

続連載「EQUATRAN-M」技術計算用 方程式解法言語

(IV)

ダイナミックシミュレーションと 制御系の解析

小口 梧郎*
宮原 昱中**

今回は、EQUATRAN-Mの微分方程式解法の機能を利用した反応解析の事例をいくつか紹介した。今回は、同じく常微分方程式の初期値問題の応用であるダイナミックシミュレーションと、これに深く関る制御系の解析をとりあげる。

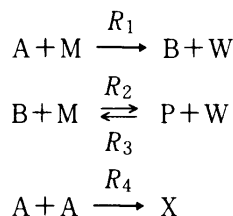
これらの問題では、単に常微分方程式を解くだけでなく、さまざまな動的特性を有するプロセス機器や制御機器をモデル化し、あるいは、人間による不連続な操作をシミュレーションすることも必要になる。また、計算結果の検討にはグラフによる視覚化が不可欠であり、EQUATRAN-Mの新しい機能が大いに有効な分野といえる。

1. セミバッチ反応プロセス (ダイナミックシミュレーション—1)

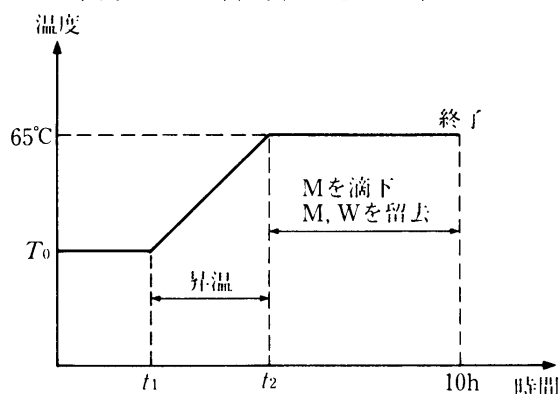
最初に、ダイナミックシミュレーションの例として、セミバッチ反応プロセスのシミュレーションをとりあげる。これは本誌に、大型計算機用のダイナミックシミュレーションプログラム DPS-V2の例題として紹介されたものである¹⁾。

〈例題IV.1: セミバッチ反応プロセス〉

原料AとメタノールMとから次の反応によって、中間体B、製品P、水Wおよび副生成物Xを生成するセミバッチ型の反応器がある。



反応器にAとMとを仕込んでおき、図に示すような温度パターンで運転する。昇温が完了してから運転終了までの間は、Mを一定量 F_M で滴下するとともに、同量のMとこれに平衡なWを留去するものとする。



反応速度 R_k ($k=1, 2, 3, 4$) は次の形の速度式によるものとする⁵⁾。

$$R_k = A_k e^{-\frac{E_k}{RT}} \prod_{j \in J_k} X_j \quad (IV-1)$$

R はガス定数 ($=1.987 \text{kcal/kgmolK}$) であり、係数 A_k , E_k は表IV-1に示されている。 T は絶対温度 [K] である。また Π の項は、反応側成分についての濃度 X [kgmol/m^3] の積を表す。

* Goro Oguchi 三井東圧化学(株)システム部 主席部員
** Koreatsu Miyahara 三井東圧化学(株)システム部 部長

さらに、留出状態においては、メタノール水2成分系のK-値は0.42で一定とする。

反応器の容積 $V=1.1953\text{m}^3$ 、仕込み量はA, Mそれぞれ1, 25kgmol, 初期温度 $T_0=30^\circ\text{C}$, 昇温開始時間 $t_1=2\text{h}$, 昇温終了時間 $t_2=4\text{h}$, 滴下量 $F_M=4.164\text{kgmol/h}$ の場合 (文献(1)のケース1) のシミュレーションを行え。

表IV-1 反応速度式(IV-1)の係数

反応	A [m ³ /kgmol h]	E [kcal/kgmol]
R ₁	1.0812×10^5	8.836×10^3
R ₂	3.6354×10^{12}	2.056×10^4
R ₃	1.2576×10^8	1.251×10^4
R ₄	8.1780×10^{11}	1.665×10^4

解) 反応器内の各成分のホールドアップをZ [kgmol], 滴下・留出による増減量をF [kgmol/h], 反応による単位容積当りの生成・消滅量をD [kgmol/m³h] とし, 各成分を添字i (1:A, 2:M, 3:B, 4:W, 5:P, 6:X) で表せば, 次の物質収支式が得られる。

$$\frac{dZ_i}{dt} = F_i + VD_i \quad (i=1, 2 \dots 6) \quad (\text{IV-2})$$

Dは各反応の反応速度 R_k ($k=1, 2, 3, 4$) を用いて

$$\left. \begin{aligned} D_1 &= -R_1 - 2R_4 \\ D_2 &= -R_1 - R_2 + R_3 \\ D_3 &= R_1 - R_2 + R_3 \\ D_4 &= R_1 + R_2 - R_3 \\ D_5 &= R_2 - R_3 \\ D_6 &= R_4 \end{aligned} \right\} (\text{IV-3})$$

となる

この問題は, 基本的には(IV-2)式の常微分方程式を, 仕込み量を初期条件として解けばよいのであるが, その際, 反応器温度Tが図のパターンで変化すること, および滴下・留去量Fの値が昇温終了時点で不連続的に変化することを組み入れる必要がある。

これを解くためのリストを表IV-2に示す。23~29行目に(IV-2), (IV-3)式が記述されている。30~34行目が反応速度式である。図で与えられている温度のパターンは, 時間と温度との関係を数表として定義しておけば簡単に実現できる。17~20行目がこのための数表Tpaternの定義であ

表IV-2 例題IV.1のリスト

```

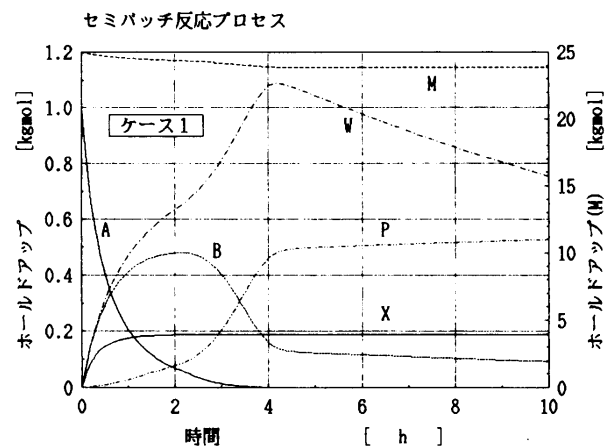
1: /* セミバッチ反応プロセス */
2: /* 澤野,北村「DPS-V2プログラムの解説と事例(その1)」
3:   ナショナルインジニヤリク 2月号(1987) */
4:
5: /* 成分番号 1:A, 2:M, 3:B, 4:W, 5:P, 6:X */
6:
7: VAR Z(6)      "反応器ホールドアップ [kgmol]" ...
8: X(6)         "反応器成分濃度 [kgmol/m3]" ...
9: D(6)         "反応・生成量 [kgmol/m3-h]" ...
10: F(6)        "滴下・留去量 [kgmol/h]" ...
11: TR          "反応器内温度 [°C]" ...
12: V=1.1953    "反応器容積 [m3]" ...
13: t           "時間 [h]" ...
14: FM=4.164    "メタノール滴下流量 [kgmol/h]" ...
15: KVI=0.42    "水(W)のK-値 [-]" ...
16:
17: /* 温度パターン */
18: TABLE Tt = Tpatern(tt)
19: VAR tt(4)=(0, 2, 4, 10), ...
20: Tt(4)=(30, 30, 65, 65)
21:
22: /* 反応器 */
23: Z' = F + V*D
24: D(1) = - R1 - 2*R4
25: D(2) = - R1 - R2 + R3
26: D(3) = R1 - R2 + R3
27: D(4) = R1 + R2 - R3
28: D(5) = R2 - R3
29: D(6) = R4
30: R1 = 1.0812e5 *EXP(-8.836e3/RT)*X(1)*X(2)
31: R2 = 3.6354e12*EXP(-2.056e4/RT)*X(2)*X(3)
32: R3 = 1.2576e8 *EXP(-1.251e4/RT)*X(4)*X(5)
33: R4 = 8.1780e11*EXP(-1.665e4/RT)*X(1)^2
34: RT = 1.987*(TR+273.15)
35: TR = Tpatern(t)
36:
37: X = Z/V
38: Z # (1, 25, 0, 0, 0, 0) /* 仕込み量 */
39:
40: /* 滴下・留去量 */
41: F(1:3,5,6) = 0
42: F(4) = 0
43: F(4) = -Yi/(1-Yi)*FM WHEN t>=4
44: Xi = X(4)/(X(2)+X(4))
45: Yi = KVI*Xi
46: INTEGRAL t[0,10] STEP 0.02
47: OUTPUT1 t,Z(1),Z(2),Z(3),Z(4),Z(5),Z(6) STEP 0.1

```

り, この数表を35行目で時間tを引数として参照している。

滴下・留去量の変化は, 39~44行目で記述されている。この問題では, メタノールの滴下量と留去量は同量とされているので, 実際に変化するのには水の量F(4)だけである。昇温終了時の変化は41~42行目の条件付きの式によって表現することができる。

計算結果のうち各成分のホールドアップの変化の様子をグラフにしたのが図IV-1である。当然であるが, DPS-V2の計算結果と一致している。



図IV-1 例題IV.1の計算結果

なお、EQUATRAN-Mのグラフでは、同時に5つまで線を描くことができるが、重ね書きの機能を利用すると、この図のように6つ以上の変数の変化を1つのグラフ上に描くことができる。

2. オンオフサーボ系の位相面軌跡 (ヒステリシスを含む系)

制御系の中には一般の方程式では表現しにくい特性を持つ要素が含まれることがある。ヒステリシスを持つ要素はその代表的なものである。

〈例題IV.2：オンオフサーボ系の位相面軌跡²⁾〉

操作量 f が偏差 e の関数として、図に示すようなヒステリシスを持った3位置動作をするオンオフサーボ系がある。系の出力を x 、目標値を r とすると、系の運動方程式は

$$T \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{dx}{dt} = f \quad (IV-4)$$

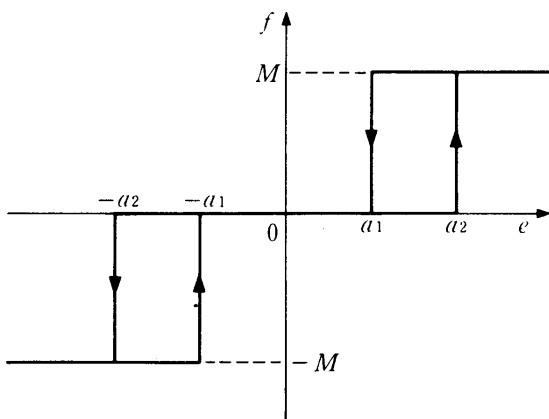
$$e = r - x \quad (IV-5)$$

で表されるものとする。 T は時定数である。目標値 r が次のようなランプ状の変化

$$r = k_1 t \quad (IV-6)$$

をするときのサーボ系の動きを調べ、偏差 e と $v (= de/dt)$ の位相面軌跡を描け。

なお、 $T=1$ 、 $a_1=0.05$ 、 $a_2=0.2$ 、 $M=1$ 、 $k_1=-0.2$ とする。



解) 図のようなヒステリシスを含む関係は、一般の方程式や数表あるいは条件付きの式などで表現することはできない。それはある時点における関数値 f が、その時の e や f の値だけではなく、 f の過去の値に依存しているためである。

表IV-3 例題IV.2のリスト

```

1: /* オンオフサーボ系の位相面軌跡 */
2:
3: T*x'' + x' = f
4: e = r-x
5:
6: f = prev(f,0) ..
7:   = M WHEN e>a2 ..
8:   = 0 WHEN e<a1 & e>-a1 ..
9:   = -M WHEN e<-a2
10:
11: r = -0.2*t
12: v = -0.2-x'
13:
14: T = 1
15: M = 1; a1 = 0.05; a2 = 0.2
16: k1 = -0.2
17:
18: INTEGRAL t[0,10] STEP 0.02 BY EUL
19: OUTPUT1 t,e,v STEP 0.02

```

このような関係を表すために、EQUATRAN-Mでは特殊な組込み関数を用意している。関数

prev (v , v_0)

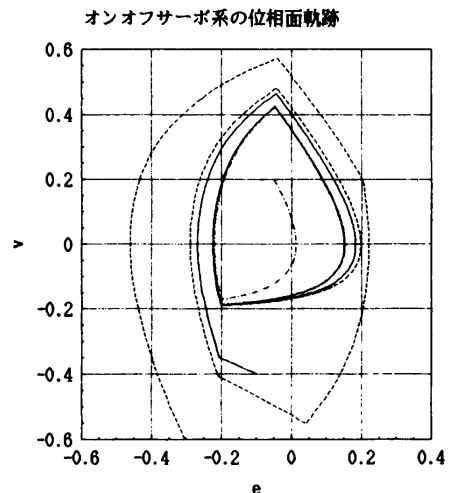
は変数 v の前回値すなわち数値積分計算での1きざみ前の v の値を返す。 v_0 は最初のきざみ点で関数値に与える値である。この関数を用いると、図の右側の部分のヒステリシスは、

$$\begin{aligned}
 f &= \text{prev}(f, 0) .. \\
 &= M \text{ WHEN } e > a_2 .. \\
 &= 0 \text{ WHEN } e < a_1
 \end{aligned}$$

のように書くことができる。すなわち、 e が a_1 と a_2 の間であれば f は前の値のままであり、 e が a_2 を超えると f は M に、 a_1 より小さくなると 0 になる。

問題のためのリストを表IV-3に示すが、 f を表す条件付きの式は、図の左側のヒステリシスの部分も合わせて結局、6~9行目のように書くことができる。

計算結果は偏差 e を横軸に、その微分 v を縦軸に選んでグラフにすることによって、図IV-2のように位相面上の軌跡として表現することができる。



図IV-2 例題IV.2の計算結果

る。図には x および x' の初期値を 3 通り変えたときの結果が重ね書きによって描かれているが、これから安定なリミットサイクルの存在が読み取れる。

EQUATRAN-Mには、この例で使用した prev (PREV も同じ) の他にもダイナミックな組込み関数と呼ばれる特殊な関数がある。後出のむだ時間関数 DELAY, 数値微分値を与える DERIV, 乱数を発生する RANDU, GAUSS などである。

3. 比例制御器の設計 (ボード線図)

自動制御系の周波数応答を図式表示する方法として、ボード線図 (Bode 線図) は最も広く使われている。EQUATRAN-M の対数グラフを用いてボード線図を描いてみる。

<例題 IV.3: 比例制御器の設計³⁾>

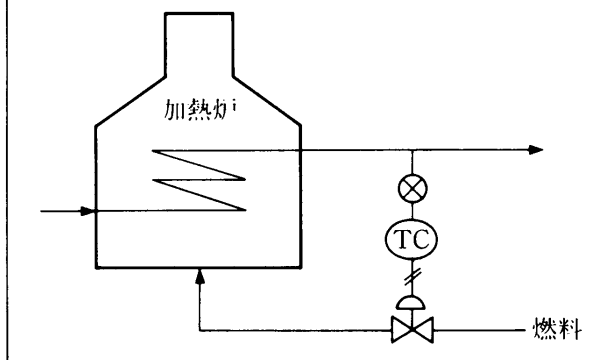
図に示す加熱炉において、温度制御器の出力 (燃料バルブの開度指示) 変化による、出口温度の応答を調べたところ、次の伝達関数で表せることが判った。

$$G(s) = \frac{Ke^{-Ls}}{(1+T_1s)(1+T_2s)} \quad (IV-7)$$

$$K=2.11, \quad L=1.06$$

$$T_1=6.9\text{min} \quad T_2=1.03\text{min}$$

比例制御器を設けたときのゲイン余有が 6 db になるように制御器のゲイン K_c を決定し、この系のボード線図を描け。



解) ボード線図は系の出、入力信号の振幅比 (ゲイン) をデシベルで表したものを g , および位相ずれ φ を、対数座標でとった角周波数 ω に対して一組の線図として表したものである。

この例題の制御系について、一巡伝達関数 $K_c \cdot G(s)$ のゲイン g [db] は

表 IV-4 例題 IV.3 のリスト

```

1: /* 比例制御器の設計 (ボード線図) */
2:
3: /* (1) 制御器のゲインの計算 */
4:
5: VAR Kc      "制御器のゲイン" [-] "...
6:      wm      "位相交点の周波数 [rad/min]" "...
7:      gu = 6   "ゲイン余裕" [db]"
8:
9:      su = -20*LOG10(Kc*K/SQRT(1+(T1*wm)^2)) ..
10:          /SQRT(1+(T2*wm)^2))
11:      -180/_rad = -ATAN(T1*wm) -ATAN(T2*wm) -L*wm
12:
13: /* (2) ボード線図を描く */
14:
15: VAR w      "角周波数" [rad/min]"...
16:      g      "ゲイン" [db]"...
17:      p      "位相ずれ" [度]"
18:
19:      g = 20*LOG10(Kc*K/SQRT(1+(T1*w)^2)) ..
20:          /SQRT(1+(T2*w)^2))
21:      p/_rad = - ATAN(T1*w) - ATAN(T2*w) - L*w
22:
23:      K = 2.11; T1 = 6.9; T2 = 1.03; L = 1.06
24:
25: REPEAT w[0.1,10] STEP 0.05
26: OUTPUT1 Kc,w,g,p STEP 0.05

```

$$g(\omega) = 20 \log_{10} |K_c \cdot G(j\omega)|$$

$$= 20 \log_{10} \frac{K_c \cdot K}{\sqrt{1+T_1^2 \omega^2} \cdot \sqrt{1+T_2^2 \omega^2}} \quad (IV-8)$$

で、また位相ずれ φ [ラジアン] は

$$\varphi(\omega) = \angle [K_c \cdot G(j\omega)]$$

$$= -\tan^{-1} \omega T_1 - \tan^{-1} \omega T_2 - L\omega \quad (IV-9)$$

で表される。

ゲイン余有は、位相交点 (位相ずれが -180° の点) におけるゲインの逆数 (のデシベル表示) で定義される。一般のプロセス制御系では、ゲイン余有は 3 ~ 9 db がよいとされている。

この問題で制御器のゲイン K_c は、まず (IV-9) 式から位相交点の周波数を求め、この周波数における (IV-8) 式のゲインが -6db になるように決めればよい。表 IV-4 がリストであるが、前半の 11 行目までに K_c を決める方程式が書かれており、この K_c は後半でボード線図を描くため

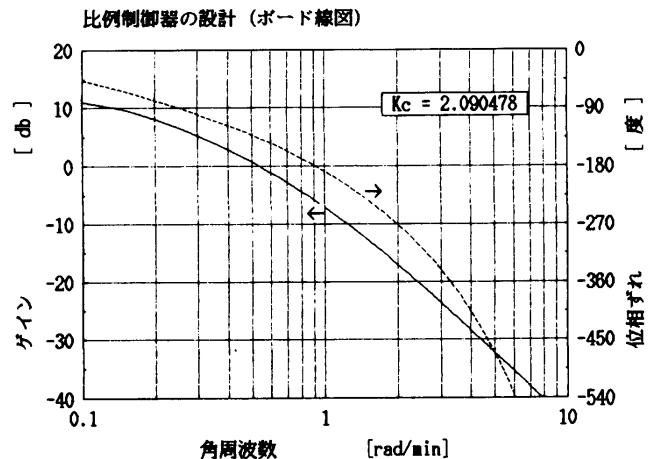


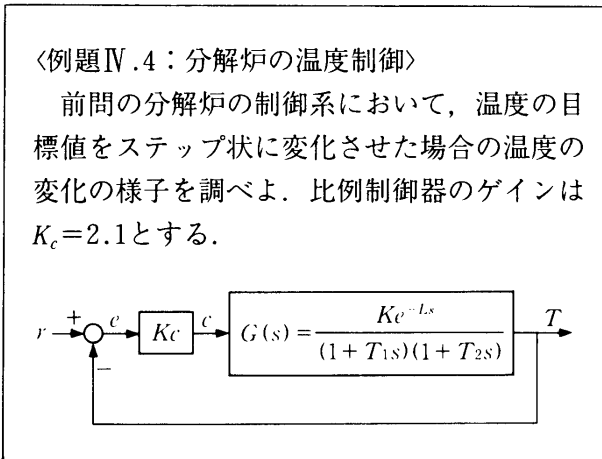
図 IV-3 例題 IV.3 の計算結果

のケーススタディ (REPEAT文による反復計算) に利用されている。11行目と21行目の _rad は度とラジアンとの換算係数を与える組込み定数である。

計算結果を横軸に角周波数 ω の対数目盛を指定してグラフ化すると、図IV-3のボード線図が得られる。図からゲイン余裕が6 dbあることが確認できる。

4. 分解炉の温度制御 (伝達関数)

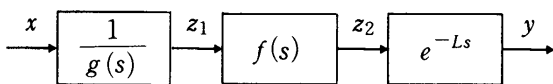
化学プロセスの動的な検討をする場合は、対象に非線形な要素が多いので、どうしても実時間領域でのシミュレーションが必要になる。しかしその場合でも、一部分の特性が伝達関数の形で与えられることは多い。EQUATRAN-Mでは一般の伝達関数も簡単に常微分方程式に変換して扱うことができる。



解) x を入力, y を出力とする一般的な伝達関数

$$G(s) = \frac{f(s)e^{-Ls}}{g(s)} \quad (IV-10)$$

を考える。 $f(s)$, $g(s)$ は s の多項式であり、 f の次数は g の次数より高くないものとする。中間変数 z_1 , と z_2 を導入すると $G(s)$ は次図のように分解することができる。



すなわち、各変数のラプラス変換を $\hat{\cdot}$ で表わせば、

$$g(s)\hat{z}_1 = \hat{x} \quad (IV-11)$$

$$f(s)\hat{z}_1 = \hat{z}_2 \quad (IV-12)$$

$$e^{-Ls}\hat{z}_2 = \hat{y} \quad (IV-13)$$

と書くことができる。 g , f は s の多項式であるから、(IV-11), (IV-12) 式はラプラス逆変換の公

表IV-5 例題IV.4のリスト

```

1: /* 分解炉の温度制御 */
2:
3: VAR Kc = 2.1 "制御器のゲイン"
4: K = 2.11 "分解炉のゲイン"
5: T1 = 6.9 "分解炉の時定数 1"
6: T2 = 1.03 "分解炉の時定数 2"
7: L = 1.06 "分解炉のむだ時間"
8: T "温度の変化量"
9: c "制御器の出力"
10: r "設定値"
11: t "時間"
12:
13: T1*T2*z'' + (T1+T2)*z' + z = c
14: T = DELAY(K*z, 0, L, 10)
15: c = Kc*(r - T)
16: r = STEP(t>1)
17:
18: INTEGRAL t[0.30] STEP 0.1
19: OUTPUT1 t,r,c,T STEP 0.1

```

式

$$s^n \hat{z} \longrightarrow \frac{d^n z}{dt^n} \quad (IV-14)$$

によってそのまま (高階の) 常微分方程式に書き直すことができる。この例では、

$$g(s) = (1 + T_1s)(1 + T_2s) = T_1T_2s^2 + (T_1 + T_2)s + 1$$

であるから、

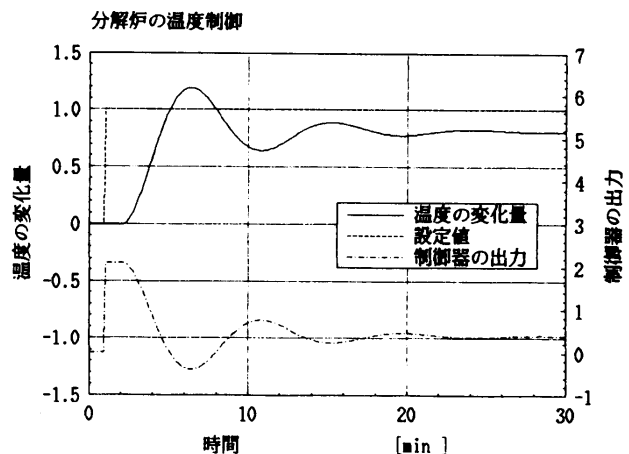
$$T_1T_2 \frac{d^2z}{dt^2} + (T_1 + T_2) \frac{dz}{dt} + z = c \quad (IV-15)$$

となる。 f は定数なので、中間変数は1つでよい。(IV-13) 式のむだ時間に対しては組込み関数が用意されている。

表IV-5がこの問題のためのリストである。13行目に (IV-15) 式がそのまま書かれている。14行目は (IV-13) に相当し、ここで使われている

$$\text{DELAY}(K*z, 0, L, 10)$$

はむだ時間を表わす組込み関数である。この関数値は、最初の引数 (この場合 $K*z$) を3番目の引数 (同じく L) だけ遅らせた値となる。2番目の引数 (同じく 0) は積分計算の最初の L 時間の間に関数値として与えられる値である。また最後



図IV-4 例題IV.4の計算結果

の引数には、むだ時間Lの間の変数値を記憶しておくための記憶域の大きさを与える。

計算結果を図IV-4にグラフで示した。制御器に積分動作が含まれていないので、温度の設定値と測定値との間にオフセットを生じている。

5. カセイソーダの濃縮 (ダイナミックシミュレーション-2)

プロセスのダイナミックシミュレーションには、PIコントローラやPIDコントローラを欠かすことはできない。これらの要素はそのモデルをマクロとして作っておくと、いつでも取り出して使えるので便利である。表IV-6にマクロの例を示す。リストの2つ目のマクロのPIDコントローラは、偏差の微分項の計算に変数の微分値を返す組込み関数DERIVを使用している(21行目)。この関数は最初の引数に与えられた変数の微分値を数値微分によって計算する。2番目の引数は、積分計算の初回に用いられる関数値を与える。

一方、3つ目のマクロ(24~30行目)もやはりPIDコントローラであるが、これは偏差の微分を擬似微分から求めている。すなわち、微分項の伝達関数 T_{DS} を

$$\frac{T_{DS}}{1 + \alpha T_{DS}} \quad (\alpha \ll 1)$$

によって近似的に表現する(表の例では $\alpha = 0.125$)。こうすれば、前項で説明した方法によって、微分項も常微分方程式によって表現することができる(28行目)。実際の制御器でも多くこの方法によって微分が行われている。

表IV-6 PIDコントローラのマクロ

```

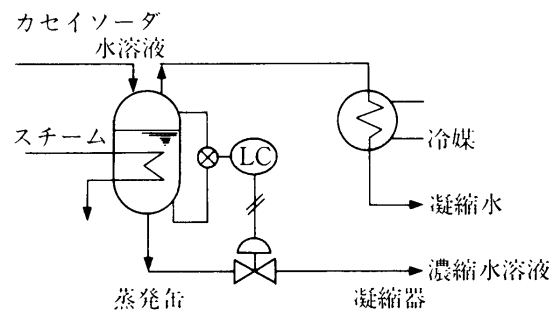
1: /* P I Dコントローラのマクロ */
2: /* パラメータ */
3:     X = 制御変数
4:     XSET = 設定値
5:     Y = 操作変数
6:     KP = ゲイン
7:     TR = 積分時間
8:     TD = 微分時間 */
9:
10: /* P I Dコントローラ */
11: MACRO PIC
12:     e = XSET - X
13:     zr' = e
14:     Y = KP*( e + zr/TR )
15: END PIC
16:
17: /* P I Dコントローラ (1) */
18: MACRO PIDC1
19:     e = XSET - X
20:     zr' = e
21:     Y = KP*( e + zr/TR + TD*DERIV( e, 0 ) )
22: END PIDC1
23:
24: /* P I Dコントローラ (2) */
25: MACRO PIDC2
26:     e = XSET - X
27:     zr' = e
28:     0.125*TD*zd' + zd = e
29:     Y = KP*( e + zr/TR + TD*zd' )
30: END PIDC2

```

ところで、プロセスの起動や停止を行う場合には、コントローラの出力を手動で設定したり、あるいは手動から自動へ切り換える操作が行われる。EQUATRAN-Mのもつ積分中断機能を使うと、このような人間の操作が含まれるシミュレーションを対話的に行うことができる。

〈例題IV.5:カセイソーダの濃縮〉

図はカセイソーダの水溶液を連続的に濃縮するプロセスである。蒸発缶に供給された水溶液はスチームで加熱され、水の一部を蒸発して濃縮されたのち缶底から液面制御弁によって抜き出される。一方蒸発した水蒸気は凝縮器で冷されて凝縮水となり排出される。



蒸発缶が空の状態から水溶液を定量供給し始め、プロセスが定常になるまでの起動の過程をシミュレーションせよ。スチームによる加熱は液面が一定値(=1m)に達した時点から始め、また、液面制御(PIコントローラ)は液面が設定値(=1.5m)に達するまでは手動で閉とし、その後一たん手動で60%開にした状態で自動に切換えるものとする。

なお、蒸発缶の温度 T_s [°C]は、凝縮器における水蒸気の凝縮温度 T_w [°C]よりも、カセイソーダによる沸点上昇分だけ高くなるが、そのデータは表IV-7に与えられている。また、そのほかの計算条件は表IV-8を用いよ。

解) 蒸発缶の状態は、缶の物質収支と熱収支とから決まる。まず缶内の液のホールドアップを z_i (添字 i は1が水、2がカセイソーダを表わす)とすれば、次の物質収支式が得られる。

$$\frac{dz_i}{dt} = x_{fi}F - x_{vi}V - x_iB \quad (\text{IV-16})$$

ここで、 F 、 V 、 B はそれぞれフィード量、蒸発

表IV-7 カセイソーダによる沸点上昇⁴⁾

濃度 wt %	0	20	30	40	50	60
溶液温度℃						
50	0	5.5	12.6	23.5	37.0	53.6
100	0	6.0	13.8	25.7	40.7	58.8
150	0	6.5	15.2	28.0	45.0	65.0

表IV-8 例題IV.5の計算条件

項目	条件
フィード量(F)	10000 kg/h
フィードのカセイソーダ濃度(x _{f2})	10 wt %
フィード温度(T _f)	90℃
伝熱面積(加熱, 冷却)	75 m ²
総括伝熱係数(κ)	2000 kcal/m ² ·h·℃
スチーム温度(T _{stm})	110℃
冷媒温度(T _c)	80℃
液面高さ(L)	L=0.0008z ₁ [m] (z ₁ は水のホールドアップ)
抜き出し量(B)	B=12000c _v [kg/h] (c _v は液面制御弁の開度)
蒸気のエンタルピ(h _v)	h _v =c ₁ +c ₂ T+c ₃ T ² [kcal/kg]
水のエンタルピ(h _w)	h _w =c ₄ T [kcal/kg]
溶液のエンタルピ(h _l)	h _l =(c ₄ -c ₅ x)T [kcal/kg] (ただし c ₁ =579.1 c ₂ =0.45458 c ₃ =3.706×10 ⁻⁴ c ₄ =1.0 c ₅ =0.47 Tは温度[℃] x ₂ は濃度[-])
液面コントローラーのゲイン(k _p)	-2.0 m ⁻¹
κ 積分時間(T _R)	0.2h

量 (=凝縮量), 抜き出し量 (いずれも [kg/h]) であり, x_f, x_v, x はそれぞれフィード, 蒸気, 缶内液の重量ベースの組成を表わす。

一方缶内の熱のホールドアップを H [kcal] とすれば, 熱収支から,

$$\frac{dH}{dt} = h_f F - h_v V - h_l B + Q_h \quad (IV-17)$$

が得られる。h_f, h_v, h_l はそれぞれフィード, 蒸気および缶内液のエンタルピ [kcal/kg] であり, Q_h は加熱量 [kcal/h] である。h_l と h_v は缶の温度 T_s [℃] の関数であるから, T_s は H と全ホールドアップ量 Z [kg] との関係

$$H = h_l Z \quad (IV-18)$$

から決まることになる。

凝縮器での水蒸気の凝縮温度 T_w [℃] と缶の温度との間には次の関係がある。

$$T_s = T_w + BPU(T_s, x_2) \quad (IV-19)$$

BPU は表IV-7 で与えられる沸点上昇である。さ

らに凝縮器での熱収支から次式が得られる。

$$V(h_v - h_w) = Q_c \quad (IV-20)$$

Q_c は冷却量 [kcal/h], h_w は凝縮水のエンタルピ [kcal/kg] である。

以上の準備をして表IV-9 のリストを見てみよう。28~34行目で定義されている数表BPUは(IV-19)式のBPUそのものである。蒸発缶と凝縮器のための方程式が47~61行目に書かれている。(IV-16)~(IV-20)式との対応は容易に見て取れよう。55行目と58行目は, 蒸発缶と凝縮器における伝熱の式である。組込み関数MAXを使って, 温度が逆転したときの伝熱量が0になるようにし

表IV-9 例題IV.5のリスト

```

1: /* カセイソーダの濃縮 */
2:
3: LOCAL H2O=1, NaOH=2 /* 成分番号 */
4:
5: VAR B          "抜き出し量" [kg/h]
6:   cv          "バルブ開度" [-]
7:   F = 10000   "フィード量" [kg/h]
8:   H          "熱のホールドアップ" [kcal]
9:   L          "液面高さ" [m]
10:  Ltrig       "中断液面" [m]
11:  Qc         "冷却量" [kcal/h]
12:  Qh         "加熱量" [kcal/h]
13:  t          "時間" [h]
14:  Tc = 80    "凝縮器冷媒温度" [℃]
15:  Tf = 90    "フィード温度" [℃]
16:  Ts         "蒸発缶温度" [℃]
17:  Tstm       "スチーム温度" [℃]
18:  Tw         "凝縮水温度" [℃]
19:  UA = 2000*75 "伝熱係数×伝面" [kcal/h℃]
20:  v          "蒸発量" [kg/h]
21:  x(2)       "蒸組成" [kg/kg]
22:  xf(2)=(0.9,0.1) "フィード組成" [kg/kg]
23:  Z          "全ホールドアップ" [kg]
24:  z(2)       "ホールドアップ" [kg]
25: /* エンタルピ近似式係数 */
26: VAR c1=579.1, c2=0.45458, c3=3.7064e-4, ...
27:   c4=1.0, c5=0.47
28: /* 沸点上昇 */
29: TABLE bt = BPU(tt, xt)
30: VAR xt(6) = (0, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6)
31: VAR tt(3) = (50, 100, 150)
32: VAR bt(3,6) = (0, 5.5, 12.6, 23.5, 37.0, 53.6) ..
33:   (0, 6.0, 13.8, 25.7, 40.7, 58.8) ..
34:   (0, 6.5, 15.2, 28.0, 45.0, 65.0)
35:
36: /* P Iコントローラ (手動操作付き) */
37: MACRO PICMAN
38:   e = XSET - X
39:   Ie' = e
40:   = 0 WHEN MAN
41:   Y = KP*(e + Ie/TR) ..
42:   = YO WHEN MAN
43:   Ie # YB+TR/(KP)
44: END PICMAN
45:
46: /* 蒸発缶 */
47: z' = xf*F - (1,0)*v - x*B
48: Z = SUM(z)
49: x = z/Z
50: H' = hf*F - hv*v - hl*B + Qh
51: hf = (c4-c5*xf(NaOH))*Tf
52: hv = c1+c2*Ts+c3*Ts^2
53: hl = (c4-c5*x(NaOH))*Ts
54: H = Hl*Z
55: Qh = MAX(Tstm-Ts, 0)*UA
56:
57: /* 凝縮器 */
58: Qc = MAX(Tw-Tc, 0)*UA
59: Ts = Tw + BPU(Ts, x(NaOH))
60: v*(hv-hw) = Qc
61: hw = c4*Tc
62:
63: /* 液面制御 */
64: LC:CALL PICMAN(X=L,XSET=1.5,Y=cv,YO=0,YB=0.6,...
65:   KP=-2.0, TR=0.2)
66: L = 0.0008*z(H2O)
67: B = 12000*cv
68: /* 初期状態 */
69: z # (90,10)
70: H # (c4-c5*0.1)*60*100
71: INTEGRAL t[0,1.0] STEP 0.002 BREAK (Lcond)
72: Lcond = L>Ltrig
73: INPUT Tstm, LC.MAN, Ltrig
74: TREND L,B,Ts,x(2) STEP 0.02
75: OUTPUT t,L,B,V,Ts,x(2),Tw STEP 0.004

```

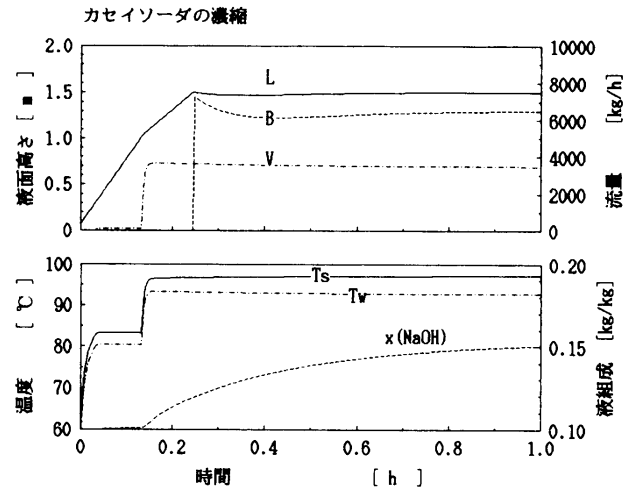
ている。

36~44行目で定義されているPIコントローラのためのマクロは、前述(表IV-6)のものと異なり、手動操作が行われる場合も考慮している。すなわち、40, 42行目に使われている変数MANは手動/自動の切替スイッチであり、この論理値を真(1)とするとコントローラの出力Yは手動設定値Y0となる。さらにMANを偽(0)に切替えると、切替時の出力をYBに初期設定したのちPI制御が実行される。64行目のCALL文でこのマクロを液面コントローラとして呼び出しているが、パラメータとしてY0=0, YB=0.6を与えることによって題意に沿った制御が行われることが理解されよう。

ところで、このシミュレーションでは、起動後液面が1 mに達したところでスチームの加熱を始め(スチーム温度Tstmを0から110℃にする)、さらに液面が1.5 mに達したときにコントローラを自動に切替える(上述のスイッチMANを1から0にする)ことが必要である。これらの操作は積分の中断機能を用いると簡単に実現できる。71行目のINTEGRAL文で、BREAK(Lcond)とあるのがそのための指定で、変数Lcondの論理値が真になると(すなわち、次行によってL>Ltrigになると)積分計算が一たん中断されて、INPUT文で指定した入力変数が再入力できる状態になる。Ltrigに次に操作が必要になる液面高さを入力しておき、中断したときにTstmあるいはLC。

表IV-10 積分中断時の入力の様子

t	1:L	2:B	3:Ts	4:x(2)
0	0.07200000	0	80.00000	0.10000000
0.02000000	0.2180000	0	80.00000	0.10000000
0.04000000	0.3595142	0	83.31689	0.1001216
0.06000000	0.5016493	0	83.35250	0.1004215
0.08000000	0.6437855	0	83.35759	0.1005916
0.10000000	0.7858815	0	83.36077	0.1007001
0.12000000	0.9279976	0	83.36298	0.1007754
t = 0.132	で Lcond により中断しました			
[入力データ]				
Tstm	= 110	スチーム温度	[°C]	
LC:MAN	= 1.5	中断液面	[m]	
Ltrig	= 1.5	中断液面	[m]	
0.1400000	1.057835	0	94.24708	0.1018818
0.1600000	1.145125	0	96.52580	0.1061567
0.1800000	1.230482	0	96.61756	0.1099488
0.2000000	1.315996	0	96.66644	0.1132079
0.2200000	1.401734	0	96.70819	0.1160346
0.2400000	1.487650	0	96.74470	0.1185080
t = 0.244	で Lcond により中断しました			
[入力データ]				
LC:MAN	= 0	中断液面	[m]	
Ltrig	= 2	中断液面	[m]	
0.2600000	1.492075	7028.753	96.77756	0.1267343
0.2800000	1.482501	6747.089	96.80851	0.1228306
0.3000000	1.475823	6536.147	96.83760	0.1248008
0.3200000	1.472017	6381.717	96.86487	0.1268482
0.3400000	1.470347	6272.109	96.89040	0.1283774



図IV-5 例題IV.5の計算結果

MAN(MANはマクロ内の変数なので、CALL文のラベルLCを加えて表わす)の値とLtrigとを入力し直してやればよいわけである。73行目がそのためのINPUT文である。

表IV-10に実際の入力の様子を示す。積分が中断すると、中断の引き金になった変数名(この場合Lcond)が表示される。このとき、任意の変数の値を表示して見ることができるので、状態に応じて対話的に操作量を調整することも可能である。

計算結果を図IV-5に示す。計算は缶が完全に空の状態からはできない(ゼロでの割り算が起こる)ので、少量(100kg)のフィードを60℃で張り込んだ状態を初期条件とした(リストの69, 70行目)。図から液面の制御がスムーズに自動に移行していることがわかる。なお図IV-5は、縦軸を短くして作成したグラフを2枚つなぎ合わせたものである。

この例題では、カセイソーダの濃縮は一段で行われているが、実際のプロセスでは、凝縮器での熱を利用して多重効用化し、同一のエネルギーでさらに濃縮率を高めることが行われている。蒸発缶と凝縮器の部分のモデルをマクロにすれば、このような多重効用缶のシミュレーションも容易に行える。

今回はダイナミックシミュレーションと制御についての事例を紹介した。次回は、EQUATRAN-Mのユーザーから寄せられたさまざまな質問の中からいくつかを取り上げて、EQUATRAN-M使用上のノウハウについて解説する予定である。

参考文献

- 1) 播磨, 北村:ケミカルエンジニアリング, Vol.33, No. 2, P.59 (1987)
- 2) 制御工学ハンドブック編集委員会編:制御工学ハンドブック, P.219, 朝倉書店 (1964)
- 3) Thomas J.McAvoy: Process Dynamics and Control, P.53, The American Chemical Society (1973)
- 4) 化学工学協会編:化学工学便覧 (改訂第四版), P.411, 丸善 (1978)
- 5) 日本科学技術研修所: DPS 利用者マニュアル, 情報処理振興事業協会 (1964)