [g/cm <sup>3</sup> ]	0.865	0.799	0.712	0.572	0.36

図 1 水の密度の問題のリスト

```

1: /* 水 (飽和液体) の密度 */
2: LOCAL n=5
3: VAR t(n) "温度 [ ° C ]"
4: .d(n) "密度 [ g/cm3 ]"
5: .dcal(n) "密度 (計算値) [ g/cm3 ]"
6: .Tr(n) "対臨界温度 [-]"
7: .tc = 374.15 "臨界温度 [ K ]"
8: .A "Aパラメータ [-]"
9: .B "Bパラメータ [-]"
10:
11: /* 実験データ 出典 : 大江,
12: "実例ハコソコ実験データの整理" (講談社サイエンティク) p.20 */
13: d = ( .865, .799, .712, .572, .360 )
14: t = ( 200, 250, 300, 350, 374 )
15:
16: /* 密度の計算 */
17: dcal = A * B^( -(1-Tr)^(2/7) )
18: Tr = ( t + 273.15 ) / ( tc + 273.15 )
19:
20: /* 最小二乗法 */
21: f = SUM( ( d - dcal )^2 )
22: FIND( A # 1 [ 0.01, 10 ], B # 1 [ 0.01, 10 ] )
23: MINIMIZE f UNTIL 0.001%
24:
25: OUTPUT t,d,dcal,A,B,f
26: OUTPUT1 t,d,dcal
    
```

図2 水の密度の問題の解

```

[ 計算結果 ]
t      =      : 温度      [ ° C ]
1) 200      2) 250      3) 300      4) 350
5) 374
d      =      : 密度      [ g/cm³ ]
1) 0.865    2) 0.799    3) 0.712    4) 0.572
5) 0.36
dcal   =      : 密度(計算値) [ g/cm³ ]
1) 0.8733352  2) 0.7966101  3) 0.7036933  4) 0.5679156
5) 0.3677696
A      = 0.3220203 : A°ラメータ [ - ]
B      = 0.234145  : B°ラメータ [ - ]
f      = 0.0002212365
    
```

図3 水(飽和液体)の密度

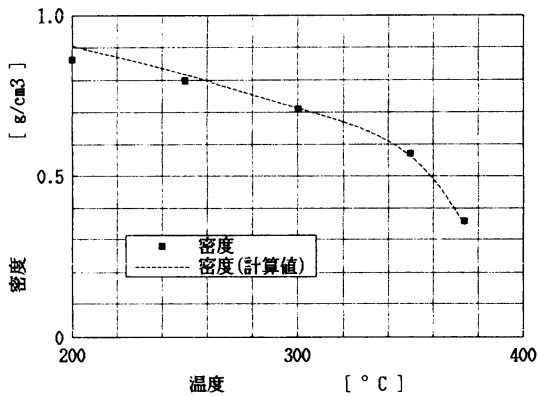


表2 実測データ

No.	x <sub>1</sub>	x <sub>2</sub>	x <sub>3</sub>	.....	x <sub>p</sub>	y
1	x <sub>11</sub>	x <sub>12</sub>	x <sub>13</sub>	.....	x <sub>1p</sub>	y <sub>1</sub>
2	x <sub>21</sub>	x <sub>22</sub>	x <sub>23</sub>	.....	x <sub>2p</sub>	y <sub>2</sub>
3	x <sub>31</sub>	x <sub>32</sub>	x <sub>33</sub>	.....	x <sub>3p</sub>	y <sub>3</sub>
.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....
n	x <sub>n1</sub>	x <sub>n2</sub>	x <sub>n3</sub>	.....	x <sub>np</sub>	y <sub>n</sub>

$$f = 0.0002212365 \quad (5)$$

であることを知る。なお、図3に温度と密度の関係を EQU ATRAN-M によるグラフで示す。

ところで、(1)式は A および B について非線形であるが、両辺の対数をとれば、

$$\log d = \log A - (1 - T_r)^{2.7} \cdot \log B \quad (6)$$

となり、log A および log B について線形となることから後に述べる正規方程式により A と B を求めることもできる。この場合の解は、

$$\left. \begin{aligned} A &= 0.31703 \\ B &= 0.2273136 \\ f &= 0.0002709097 \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

であり、図2の解と異なる。これは、(5)式で示した解が A および B についての最小二乗解であるのに対し、(7)式の解は log A および log B についての最小二乗解であることによる。

#### 〈一般的な取り扱い方〉

さて、あてはめたい式、すなわち回帰式の中の求めるべき定数について線形であるか、もしくは先の問題のように何らかの変換により線形にできるとき、正規方程式により定数(回帰係数)を求めることができる。いま p 個の説明変数 x<sub>1</sub>, x<sub>2</sub>, x<sub>3</sub>, ..., x<sub>p</sub> の 1 組につき、目的変数 y の値が 1 個測定されており、このデータが n 組あるとする(表2)。このデータに対し次のような回帰式

$$\hat{y}_i = a_0 + a_1x_{i1} + a_2x_{i2} + \dots + a_px_{ip} \quad (i=1, 2, 3, \dots, n) \quad (8)$$

をあてはめるとする。ここで、 $\hat{y}_i$  は  $y_i$  の計算値、すなわち回帰推定値、 $a_0, a_1, a_2, \dots, a_p$  は回帰係数である。回帰係数を求めるには最小二乗法の考え方により、

$$F = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (9)$$

を各係数で偏微分した式を 0 とおいた連立一次方程式

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial a_0} &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \cdot 1 = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial a_1} &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \cdot x_{i1} = 0 \\ \dots \dots \dots \\ \frac{\partial F}{\partial a_p} &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i) \cdot x_{ip} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

を解けばよい。これが正規方程式であり、この方程式を EQUATRAN-M で書けば回帰係数を求めることができる。後に述べる Ethanol の蒸気圧の問題は(10式)を用いて解いた例である。ここではさらに(10式)を書き直して

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_{11} & x_{21} & \dots & x_{n1} \\ x_{12} & x_{22} & \dots & x_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1p} & x_{2p} & \dots & x_{np} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_{11} & x_{21} & \dots & x_{n1} \\ x_{12} & x_{22} & \dots & x_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1p} & x_{2p} & \dots & x_{np} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_n \end{pmatrix} \quad (11)$$

ここで、

$$\begin{pmatrix} \hat{y}_1 \\ \hat{y}_2 \\ \vdots \\ \hat{y}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{np} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix} \quad (12)$$

であることから、(12式)を(11式)に代入して左右両辺を交換すると次式のように表現できる。

$$\mathbf{X}^T \cdot \mathbf{X} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{X}^T \cdot \mathbf{y} \quad (13)$$

この(13式)も正規方程式のもう 1 つの表現である。ここで、行列  $\mathbf{X}$  を X 表、 $\mathbf{X}$  の転置行列  $\mathbf{X}^T$  と  $\mathbf{X}$  の積  $\mathbf{X}^T \cdot \mathbf{X}$  を A 表

表 3 水の流速

壁面からの距離, y [cm]	速度, u [cm/sec]	y	u
0.003	0.03	0.056	0.85
0.021	0.32	0.061	0.92
0.025	0.30	0.070	1.05
0.025	0.33	0.078	1.17
0.037	0.57	0.085	1.32
0.043	0.66	0.092	1.38
0.049	0.74	0.106	1.57
0.053	0.80	0.113	1.65
0.055	0.84		

表 4 Ethanol の蒸気圧

温度 [°C]	78.4	97.5	126.0	151.8	183.0	203.0	218.0	230.0	242.0
圧力 [atm]	1	2	5	10	20	30	40	50	60

と呼ぶこともある。(13式)を使った例を次に見てみよう。

〈管内の水の流速〉

内径 1 インチの管を流れる水の壁面近くにおける流速が表 3 のように測定されている。理論上、水の水速度  $u$  [cm/sec] は壁面からの距離  $y$  [cm] に対して次の 3 次式

$$u = p \cdot y + q \cdot y^2 + r \cdot y^3 \quad (14)$$

に従うと考えられる。p, q および r を決定せよ<sup>3)</sup>。

この問題に(13式)を適用したときのソーステキストの例を図 4 に示す。なお、この問題では(14式)に定数項が入っていない (すなわち壁面からの距離が 0 なら速度も 0) ので、24 行目の X 表には(11)および(12式)に示す要素 1 のベクトルは含まれていない。また、27~29 行目までの  $\mathbf{X}^T$  は X 表の転置行列を表している。この例のように、回帰分析で現れる行列演算も EQUATRAN-M の転置行列表記機能を用いて

図4 管内の水の流速の問題のリスト

```

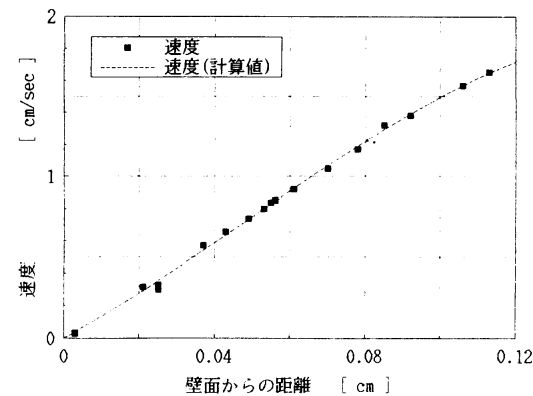
1: /* 管内の水の流速 (内径1インチ) */
2: LOCAL nd=17, np=3
3: VAR y(nd), u(nd) "壁面からの距離 [cm] "
4: ucal(nd) "速度 (計算値) [cm/sec] "
5: p "未知 A°ラメータ [1/sec] "
6: q "未知 A°ラメータ [1/sec2] "
7: r "未知 A°ラメータ [1/sec3] "
8: X(nd,np) "X表 "
9: A(np,np) "A表 "
10: b(np) "正規方程式の右辺 "
11: k(np) "未知 A°ラメータ A°ラメータ "
12:
13:
14: /* 実験データ 出典: 藤田ら訳,
15: "計算機による数値計算法"(日本コンピュータ協会) p.970 */
16: y = ( .003, .021, .025, .025, .037, .043, ..
17: .049, .053, .055, .056, .061, .070, ..
18: .078, .085, .092, .106, .113 )
19: u = ( 0.03, 0.32, 0.30, 0.33, 0.57, 0.66, ..
20: 0.74, 0.80, 0.84, 0.85, 0.92, 1.05, ..
21: 1.17, 1.32, 1.38, 1.57, 1.65 )
22:
23: /* X表の作成 */
24: X(,1) = y ; X(,2) = y^2 ; X(,3) = y^3
25:
26: /* A表の作成 */
27: SUM( X(,1) * X(,1) ) = A(,1)
28: SUM( X(,1) * X(,2) ) = A(,2)
29: SUM( X(,1) * X(,3) ) = A(,3)
30:
31: /* 正規方程式の右辺 */
32: SUM( X(,1) * u ) = b
33:
34: /* 正規方程式 X°X*k = X°u */
35: k(1) = p ; k(2) = q ; k(3) = r
36: SUM( A(,k) ) = b
37:
38: /* 計算値と残差平方和 */
39: ucal = p * y + q * y^2 + r * y^3
40: RSS = SUM( ( u - ucal )^2 )
41:
42: OUTPUT y, p, q, r, u, ucal, RSS
43: OUTPUT1 y, u, ucal

```

図5 管内の水の流速の問題の解

[ 計算結果 ]			
y	1) 0.003	2) 0.021	3) 0.025
	5) 0.037	6) 0.043	7) 0.049
	9) 0.055	10) 0.056	11) 0.061
	13) 0.078	14) 0.085	15) 0.092
	17) 0.113		16) 0.106
p	= 12.733374	: A°ラメータ [1/sec]	
q	= 68.397819	: A°ラメータ [1/sec2]	
r	= -460.902387	: A°ラメータ [1/sec3]	
u	=	: 速度 [cm/sec]	
	1) 0.03	2) 0.32	3) 0.3
	5) 0.57	6) 0.66	7) 0.74
	9) 0.84	10) 0.85	11) 0.92
	13) 1.17	14) 1.32	15) 1.38
	17) 1.65		16) 1.57
ucal	=	: 速度 (計算値) [cm/sec]	
	1) 0.03880326	2) 0.2932959	3) 0.3538814
	5) 0.5414254	6) 0.6373577	7) 0.7339338
	9) 0.8305563	10) 0.846227	11) 0.926628
	13) 1.190613	14) 1.293459	15) 1.39149
	17) 1.647208		16) 1.569313
RSS	= 0.00738528		

図6 管内の水の流速 (内径1インチ)



簡単に表現できる。図4のソーステキストを実行したときの結果を図5に、また壁面からの距離に対する速度のプロットを図6に示す。

<Ethanolの蒸気圧>

表4にEthanolの1 atm以上の蒸気圧データがある。このデータをよく知られている Antoine 式

$$\log p = A - B / (t + C) \tag{15}$$

により近似し、定数 A, B および C を求めよ。ここで、p は蒸気圧 [mmHg], t は温度 [°C] とする。なお、1 atm における沸点は必ず通るようにせよ。

この問題では定数 A, B については線形であるが、C は線形でない。しかも題意により次式

$$\log 760 = A - B / (t_B + C) \tag{16}$$

が成り立っていないなければならない。ここに  $t_B$  は 1 atm における沸点 (=78.4) [°C] である。このような場合、まず A と B を正規方程式を用いて求め、C は蒸気圧データとこの A, B を用いた計算値の対数の残差平方和

$$ss = \sum_{i=1}^n (\log p_i^{\text{exp}} - \log p_i^{\text{cal}})^2 \tag{17}$$

を最小にするように最適化計算によって決めることができる。また、(16)式の条件は関数 g

$$g = \log 760 - \{A - B / (t_B + C)\} \tag{18}$$

とラグランジュの未定定数  $\lambda$  を導入することで解決できる。すなわち関数  $\phi$  を次のように定義し、

$$\phi = ss + \lambda \cdot g \tag{19}$$

これを A および B で微分した式を 0 とおいた

図7 Ethanolの蒸気圧の問題のリスト

```

1: /* Antoine 式によるEthanolの蒸気圧の近似 */
2: LOCAL n=9
3: VAR t(n) "温度 (°C)" [ ° C ] "..."
4: ,p(n) "圧力 (°C)" [ atm ] "..."
5: ,pm(n) "圧力 (°C)" [ mmHg ] "..."
6: ,logP(n) "Antoine式の右辺" [ - ] "..."
7: ,pcal(n) "圧力 (計算値)" [ mmHg ] "..."
8: ,lamb "ラランジエの未定定数" [ - ] "..."
9:
10: /* Ethanolの蒸気圧データ 出典:
11: Perry & Chilton, "Chemical Engineers' Handbook" */
12: t = ( 78.4, 97.5, 126.0, 151.8, 183.0, ..
13: 203.0, 218.0, 230.0, 242.0 )
14: p = ( 1, 2, 5, 10, 20, 30, 40, 50, 60 )
15: pm = p * 760
16:
17: /* 標準沸点を通る条件 */
18: LOG10( pm(1) ) = logP( 1 )
19:
20: /* 計算値 */
21: logP = A - B / ( t + C )
22: pcal = 10^( logP )
23:
24: /* A,B に関する正規方程式 */
25: 2*SUM( LOG10(pm)-logP ) - lamb = 0
26: 2*SUM( (LOG10(pm)-logP)/(t+C) ) + lamb/( t(1)+C ) = 0
27:
28: /* C に関する最適化 */
29: FIND( C # 230 [ 0, 500 ] ) MINIMIZE ss
30: ss = SUM( ( LOG10( pm ) - logP )^2 )
31:
32: OUTPUT A,B,C,pm,pcal,ss
33: OUTPUT1 t,pm,pcal,A,B,C

```

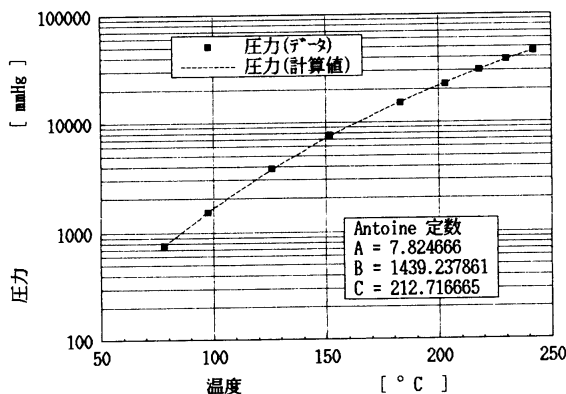
図8 Ethanolの蒸気圧の問題の解

```

[ 計算結果 ]
A = 7.824666
B = 1439.237861
C = 212.716665
pm : 圧力 (°C) [ mmHg ]
1) 760 2) 1520 3) 3800 4) 7600
5) 15200 6) 22800 7) 30400 8) 38000
pcal : 圧力 (計算値) [ mmHg ]
1) 760 2) 1531.813716 3) 3763.356275 4) 7521.773888
5) 15403.691211 6) 23046.327828 7) 30420.789136 8) 37475.113689
9) 45659.906291
ss = 0.0001413097

```

図9 Antoine式によるEthanolの蒸気圧の近似



を A と B について解けばよい。(20)式は(16)式の制限条件を加えているが、(10)式の正規方程式の表現に他ならない。図7に EQUATRAN-M のソーステキストの例を示す。15行目では蒸気圧の単位を [atm] から [mmHg] に変換している。図8に実行結果、図9に温度と蒸気圧のグラフ出力を示す。

## 主成分分析

現象を統計的に要約する場合、回帰分析と共に有効な手法が主成分分析といえる。主成分分析は数多くの変数が互いに複雑に関連し合っていて直感的な理解が困難なとき、固有ベクトルで定まるより少ない軸（これを主成分という）に要約して現象のイメージをつかみやすくする手法である。しかも、後に述べるように、変数間の関係が多くの場合2次元のプロットとして得られるので、変数の分類、グループ分けなどにおける視覚的な判断が容易になるという特徴がある。このような点から化学工業においても研究開発はもちろん、工程の要因解析などにも利用されている<sup>5)</sup>。

主成分分析においては固有値および固有ベクトルを求めることが解析の上での中心課題である。理論的な背景や詳細な検討は成書<sup>6)</sup>にゆずるとして、ここでは方程式解法ソフト EQUATRAN-M を用いた主成分分析の概要を例をあげ紹介する。

### 〈高度化成肥料工場の中間製品〉

ある高度化成肥料工場で中間製品の成分変動を解析するため、1時間ごとにサンプリングをして30時間分の分析値を得た(実測データは省略する)。その中から成分 I, J, K, L および M の5成分を選び、分析値間の相関係数を求めたところ表5のようであった<sup>5)</sup>。この相関係数表をもとに主成分分析を行え。

主成分分析においては、 $p$ 個の変数に関する座標系

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_p) \quad (21)$$

を正規直交行列  $\mathbf{L}$  ( $p \times p$ ) で回転して新たな座標系

$$\mathbf{z} = (z_1, z_2, \dots, z_p) \quad (22)$$

を作る。データ数  $n$  のデータ行列  $\mathbf{X}$  ( $n \times p$ ) の新しい座標系における値  $\mathbf{Z}$  ( $n \times p$ ) は

$$\mathbf{Z} = \mathbf{X} \cdot \mathbf{L} \quad (23)$$

で求められる。ここで、 $\mathbf{L}$  ( $p \times p$ ) は、 $\mathbf{X}$  の相関係数行列を  $\mathbf{R}$  ( $p \times p$ )、 $\mathbf{R}$  の固有行列を  $\mathbf{\Lambda}$  ( $p \times p$ ) とするとき、

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{L} \quad (24)$$

で与えられる固有ベクトルから成る行列である。すなわち(24)式を解いて固有値

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p (\geq 0)$$

と対応する固有ベクトル ( $l_1, l_2, \dots, l_p$ ) を求めると、

$$z_k = l_k \cdot \mathbf{x} = l_{1k} \cdot x_1 + l_{2k} \cdot x_2 + \dots + l_{pk} \cdot x_p \quad (25)$$

となる。この  $z_k$  を第  $k$  主成分と呼ぶ。

ところで、(24)式から求めた固有値については、

表5 高度化成肥料中間製品の成分間の相関係数

	I	J	K	L	M
I	1	0.916	0.982	0.834	-0.924
J	0.916	1	0.826	0.831	-0.827
K	0.982	0.826	1	0.792	-0.920
L	0.834	0.831	0.792	1	-0.853
M	-0.924	-0.827	-0.920	-0.853	1

$$\sum_{k=1}^p \lambda_k = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p = p \quad (26)$$

という関係があり、 $p$  はもとの変数の分散の和に等しいことから、

$$c_k = \lambda_k / p \quad (27)$$

をもとの変数全体に対する  $z_k$  の寄与率という。そこで、 $z_1$  から  $z_m$  までの累積寄与率

$$\sum_{k=1}^m c_k = (\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_m) / p \quad (28)$$

が充分大きいなら、 $z_1$  から  $z_m$  までを分析の対象とすればよいことになる。

先の問題に対する EQUATRAN-M のソーステキストの例を図10に示す。相関係数行列は36~40行目に定義されている。17~22行目は相関係数行列についての固有方程式を表すマクロであり、(24)式に対応する。このマクロは24~33行目のマクロコール文により展開され、5つの固有値とそれぞれの固有値に対する固有ベクトルを解とする方程式となる。なお、19行目は固有ベクトルを1に規格化するための式である。また、21行目は5つの固有値が得られるように初期値と変域を与えた繰り返し計算を指定する RESET 文である。さらに、47行目はもとの各変数と各主成分との相関係数である因子負荷量

$$r(z_k, x_j) = \sqrt{\lambda_k} \cdot l_{jk} \quad (29)$$

を与える。

ところで、EQUATRAN-M は最初からすべての固有値

を同時に求めることはできないので、少しずつ範囲を区切って1つずつ見出す方法をとらざるを得ない。しかし、(26)式を利用して適当な初期値（たとえば5）から出発してどれか1つ固有値を見つけることはできるので、あとはその両側（もしくは固有値の大きいものから小さいものへ、あるいは逆に小さいものから大きいものへ）について探していけばよい。このようにしてすべての固有値の存在範囲を区切った結果が24～33行目のマクロコール文の引数となっている。

図11に計算結果を示す。寄与率  $c$  の値を見ると、大きい方から2番目までの累積寄与率は約95%であり、もとの5つの変数の有する情報の95%を第1、第2主成分で要約できることがわかる。そこで、もともとの変数である成分 I, J, K, L および M の分析値の因子負荷量を、第1主成分  $z_1$  を横軸、第2主成分  $z_2$  を縦軸とする座標にプロットすると図12を得る。この図より、I～L の分析値は互いに近い位置にあり「似たもの同志」であるが、M の分析値はこれらとは全く異なる挙動をしていることが読みとれる。

## 非線形最適化

科学技術計算において最適化計算手法が方程式の求解と同様に重要であることは言うまでもない。化学工業においても、最適設計あるいは費用と利益の関係から最適な操作条件を求める問題等を始めとしてその応用範囲は広い。今回の最初に述べた最小二乗法等も広い意味での最適化であり、回帰式がパラメータに対し非線形であれば何らかの非線形最適化手法を用いて解くことになる。しかしながら、最適化計算のアルゴリズムはかなり面倒であり、自分でプログラムを組むのは大変である。これに対し EQUATRAN-M では、第1回からこれまで説明してきたように必要な連立方程式を書き並べればよく、最適化計算の場合でも、連立方程式と同時に最適化すべき目的関数と、もしあれば等号または不等号制約条件を書くだけで多変数の最適化計算を簡単に行うことができる。

例として本連載第2回<sup>2)</sup>に物質収支計算の例としてあげ

図10 高度化成肥料の中間製品の問題のリスト

```

1: /* 高度化成肥料の中間製品の主成分分析 */
2: GLOBAL n=5
3: VAR A(n,n) "相関係数行列"
4: ,x1(n) "固有値"
5: ,x2(n) "固有値"
6: ,x3(n) "固有値"
7: ,x4(n) "固有値"
8: ,x5(n) "固有値"
9: ,l(n) "固有値"
10: ,c(n) "寄与率"
11: ,R(n,n) "因子負荷量"
12: ,X(n,n) "固有行列"
13: ,z1(n) "第1主成分"
14: ,z2(n) "第2主成分"
15:
16: /* 固有値と固有行列を求める */
17: MACRO Eigen
18: eq : SUM( A * x ) = lambda * x
19: vc : SUM( x^2 ) = 1
20: RESET x(n) BY vc
21: RESET lambda # li [ li, lh ] BY eq(k)
22: END Eigen
23:
24: ev1 : CALL Eigen( A=A,x=x1,lambda=l(1), ..
25: li=4.5, lh=3, lh=5, k=1 )
26: ev2 : CALL Eigen( A=A,x=x2,lambda=l(2), ..
27: li=0.25, lh=0.2, lh=0.4, k=2 )
28: ev3 : CALL Eigen( A=A,x=x3,lambda=l(3), ..
29: li=0.19, lh=0.18, lh=0.2, k=3 )
30: ev4 : CALL Eigen( A=A,x=x4,lambda=l(4), ..
31: li=0.06, lh=0.04, lh=0.1, k=4 )
32: ev5 : CALL Eigen( A=A,x=x5,lambda=l(5), ..
33: li=0.0006, lh=0.0001, lh=0.001, k=5 )
34:
35: /* 成分間の相関係数 */
36: A = ( 1 , 0.916, 0.982, 0.834, -0.924 )..
37: ( 0.916, 1 , 0.826, 0.831, -0.827 )..
38: ( 0.982, 0.826, 1 , 0.792, -0.920 )..
39: ( 0.834, 0.831, 0.792, 1 , -0.853 )..
40: ( -0.924, -0.827, -0.920, -0.853, 1 )
41:
42: /* 寄与率 */
43: p = SUM( l )
44: c = l / p
45:
46: /* 因子負荷量 */
47: R = SQRT( l ) * X
48:
49: X(,1) = x1
50: X(,2) = x2
51: X(,3) = x3
52: X(,4) = x4
53: X(,5) = x5
54:
55: /* 第1,第2主成分 */
56: z1 = R(1, )
57: z2 = R(2, )
58:
59: OUTPUT l,x1,x2,x3,x4,x5,p,c
60: OUTPUT1 z1,z2

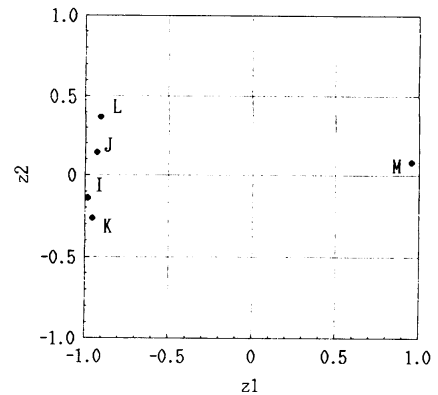
```

た Williams-Otto プロセスの最適設計・操業問題<sup>7),8)</sup>を取りあげ、EQUATRAN-Mによる非線形最適化計算について紹介する。本プロセスのフロー図を図13に示すが、プロセスの概要については第2回で解説してあるのでここでは省略する。(なお、本例題では原典の計算条件を若干変更している。)ただし、第2回では原料 A, B の量 (ストリーム①) が既知とし、製品 P の量 (ストリーム②) を未知としたが、今回は製品量は指定されており、原料については A, B の割合だけが与えられているものとする。また、系内での副生物 E の蓄積を防ぐためストリーム③の E の割合を指

図11 高度化成肥料の中間製品の問題の解

計算結果		固有値			
l	=	1) 4.48525	2) 0.2510909	3) 0.1880726	4) 0.07494822
		5) 0.0006384168			
x1	=	1) -0.4648014	2) -0.4385553	3) -0.4515295	4) -0.4288876
		5) 0.4514482			
x2	=	1) -0.2819673	2) 0.2874583	3) -0.5223522	4) 0.7336735
		5) 0.163504			
x3	=	1) 0.1835515	2) 0.7716881	3) -0.1133834	4) -0.4097005
		5) 0.4360001			
x4	=	1) 0.2399199	2) -0.2466307	3) 0.4386485	4) 0.3315231
		5) 0.7611122			
x5	=	1) -0.7830718	2) 0.2621218	3) 0.5639158	4) -0.004069335
		5) 0.00855329			
p	=	5			
c	=		寄与率		
		1) 0.89705	2) 0.05021817	3) 0.03761453	4) 0.01498964
		5) 0.0001276834			

図12 高度化成肥料の中間製品の因子負荷量プロット



定しており、第2回ではその値を0.3としたが、今回は0.15とした。

最適化のための要因はいろいろと考えられるが、ここでは反応器の操作条件（温度  $t$  [°C]）と容積  $V$  [m<sup>3</sup>] の2変数を独立変数とし、投資利益率  $F$  [%] を最大化するものとする。 $F$  は次式で表される。

$$F = 100 (F_1 - F_2 - F_3 - F_4) / F_5$$

ここで、 $F_1 \sim F_5$  はそれぞれ、製品・原料の売り買いの差、ユーティリティコスト、販売・研究費等の間接費、年間固定費および建設費であり、

$$F_1 = 8400(0.30F_p + 0.0068F_D - 0.02F_A - 0.03F_B - 0.01F_G)$$

$$F_2 = 2.22F_R$$

$$F_3 = (0.124)(8400)(0.30F_p + 0.0068F_D)$$

$$F_4 = 60V\rho$$

$$F_5 = 600V\rho$$

で表されるものとする。ここで、 $F_A$ 、 $F_B$  は原料フィード量（ストリーム④）、 $F_p$  は製品量（ストリーム⑥）、 $F_D$ 、 $F_G$ 、 $F_R$  はそれぞれストリーム④、⑤、③の流量（いずれも [kg/hr]）を表す。また、 $\rho$  [kg/m<sup>3</sup>] は反応物の密度である。

独立変数で与える温度  $t$  [°C] については、

$$50 < t < 105$$

の制限がある。これは、 $t < 50$  では反応が進行せず、 $t > 105$  では物質の分解が起こるためである。

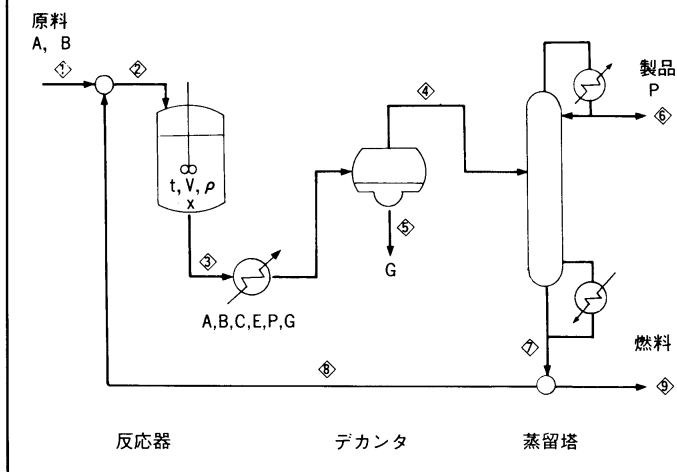
本例題の EQUATRAN-M によるリストを図14に、結果を図15に示す。第2回と同様本例題でも反応速度  $r_1 \sim r_3$ 、分流点での式が非線形となるので、A、B、C、Pの反応器出口組成 ( $x(1)$ ,  $x(2)$ ,  $x(3)$ ,  $x(5)$ ) およびリサイクル比 (ratio) を独立変数とした収束計算を行うものとする (50~54行目の RESET文)。最適化の指定は64行目のように FIND文を用いる。この FIND文では、最適化の独立変数名とその初期値および探索範囲、最小化 (MINIMIZE) または最大化 (MAXIMIZE) の指定を行う (本例題では最大化)。また、もしあれば等号または不等号制約条件を指定することも可能である。

前述のとおり、本例題では方程式として非線形のものはいくつか含まれているので、1回の最適値探索ごとに多重の収束計算を行う必要があり、計算量はかなりのものである。したがって、最適化の独立変数  $t$ 、 $V$  の探索範囲、また  $t$ 、 $V$  の値に対する収束計算の独立変数の初期値を適当に与えないと、①計算時間（反復回数）がかかる、②うまく最適値が求まらない、③計算が収束しない、等の問題が生じる。そこで、あらかじめ  $t$ 、 $V$  をいろいろと変えて目的関数値を計算し、最適値の存在範囲を、

$$90 < t < 105, 0.4 < V < 0.8$$



図13 Williams-Ottoのプロセス



	成分	分子 量
1	A	100
2	B	100
3	C	200
4	E	200
5	P	100
6	G	300

と定めた。この計算は、図14の64行目のかわりに図16のような3行をつけ加えるだけで行える。図16のREPEAT文は、温度tについてthからtlまで1ずつ変化させながら複数ケースの計算を行わせるものであり、次の行のTREND文によりその結果を出力している。図17にはV=0.6のときの出力例を示す。

以上、今回は最適化の例としてプロセスの最適化を取りあげたが、その他の例については文献<sup>9)</sup>を参照されたい。

おわりに

今回は方程式解法ソフト EQUATRAN-M の回帰分析、主成分分析と最適化問題への適用について解説した。特に統計の分野においてはすでに市販のパーソナルコンピュータ用パッケージも数多く出回っており、機能的に優れているものも少なくない。しかし、モデル式の設定や変数の変換などでは意外と不便なことも多いのではなかろうか。EQUATRAN-M では式そのもの、あるいは式の一部を変更すれば容易に対応がとれる。方程式解法ソフトの特長を活用できる分野の1つといえよう。また、複雑な多変数の最適化問題も式の記述だけで簡単に表現できることはすでに述べたとおりである。EQUATRAN-M の求解ルーチンにより、解法に悩まされることがないので労力を大幅に削減できる

はずである。

(くどう みつお・すどう せいいち 三井東圧化学(株))

参考文献

- (1) 大江；実例パソコン実験データの整理，講談社サイエンティフィック，1986，p.20
- (2) 林田，横山；化学工業における数値計算，INFORMATION，1986，9，p.62-69
- (3) 藤田ら訳；計算機による数値計算法，日本コンピュータ協会，1981，p.970
- (4) Perry & Chilton, Chemical Engineers' Handbook, 5 th. ed., McGraw-Hill, 1973, p.3-62
- (5) 安部；化学工業における多変量解析の適用例，化学工学，47巻，第3号，(1983) p.155
- (6) 奥野ら；多変量解析法，日科技連出版社，1971，p.159
- (7) Williams, T.J. and R.E. Otto；A Generalized Chemical Processing Model for the Investigation of Computer Control, AIEE Trans. 79(Communication and Electronics), (1960) p.458
- (8) Adelman, A. and W.F. Stevens；Process Optimization by the "Complex" Method, AICHE J., Vol. 18, No.1, (1972) p.20-24
- (9) 宮原他；「EQUATRAN-M」—技術計算用連立方程式解法言語 (1), (4), (5), (7), ケミカルエンジニアリング，第30巻，第8，11，12号，第31巻第2号，(1985~6)

図14 プロセスの最適化

(EQUATRAN-Mのソーステキスト)

```

1: /* プロセスの最適化(Williams-Ottoの仮想プロセス) */
2: VAR f(9,6) "各ストリーム成分流量 [kg/hr] ..."
3: x(6) "反応器出口組成 [wt-fr] ..."
4: fr(6) "反応生成量 [kg/hr] ..."
5: Mw(6) "分子量 [kg/kmol] ..."
6: r1 " (1)の反応速度 [kg/hr] ..."
7: r2 " (2)の反応速度 [kg/hr] ..."
8: r3 " (3)の反応速度 [kg/hr] ..."
9: ratio "リサイクル比"
10: t "反応温度 [°C] ..."
11: V "反応器容積 [m3] ..."
12: rho=830 "反応液密度 [kg/m3] ..."
13: fsum(9) "トータル流量 [kg/hr] ..."
14: F "目的関数"
15: /* 成分番号 A=1,B=2,C=3,E=4,P=5,G=6 */
16: fsum = SUM(f)
17: Mw = (100,100,200,200,100,300)
18: /* 反応速度定数 */
19: k1 = 5.9755E9 * EXP(-6500/(t+273))
20: k2 = 2.5062E12 * EXP(-8000/(t+273))
21: k3 = 9.6283E15 * EXP(-11000/(t+273))
22: /* 原料及び混合器 */
23: f(1) = (5000,10000,0,0,0,0) * rf
24: f(1) + f(8) = f(2)
25: f(2,4)/fsum(2) = 0.15
26: /* 反応器 */
27: f(2) + fr = f(3)
28: eq1: x = f(3)/fsum(3)
29: fr(1) = -r1
30: fr(2) = -r1-r2
31: fr(3) = (r1-r2)*Mw(3)/Mw(2)-r3
32: fr(4) = r2*Mw(4)/Mw(2)
33: fr(5) = r2*Mw(5)/Mw(2)-r3*Mw(5)/Mw(3)
34: fr(6) = r3*Mw(6)/Mw(3)
35: r1 = k1*x(1)*x(2)*V*rho
36: r2 = k2*x(2)*x(3)*V*rho
37: r3 = k3*x(3)*x(5)*V*rho
38: /* デカンタ */
39: f(3) = f(4) + f(5)
40: f(5,1:5) = 0 : f(4,6) = 0
41: /* 蒸留塔 */
42: f(4) = f(6) + f(7)
43: f(6,1:4,6) = 0
44: f(7,5) = 0.1*f(7,4)
45: eq2: f(6,5) = 2222
46: /* 分流点 */
47: f(7) = f(8) + f(9)
48: f(8)/f(7) = ratio
49:
50: RESET x(1) # 0.166[0.1] BY eq1(1) /* 成分 A */
51: RESET x(2) # 0.363[0.1] BY eq1(2) /* 成分 B */
52: RESET x(3) # 0.019[0.1] BY eq1(3) /* 成分 C */
53: RESET x(5) # 0.091[0.1] BY eq1(5) /* 成分 P */
54: RESET ratio # 0.46 [0.1] BY eq2 /* リサイクル比 */
55:
56: OUTPUT f,fsum,fr,x,ratio
57: OUTPUT k1,k2,k3,r1,r2,r3
58: OUTPUT V,t,rf,F
59:
60: /* 目的関数 (投資利益率 %) */
61: F = (84*f(1,1)-201.96*fsum(9)-336*f(5,6)+1955.52*f(6,5)
62: -2.22*fsum(3) -60*V*rho) / (6*V*rho)
63:
64: FIND (t#96 [90,105], V#0.6 [0.4,0.8]) MAXIMIZE F

```

図16 最適値の存在範囲の探索

(EQUATRAN-Mのソースリスト, 図14の変更分)

```

64: REPEAT t[th,tl] STEP 1
65: TREND F,f(1,1),f(1,2),ratio,rf
66: INPUT V,th,tl

```

図15 プロセスの最適化

(図14のソーステキストによる計算結果)

[ 計算結果 ]		: 各ストリーム成分流量 [kg/hr]			
f	( 1 )	( 2 )	( 3 )	( 4 )	
1)	7581.282422	15162.564844	0	0	
2)	10710.486816	22066.355988	338.142229	5938.021263	
3)	6678.697415	14606.783217	721.700902	12673.588003	
4)	6678.697415	14606.783217	721.700902	12673.588003	
5)	0	0	0	0	
6)	0	0	0	0	
7)	6678.697415	14606.783217	721.700902	12673.588003	
8)	3129.204394	6843.791144	338.142229	5938.021263	
9)	3549.493021	7762.992074	383.558672	6735.566739	
fsum	( 5 )	( 6 )	: トータル流量 [kg/hr]		
1)	0	0	2)	39586.808422	
2)	593.802126	0	3)	39586.808422	
3)	3489.358801	1416.680084	4)	38170.128338	
4)	3489.358801	0	5)	1416.680084	
5)	0	1416.680084	6)	2222.000001	
6)	2222.000001	0	7)	2222.000001	
7)	1267.3588	0	8)	35948.128337	
8)	593.802126	0	9)	16842.961156	
9)	673.558674	0	fr	: 反応生成量 [kg/hr]	
1)	-4031.789401	-7399.57277	1)	383.558672	
2)	-7399.57277	383.558672	2)	6735.566739	
3)	383.558672	6735.566739	3)	0.01823084	
4)	6735.566739	0.01823084	x	: 反応器出口組成 [wt-fr]	
5)	0.1687102	0.36889811	1)	0.3201467	
6)	0.36889811	0.01823084	2)	0.1687102	
7)	0.01823084	0.36889811	3)	0.03578667	
8)	0.03578667	0.01823084	ratio	: リサイクル比 [ - ]	
9)	0.01823084	0.03578667	1)	0.4685351	
1)	0.4685351	156.307913	2)	1208.263883	
2)	156.307913	1418.427459	3)	1418.427459	
3)	1418.427459	4031.789401	4)	4031.789401	
4)	4031.789401	3387.78337	5)	3387.78337	
5)	3387.78337	944.453389	6)	944.453389	
6)	944.453389	0.4992216	7)	0.4992216	
7)	0.4992216	99.298564	8)	99.298564	
8)	99.298564	1.516256	9)	1.516256	
9)	1.516256	215.099964	10)	215.099964	
10)	215.099964				

図17 最適値の存在範囲

(図16のソーステキストによる計算結果)

[ 入力データ ]						
V	= 0.6	: 反応器容積 [ m3 ]				
th	= 100					
tl	= 90					
t	1:F	2:f(1,1)	3:f(1,2)	4:ratio	5:rf	
100.00000	199.3809	7385.888	14771.78	0.4373973	1.477178	
99.00000	204.4256	7379.839	14759.68	0.4424475	1.475968	
98.00000	208.0921	7380.762	14761.52	0.4479019	1.476152	
97.00000	210.2883	7389.158	14778.32	0.4538030	1.477832	
96.00000	210.9072	7405.605	14811.21	0.4601997	1.481121	
95.00000	209.8232	7430.779	14861.56	0.4671484	1.486156	
94.00000	206.8894	7465.466	14930.93	0.4747142	1.493093	
93.00000	201.9320	7510.590	15021.18	0.4829732	1.502118	
92.00000	194.7445	7567.242	15134.48	0.4920145	1.513448	
91.00000	185.0799	7636.718	15273.44	0.5019438	1.527344	
90.00000	172.6398	7720.572	15441.14	0.5128868	1.544114	